

## PROGRAMA DE DISCIPLINA

<b>Código: QUI-B10</b>	<b>Nome: TEQI Análise Covariante de Dados</b>			
	<b>Teórica</b>	<b>Prática</b>	<b>Total</b>	<b>Unidade: INSTITUTO DE QUÍMICA</b>
<b>Carga Horária</b>	34	00	34	<b>Departamento:</b>
<b>Créditos</b>	02	00	02	Curso(s): MESTRADO / DOUTORADO
<b>Módulo</b>				<b>SEMESTRE:</b>

### EMENTA

Dar uma visão geral da aplicação da estatística multivariada em química. Mostrar a aplicação dos métodos estatísticos de análise covariante de dados. Utilizar programas estatísticos, relacionados aos tópicos do curso, para tratamento de dados químicos reais.

### METODOLOGIA

Aula expositiva participada. Aula prática com o uso dos softwares de análise covariante licenciados para a instituição, como sejam Orgin Pro8®, Matlab®, Unscrambler®, etc.

### CONTEÚDO PROGRAMÁTICO (TÓPICOS)

1. Relevância e necessidade da Quimiometria mostrando exemplos concretos da aplicação dos métodos de análise multivariada à Química.
2. Introdução à Estatística
3. Análise Exploratória dos dados:
  - Definição do problema.
  - Organização dos dados.
  - Visualização dos dados originais.
  - Transformação/processamento dos dados:
    - PCA: Análise de Componentes Principais. Covariância. A matriz de variância-covariância. Técnica. Interpretação dos resultados.
    - HCA: Análise Hierárquica de Agrupamentos. Técnica. Interpretação dos resultados.
    - PLS: Mínimos quadrados parciais. Técnica. Interpretação dos resultados.
  - Construção de modelos de classificação: Reconhecimento de padrões por SIMCA,

### BIBLIOGRAFIA

- R.G. BRERETON, Chemometrics : Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant, Wiley (Chichester, 2003).
- HÄRDLE, W. E SIMAR, L. Applied Multivariate Statistical Analysis , 2d edition, Springer. 2007
- ANDRIOTTI, J. L. S. Fundamentos de Estatística e Geoestatística. Ed. UNISINOS, São Leopoldo, 165p. 2003.
- FOTHERINGHAM, A. S.; BRUNSDON. C.; & CHARLTON, M. Quantitative Geography. Perspectives on Spatial Data Analysis. SAGE, London, 270p, 2000.
- HAIR, J. F.; ANDERSON, R.E.; TATHAM, R.L.; BLACK, W.C. Análise multivariada de dados. 6. ed. Porto Alegre: Bookman, 688p, 2009. ISBN 9788577804023
- HARDLE, W. & SIMAR, L. Applied Multivariate Statistical Analysis. Second Edition Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007. ISBN 9783540722441 - SPRINGERLINK (ONLINE SERVICE).
- MINGOTI, S. A. Análise de dados através de métodos de estatística multivariada: uma abordagem aplicada. Editora UFMG, Belo Horizonte, 295 p. 2005. ISBN 857041451x
- Manual do software a ser utilizado pelos alunos.

WESOLOWSKI, M.; SUCHACZ, B.; "Classification of Rapeseed and Soybean Oils by Use of Unsupervised Pattern-Recognition Methods and Neural Networks"; Fresenius J. Anal. Chem.; 371; 323-330, 2001.

---

\_\_\_\_/\_\_\_\_/\_\_\_\_

\_\_\_\_\_  
Coordenador

---