

QMC 903 - Métodos Multivariados de Calibração

[90 horas/06 créditos]

Ementa da Disciplina

Conceitos básicos e aspectos metodológicos na calibração multivariada. Análise de componentes principais. Regressão por componentes principais. Métodos de calibração multivariada.

Programa Detalhado:

I. Conceitos básicos e aspectos metodológicos:

Histórico e classificação dos métodos de calibração, operações com matrizes

II. Análise de componentes principais:

Representação de uma matriz de dados, o espaço das variáveis, o primeiro componente principal, componentes principais de ordem superior, mapa das amostras, mapa das variáveis, resíduos. Aplicações de análise por PCA.

III. Regressão por componentes principais:

MLR, PCR, PLS1, PLS2, exemplos e aplicações práticas.

LITERATURA:

1. ESBENSEN, K.; Multivariate Analysis - in practice, CAMO, 1998
2. MARTENS H. & NAES, T. Multivariate Calibration, Wiley, 1991
3. ADAMS, J. Chemometrics in analytical spectroscopy, RSC, Analytica Spectroscopy Monographs. The Royal Society of Chemistry, 1995
4. MORGAN, E. CHEMOMETRICS: Experimental Design. John Wiley & Sons, 1991.
5. BARROS NETO, B.; SCARMINIO, I. E. & BRUNS, R. E. Planejamento e otimização de experimentos. Editora da UNICAMP, 1995.
6. MILLER, J. Statistics And Chemometrics For Analytical Chemistry, PRENTICE-HALL INTERNATIONAL, 2005
7. Artigos atuais de revisão da literatura