

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

COMPONENTE CURRICULAR: ANÁLISE QUIMIOMÉTRICA MULTIVARIADA

CARGA HORÁRIA: 60 horas

NUMERO DE CRÉDITOS: 04

PRÉ-REQUISITOS: Introdução à Álgebra Linear

PÚBLICO-ALVO: Bacharelado em Química e Licenciatura em Química

OBJETIVOS Abordar os conceitos e princípios de técnicas quimiométricas para análise multivariada e suas potencialidades e limitações na abordagem de problemas de interesse da pesquisa e desenvolvimento na ciência. Discutir também sua utilidade para o controle de processos e produtos na indústria.

HABILIDADES E COMPETÊNCIAS: Compreender os conceitos e fundamentos teóricos de técnicas quimiométricas multivariadas. Conhecer as potencialidades, limitações e aplicações dessas técnicas a problemas de natureza multivariada, bem como sua utilidade para o controle de processos e produtos. Saber selecionar um método adequado à abordagem do problema de interesse. Mostrar desenvoltura e eficiência na realização de experimentos envolvendo aplicações das técnicas estudadas.

EMENTA / PROGRAMA

INTRODUÇÃO. Definições e Terminologias.

DEFININDO O PROBLEMA. Conhecendo o Sistema; Conhecendo o Problema; Conhecendo a Visão Quimiométrica; Planejamento Experimental: Benefícios do Planejamento Experimental, Etapas do Planejamento do Experimento.

PRÉ-PROCESSAMENTO. Pré-processando as Amostras: Normalização, Ponderação, Filtragem de Ruído Aleatório, Correção da Linha de Base; Pré-processando as Variáveis: Centralização na Média, Ponderação: Por informação a Priori, Escalonamento da Variância, Autoescalonamento, Seleção de Variáveis; Aplicações.

RECONHECIMENTO DE PADRÕES (RP). Introdução; Métodos de RP não Supervisionados: Hierarchical Cluster Analysis (HCA), Principal Components Analysis (PCA); Métodos de RP Supervisionados: K-Nearest Neighbor (KNN), Soft Independent Modelling of Class Analogies (SIMCA); Resumo de Métodos de RP Supervisionados. Aplicações.

CALIBRAÇÃO MULTIVARIADA. Introdução; Métodos Clássicos (CLS) Diretos e Indiretos; Métodos Inversos: Regressão Linear Múltipla (MLR), Regressão em Componentes Principais (PCR), Regressão em Mínimos Quadrados Parciais (PLS); Aplicações.

METODOLOGIA

Aulas expositivas, aulas práticas em laboratório e de exercícios. Apresentação de seminários.

AVALIAÇÃO

Realização de provas e seminários (workshop), bem como a participação nas aulas teóricas e práticas demonstrando domínio das técnicas.

BIBLIOGRAFIA

1. BEEBE, K. R., PELL, R. J., SEASHOLTZ, M. B., *Chemometrics – A Practical Guide*, 1998
2. MARTENS, H., NAES, T., *Multivariate Calibration*, Ed. Wiley, N. York, 1993.
3. MASSART, D. L., VANDEGINSTE, B.G.M., DEMING, S. N., MICHOTTE, Y., KAUFMAN, L., *Chemometrics: A Textbook*, Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1988.
4. OTTO, M., *Chemometrics – Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry*, Ed. Wiley, N. York, 1999.
5. Artigos recentes da literatura.