

# Programa Analítico de Disciplina

## QUI 313 - Calibração Multivariada em Química Analítica

Departamento de Química - Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas

Catálogo: 2023

Número de créditos: 4

Carga horária semestral: 60h

Carga horária semanal teórica: 2h

Carga horária semanal prática: 2h

Carga horária de extensão: 0h

Semestres: II

### Objetivos

- Apresentar as possibilidades de tratamento de dados multivariados.
- Discutir a problemática de dados multivariados.
- Instrumentalizar, teórica e praticamente, como tratar eficientemente dados multivariados.

### Ementa

Introdução à quimiometria. Definição do problema e organização dos dados. Erros e tratamento dos dados analíticos. Introdução à calibração em Química. Métodos algébricos aplicados à calibração multivariada. Análise das componentes principais (PCA). Regressão através das componentes principais e por quadrados mínimos parciais (PCR, PLS). Construindo e validando modelos de calibração multivariada. Programas computacionais usados para realizar regressões multivariadas.

### Pré e correquisitos

QUI 310 e EST 105 e MAT 137

### Oferecimentos obrigatórios

*Não definidos*

### Oferecimentos optativos

Curso	Grupo de optativas
Licenciatura em Química	Geral
Química - Bacharelado	Geral
Química - Licenciatura (Integral)	Geral

## QUI 313 - Calibração Multivariada em Química Analítica

Conteúdo					
Unidade	T	P	ED	Pj	To
1. <b>Introdução à quimiometria</b> 1. Definição 2. Origens na psicologia e na economia 3. Primeiras aplicações em química	2h	0h	0h	0h	2h
2. <b>Definição do problema e organização dos dados</b>	2h	0h	0h	0h	2h
3. <b>Erros e tratamento dos dados analíticos</b>	2h	0h	0h	0h	2h
4. <b>Introdução à calibração em Química</b> 1. Calibração univariada 2. Calibração multivariada	2h	0h	0h	0h	2h
5. <b>Métodos algébricos aplicados à calibração multivariada</b>	4h	0h	0h	0h	4h
6. <b>Análise das componentes principais (PCA)</b>	4h	0h	0h	0h	4h
7. <b>Regressão através das componentes principais e por quadrados mínimos parciais (PCR, PLS)</b>	4h	0h	0h	0h	4h
8. <b>Construindo e validando modelos de calibração multivariada</b>	4h	0h	0h	0h	4h
9. <b>Programas computacionais usados para realizar regressões multivariadas</b> 1. Introdução ao Matlab 2. Uso do Matlab para escrever funções e scripts 3. Uso de pacotes no Mathlab 4. Aplicações da calibração multivariada usando o Matlab e programas computacionais	6h	0h	0h	0h	6h
10. <b>Introdução ao software Matlab</b>	0h	4h	0h	0h	4h
11. <b>Manipulando valores e matrizes no Matlab</b>	0h	2h	0h	0h	2h
12. <b>Construindo scripts e funções no Matlab</b>	0h	4h	0h	0h	4h
13. <b>Importando e exportando dados a partir do Matlab</b>	0h	4h	0h	0h	4h
14. <b>Usando pacotes de algoritmos para quimiometria no Matlab</b>	0h	4h	0h	0h	4h
15. <b>Construindo e validando modelos usando o Matlab</b>	0h	6h	0h	0h	6h
16. <b>Apresentação do software Pirouette</b>	0h	2h	0h	0h	2h
17. <b>Construindo e validando modelos usando o software Pirouette</b>	0h	4h	0h	0h	4h
<b>Total</b>	<b>30h</b>	<b>30h</b>	<b>0h</b>	<b>0h</b>	<b>60h</b>

Teórica (T); Prática (P); Estudo Dirigido (ED); Projeto (Pj); Total (To);

Planejamento pedagógico	

A autenticidade deste documento pode ser conferida no site <https://siadoc.ufv.br/validar-documento> com o código: B6HZ.QN2T.G5IX

<b>Carga horária</b>	<b>Itens</b>
Teórica	Apresentação de conteúdo oral e escrito em quadro convencional; e Apresentação de conteúdo oral e escrito com o apoio de equipamento (projektor, quadro-digital, TV, outros)
Prática	Prática executada por todos os estudantes, Resolução de problemas e Desenvolvimento de projeto
Estudo Dirigido	Estudo dirigido e Resolução de problemas
Projeto	<i>Não definidos</i>
Recursos auxiliares	<i>Não definidos</i>

**QUI 313 - Calibração Multivariada em Química Analítica****Bibliografias básicas**

Descrição	Exemplares
BEEBE, K.R.; PELL, R.J.; SEASHOLTZ, M.B. Chemometrics: a practical guide. New York: Wiley, 1998.	1
BRERETON, R.G. Chemometrics: data analysis for the laboratory and chemical plant. Chichester: Wiley, 2006.	2

**Bibliografias complementares**

Descrição	Exemplares
BRERETON, R.G.; SCOTT, D.R.; MASSART, D.L.; DESSY, R.E.; HOPKE, P.K.; WEGSCHEIDER, W. Chemometrics Tutorials II. Elsevier, 1992.	1
DEMING, S.N.; MORGAN, S.L. Experimental Design: a Chemometric Approach. New York: Elsevier, 1987.	1
DEMING, S.N.; MICHOTTE, Y.; MASSART, D.L.; KAUFMAN, L.; VANDEGINSTE, B.M.G. Chemometrics a textbook. Amsterdam: Elsevier, 1988.	1
GOLUB, G.H.; VAN LOAN, C.F. Matrix Computations. Baltimore: Johns Hopkins University Press, 1996.	1
HARALD, M.; NAES, T. Multivariate calibration. New York: J. Wiley, 1996.	1
KOWALSKI, B.R. Chemometrics. Mathematics and Statistics in Chemistry. Dordrecht: Reidel, 1983.	1
KRAMER, R. Chemometric Techniques for Quantitative Analysis. Marcel Dekker, 1998.	1
MASSART, D.L. Evaluation and Optimization of Laboratory Methods and Analytical Procedures. Elsevier, 1998.	1
MASSART, D.L.; BRERETON, R.G.; DESSY, R.E.; HOPKE, P.K.; SPIEGELMAN, C.H.; WEGSCHEIDER, W. Chemometrics Tutorials. Elsevier, 1990.	1
MASSART, D.L.; LEWI, P.J. Principal Components. Elsevier, 1994.	1
MASSART, D.L.; VANDERGINSTE, G.M. Handbook of Chemometrics and Qualimetrics. Part A and B. Elsevier, 1998.	1
NETO, B. de B.; SCARMÍNIO, I.S.; BRUNS, R.E. Planejamento e Otimização de Experimentos. Editora da Unicamp, 1995.	1
SHARAF, M.A.; ILLMAN, D.L.; KOWALSKI, B.R. Chemometrics. New York: J. Wiley, 1986.	1