



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS
PROGRAMA DE PÓS – GRADUAÇÃO EM QUÍMICA



SÚMULA DA DISCIPLINA DO PPGQ/UFPA

DISCIPLINA: **QUIMIOMETRIA** (disciplina eletiva)

a) **Código da disciplina:** PPGQI0026

b) **Carga Horária:** 60h

c) **Créditos:** 4

d) **Ementa:** Medidas de tendência central e medidas de dispersão. Intervalos de confiança. Testes de significância. ANOVA. Regressão linear por mínimos quadrados. Análise multivariada. Introdução ao programa estatística. Análise estatística usando o programa estatística: média; desvio padrão; erros; intervalos de confiança; testes de significância; ANOVA; regressão linear; análise hierárquica de agrupamento (AHA) e análise de componentes principais (ACP). Estudos de casos: tratamento dos resultados experimentais obtidos nos laboratórios de química e em artigos da área. Construção de Modelos de Calibração: Regressão por Componentes Principais (PCR) e Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS). Construção de Modelos de Classificação (Reconhecimento de Padrões): KNN e SIMCA.

e) Bibliografia

I - Básica

- 1) FERREIRA, M.M.C. **Quimiometria: Conceitos, Métodos e Aplicações**. Editora da Unicamp, 2015.
- 2) BEEBE, K.R.; PELL, R.J., SEASHOLTZ, M.B. **Chemometrics A Practical Guide**. John Wiley & Sons, 1998.
- 3) BRERETON, R. G. **Applied Chemometrics for Scientists**. Wiley & Sons, 2007.

Programa de Pós – Graduação em Química (PPGQ-ICEN/UFPA)

Endereço: Rua Augusto Corrêa, 01 – Campus Universitário Básico do Guamá
Belém - Pará – Brasil – CEP: 66.075 - 110

II – Complementar

- 1) FERREIRA, M.M.C.; ANTUNES, A.M., MELGO, M.S., VOLPE, P. L. O. **Quimiometria I: calibração multivariada, um tutorial.** Química Nova, vol.22, n.5, p., 1999.
- 2) CORREIA, P.R.M.; FERREIRA, M.M.C. **Reconhecimento de padrões por métodos não supervisionados: explorando procedimentos quimiométricos para tratamento de dados analíticos.** Química Nova, vol.30, n.2, p.481-487, 2007.
- 3) FERREIRA, M.M.C. **QUIMIOMETRIA III – Revisitando a análise exploratória dos dados multivariados.** Química Nova, vol. 45, n.10, p.1251-1264, 2022.