

SÚMULA DA DISCIPLINA ENSINO REMOTO EMERGENCIAL

1. Identificação

Nome disciplina: QUP 176 – Tópicos Especiais em Quimiometria

Professores responsáveis: Adriano de Araújo Gomes e Marco Flôres Ferrão

Nível: Mestrado e Doutorado

Carga horária: 30 horas

Créditos: 2

Revisado e atualizado em: Junho_2020

2. Ementa

Conceitos em álgebra linear e estatística. Geração e organização de dados multiway. Fundamentos e aplicação da calibração multiway. Métodos de Tucker. Análise de fatores paralelos (PARAFAC e PARAFAC2). Resolução de curvas multivariadas (MCR). Análise de componentes independentes (ICA). Métodos baseados em multilinearização residual (U-PLS, NPLS). Fusão de dados. Figuras de mérito em calibração e classificação.

3. Objetivo

Entender e aplicar as diferentes técnicas de tratamento de dados multivariados/multiway na solução de problemas de classificação e calibração relacionados a áreas diversas como: química, materiais, farmacêutica, forense, ambiental dentre outras. Reconhecer as vantagens e limitações de cada técnica.

4. Conteúdo Programático

- Quimiometria: uma breve introdução.
- Conceitos de álgebra linear e estatística.
- Geração e organização de dados
- Fundamentos e aplicações da calibração multiway.
- Métodos de Tucker, Análise de Fatores Paralelos (PARAFAC) e suas variantes (PARAFAC2, PARALIND).
- Resolução de curvas multivariadas (MCR).
- Análise de componentes independentes (ICA).
- Métodos baseados e multilinearização residual (U-PLS, N-PLS).
- Fusão de dados e figuras de mérito em calibração e classificação.

5. Avaliação

A avaliação ocorrerá através da análise de artigos científicos, seminários e estudos dirigidos (via Moodle). Será considerado aprovado o aluno que obtiver conceito final A, B ou C, atribuídos conforme relação abaixo: A - Ótimo (90 a 100%) B - Bom (75% a 89%) C - Regular (60 a 74%) D - Insuficiente (abaixo de 60%) FF - Sem frequência

6. Método de Trabalho/Ensino

Disciplina de caráter teórico-prático ministrada em modo remoto, consistindo de aulas expositivas e utilização dos aplicativos computacionais disponíveis no IQ/UFRGS acessado via Proxy/UFRGS.

7. Bibliografia (Todos os e-books serão disponibilizados no sistema moodle)

- S. D. Brown, R. Taule, r B. Walczak. Comprehensive Chemometrics, Elsevier Science, 2009.
- A. M. Peña, H. C. Goicoechea, G. M. Escandar, A. C. Olivieri. Fundamentals and Analytical Applications of Multiway Calibration. Data Handling in Science and Technology, Elsevier Science, 2015. - G. M; Escandar, A. C. Olivieri, Practical Three-Way Calibration Elsevier Science, 2014.
- A. Smilde, R. Bro, P. Geladi, Multi-way Analysis: Application in the chemical sciences. Jhon Wiley, LTDA, 2004.
- R. G. Brereton, CChemometrics: Data analysis for the laboratory and chemical plants. John Wiley & Sons Ltd, 2003.
- Artigos recentes.