

CURSO: TRATAMENTO QUIMIOMÉTRICO DE DADOS APLICADO À RMN

PROFESSOR: Ronei Jesus Poppi (UNICAMP)

LIMITE DE VAGAS: Mínimo = 05 e Máximo = 20

PRÉ-REQUISITO RECOMENDADO: curso INTRODUÇÃO À DETERMINAÇÃO ESTRUTURAL E ASSINALAMENTO DE PEQUENAS MOLÉCULAS POR RMN

EMENTA

Quimiometria: definições e aplicações; vetores e matrizes; reconhecimento de padrões e classificação; resolução multivariada de curvas; calibração multivariada; métodos não lineares baseados em aprendizagem de máquina. Utilização de programas computacionais para tratamento de dados.

PROGRAMA

- Quimiometria: definições
- Noções de álgebra, vetores e matrizes
- Pré-processamentos: correção da linha base, alinhamento e normalização
- Análise de Componentes Principais
- Análise não supervisionada
- Análise de Agrupamentos
- Classificação supervisionada
- Introdução à calibração multivariada
- PLS-DA
- Seleção de variáveis
- Resolução multivariada de curvas
- Métodos não lineares
- Máquinas de vetor de suporte
- Florestas randômicas

Bibliografia:

1. D. L. Massart, B. G. M. Vandeginste, L. M. C. Buydens, S. de Jong, P. J. Lewi, J. Smeyers-Verbeke, "Handbook of Chemometrics and Qualimetrics : Part B", Elsevier, Amsterdam, 1998.
2. R. G. Brereton, "Chemometrics–Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant", Wiley, Chichester, 2003.
3. M. Otto, "Chemometrics -Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry", Wiley-VCH, Weinheim, 1999.
4. M. J. Adams, "Chemometrics in Analytical Spectroscopy", The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 1995.
5. H. Martens e T. Naes, "Multivariate Calibration", Wiley, New York, 1991.