

Análise Quimiométrica Multivariada

Créditos: 04

Carga Horária: 60 horas

Ementa: Introdução: Definições e Terminologia. Análise Exploratória: Análise de Componentes Principais e Análise de Agrupamentos Hierárquica. Classificação: K-Vizinhos mais Próximos, SIMCA. Calibração Multivariada: Regressão Linear Múltipla, Regressão em Componentes Principais, Regressão em Mínimos Quadrados Parciais. Aplicações. Estado-da-Arte e Tendências.

Programa:

1. Introdução

- Definições
- Terminologias

2. Definindo o Problema

- Conhecendo o Sistema
- Conhecendo o Problema
- Conhecendo a Visão Quimiométrica
- Planejamento Experimental

3. Pré-Processamento

- Pré-processando as Amostras
- Pré-processando as Variáveis
- Aplicações

4. Reconhecimento de Padrões

- Introdução
- Hierarchical Cluster Analysis (HCA)
- Principal Components Analysis (PCA)
- K-Nearest Neighbor (KNN)
- Soft Independent Modelling of Class Analogies (SIMCA)
- Aplicações
- Estado-da-Arte e Tendências.

5. Calibração Multivariada

- Introdução
- Métodos Clássicos (CLS) Diretos e Indiretos
- Regressão Linear Múltipla (MLR)
- Regressão em Componentes Principais (PCR)
- Regressão em Mínimos Quadrados Parciais (PLS)
- Aplicações
- Estado-da-Arte e Tendências.

Referências Bibliográficas:

- Brereton, R. G., "**Chemometrics: Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant**", John Wiley & Sons, Chichester-UK, 2003.

- Massart, D. L., Vandeginste, B.G.M., Deming, S. N., Michotte, Y., Kaufman, L., "**Chemometrics: A Textbook**", Elsevier Science B. V., Amsterdam, 2003.
- Beebe, K. R., Pell, R. J., Seasholtz, M. B., "**Chemometrics—A Practical Guide**", John Wiley & Sons: New York, 1998.
- Martens, H., Naes, T., "**Multivariate Calibration**", John Wiley & Sons, New York, 1992.
- Otto, M., "**Chemometrics—Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry**", Wiley-VCH, New York, 1999.
- Camo A/S, "**The Unscrambler User's Guide**", Trondheim, 2002.
- Artigos recentes da literatura.