



CENTRO TÉCNICO CIENTÍFICO  
DEPARTAMENTO: QUÍMICA

---

**QUI2672**                    **Tópicos Especiais de Química Analítica (Quimiometria I)**

Carga Horária Total: 4 h semanais

Créditos: 4 cr

Pré-requisito: - x -

Professor Responsável:

---

**OBJETIVOS**

Introduzir os conceitos de estatística básica e avançada aplicados ao R em quimiometria, apresentar técnicas de tratamento e interpretação de dados, introduzir pacotes estatísticos para exposição de dados científicos e aquisição de dados, oferecer os conceitos básicos e avançados de estatística com sua respectiva aplicação em quimiometria utilizando software gratuito R-Cran.

**EMENTA**

I) Revisão dos conceitos estatísticos básicos (descritores de posição e dispersão), comparando variâncias, testes *t-Student*, Análise de variância (ANOVA), testes correspondentes não-paramétricos; II) Introdução à programação R e suas aplicações em estatística univariada; III) Conceitos básicos de álgebra linear, análise de dados multivariados com programação R, pré-tratamento de dados, análise de componentes principais, análise de cluster, regressão pelo métodos dos quadrados mínimos clássico, inverso e parciais, validação de modelos de regressão multivariada.

**PROGRAMA**

Parte 1. Introdução Descritores de localização e dispersão, revisão da estatística de inferência com critério de escolha para uso de teste *t-Student*, teste *t-Student* para dados pareados, análise de variância (ANOVA) univariada, de dois fatores e de classificação hierárquica; testes não paramétricos (Kruskal-Wallis, Wilcoxon, Mann-Whitney), Cálculo dos efeitos principais e interações.

Parte 2. Introdução à programação R: a) Histórico do programa R, b) Pacotes do R; c). Comandos básicos no R; d). Entrada de dados; e). Representação gráfica; Estatística Básica no R: análise de dados univariados: a) Medidas de localização e dispersão; b). Distribuições de probabilidades; c) Homocedasticidade; d) Teste de hipóteses. e) Análise de variância; f) Teste de Kruskal-Wallis; g) Teste de Friedman; h) Transformação Box-Cox; i) Coeficientes de correlação e covariância.

Parte 3. Análise de dados multivariados e estatística avançada com programação R: Álgebra linear básica no R: a) nomenclatura, b) espaços vetoriais, c) operações com matrizes, d) autovalores, autovetores e diagonalização; Análise de dados multivariados: a) Preparação de dados para análise; b) Organização e visualização de dados multivariados; c) Pré-tratamento de dados multivariados: técnicas de alisamento, correção de linha de base e outras informações importantes que devem ser estudadas antes da criação dos modelos quimiométricos; d) Análise exploratória dos dados: análise de componentes principais, análise de cluster; e) Análise de regressão multivariada: regressão pelo métodos dos quadrados mínimos clássico, inverso e parciais, f) Validação de modelos de regressão multivariada: detecção de amostras anômalas, escolha do número de fatores do modelo, seleção de variáveis

**AVALIAÇÃO**

A avaliação ocorrerá através de exercícios/tarefas diárias em sala de aula. Além disso, os alunos terão que fazer uma apresentação utilizando os conceitos aprendidos na disciplina para solução de um problema da área de química.

**BIBLIOGRAFIA PRINCIPAL**

1. MILLER, J. N.; MILLER, J. C. Statistics and chemometrics for analytical chemistry. 4th ed.; Harlow: Pearson Education, 2000.
2. FERREIRA, M. M. C.; Quimiometria: Conceitos, Métodos e Aplicações. Editora da Unicamp; 1ª edição (1 janeiro 2015), ISBN-10: 8526810634
3. BRO, R. and SMILDE, A.K., Principal component analysis, Anal. Methods, 2014, 6, 2812, <https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2014/ay/c3ay41907j>

**BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR**

1. FILZMOSER, P.; VARMUZA, K. 2017. chemometrics: Multivariate Statistical Analysis in Chemometrics. R package version 1.4.2. <https://CRAN.R-project.org/package=chemometrics>
2. HUSSON, F.; Lê S.; PAGES, J. 2011. Exploratory multivariate analysis by example using R. CRC Press - Taylor & Francis Group. ISBN 978-1-4398-3580-7
3. OTTO, M., Chemometrics: Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry, Editora : Wiley-Vch; 3rd ed. edição (27 dezembro 2016), ISBN-10 : 3527340971
4. FERREIRA, M. M. C.; ANTUNES, A. M.; MELGO, M. S.; VOLPE, P. L. O. Quimiometria I: calibração multivariada, um tutorial Quím. Nova 22 (5) • Set 1999 <https://doi.org/10.1590/S0100-40421999000500016>