



UNIVERSIDADE FEDERAL DE VIÇOSA

ESTE DOCUMENTO NÃO SUBSTITUI O ORIGINAL

Programa Analítico de Disciplina

QUI313 Calibração Multivariada em Química Analítica

Departamento de Química - Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas

Número de créditos: 4		<u>Teóricas</u>	<u>Práticas</u>	<u>Total</u>
Duração em semanas: 15	Carga horária semanal	2	2	4
Períodos - oferecimento: II	Carga horária total	30	30	60

Pré-requisitos (Pré ou co-requisitos)*

QUI310 e EST105 e MAT137

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.

Oferecimento aos Cursos

Curso	Modalidade	Período
Licenciatura em Química(LIC)	Optativa	-
Química(BAC)	Optativa	-
Química(LIC)	Optativa	-



UNIVERSIDADE FEDERAL DE VIÇOSA

ESTE DOCUMENTO NÃO SUBSTITUI O ORIGINAL

QUI313 Calibração Multivariada em Química Analítica

Seq	Aulas Teóricas	Horas/Aula
1	Introdução à quimiometria 1.1. Definição 1.2. Origens na psicologia e na economia 1.3. Primeiras aplicações em química	2
2	Definição do problema e organização dos dados	2
3	Erros e tratamento dos dados analíticos	2
4	Introdução à calibração em Química 4.1. Calibração univariada 4.2. Calibração multivariada	2
5	Métodos algébricos aplicados à calibração multivariada	4
6	Análise das componentes principais (PCA)	4
7	Regressão através das componentes principais e por quadrados mínimos parciais (PCR, PLS)	4
8	Construindo e validando modelos de calibração multivariada	4
9	Programas computacionais usados para realizar regressões multivariadas 9.1. Introdução ao Matlab 9.2. Uso do Matlab para escrever funções e scripts 9.3. Uso de pacotes no Mathlab 9.4. Aplicações da calibração multivariada usando o Matlab e programas computacionais	6



UNIVERSIDADE FEDERAL DE VIÇOSA

ESTE DOCUMENTO NÃO SUBSTITUI O ORIGINAL

QUI313 Calibração Multivariada em Química Analítica

QUI313 Calibração Multivariada em Química Analítica

Seq	Aulas Práticas	Horas/Aula
1	Introdução ao software Matlab	4
2	Manipulando valores e matrizes no Matlab	2
3	Construindo scripts e funções no Matlab	4
4	Importando e exportando dados a partir do Matlab	4
5	Usando pacotes de algoritmos para quimiometria no Matlab	4
6	Construindo e validando modelos usando o Matlab	6
7	Apresentação do software Pirouette	2
8	Construindo e validando modelos usando o software Pirouette	4



UNIVERSIDADE FEDERAL DE VIÇOSA

ESTE DOCUMENTO NÃO SUBSTITUI O ORIGINAL

QUI313 Calibração Multivariada em Química Analítica

Referências Bibliográficas

Bibliografia Básica:

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

Bibliografia Complementar:

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



UNIVERSIDADE FEDERAL DE VIÇOSA

ESTE DOCUMENTO NÃO SUBSTITUI O ORIGINAL

15 - SHARAF, M.A.; ILLMAN, D.L.; KOWALSKI, B.R. Chemometrics. New York: J. Wiley, 1986.
[Exemplares disponíveis: 1]