Disciplina: Quimiometria		
Professor Responsável: Patricia Valderrama		
Obrigatória (S/N): N	**Carga Horária:** 45h	**Créditos**: 3
Área de Concentração: Inovações Tecnológica		
Linha de Pesquisa: Análise de Dados para Inovação e Desenvolvimento Tecnológico		

Ementa:

- Tipos de dados.
- Análise exploratória e reconhecimento de padrões, Análise de Componentes Principais (PCA), Análise Hierárquica (HCA), Mínimos Quadrados Parciais com Análise Discriminante (PLS-DA), Modelos Independentes de Similaridade Utilizando Componentes Principais (SIMCA).
- Calibração multivariada de primeira ordem Mínimos Quadrados Clássicos (CLS), Regressão Linear Múltipla (MLR), Regressão em Componentes Principais (PCR), Mínimos Quadrados Parciais (PLS).
- Identificação de outliers. Seleção de variáveis. Validação. Métodos de resolução de sinais, Resolução Multivariada de Curvas com Mínimos Quadrados Alternantes (MCR-ALS) e Análise de Componentes Independentes (ICA).

Bibliografia:

- MARTENS, H.; NAES, T.; Multivariate calibration, Wiley: New York, 1996.
- BEEBE, K.R.; PELL, R.J.; SEASHOLTZ, M.B.; Chemometrics: A practical guide, Wiley: New York, 1998.
- VANDEGINSTE, B.G.M.; MASSART, D.L.; BUYDENS, L.M.C.; JING, S.; LEWI, P.J.; SMEYERS-VERBEKE, J.; Handbook of Chemometrics and Qualimetrics: Part B, Elsevier: Amsterdam, 1998.
- OTTO, M.; Chemometrics, Wiley: Weinheim, 1999.
- BROWN, S.D.; TAULER, R.; WALCZAK, B.; Comprehensive Chemometrics: Chemical and Biochemical Data Analysis. Volumes 1, 2, 3 e 4, Elsevier: Amsterdam, 2009.
- Artigos publicados em periódicos científicos, por exemplo, Química Nova.