



UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL PARANÁ
DEPARTAMENTO ACADÊMICO DE QUÍMICA E BIOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

QUIMIOMETRIA

Nível: Mestrado Acadêmico

Área de Concentração: Química

Carga Horária: 45

Créditos: 3

Ementa: 1- Estatística básica (média, mediana, desvio padrão, testes t pareado e não pareado, histogramas, ...); 2 - Análise exploratória e métodos de não-supervisionados de classificação (PCA e HCA); 3- Métodos supervisionados de classificação (SIMCA, KNN e PLS-DA); 4 - Métodos de seleção de variáveis (GA e APS); 5- Calibração multivariada (Partial Least Squares-PLS, Principal Component Regression-PCR).

Bibliografia:

1. Kenneth R. Beebe, Randy J. Pell, Mary Beth Seasholtz. Chemometrics: A Practical Guide: Wiley, 1998.
2. Richard G. Brereton. Chemometrics: Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant. John Wiley & Sons, 2003.
3. McLennan, F.; Kowalski, B. D., Process Analytical Chemistry, Heidelberg: Springer, 1995.
4. Richard G. Brereton. Chemometrics: Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant. John Wiley & Sons, 2003.