

ATENÇÃO: PARA ESSE CURSO É ACONSELHÁVEL O USO DE SEU COMPUTADOR PESSOAL PARA INSTALAÇÃO DOS PROGRAMAS QUE SERÃO UTILIZADOS DURANTE AS AULAS

CURSO: RMN E QUIMIOMETRIA APLICADAS NA ANÁLISE DE MATRIZES COMPLEXAS

NÚMERO DE CRÉDITOS: 02

PROFESSORES: Elenilson G. Alves Filho (Universidade Federal do Ceará/EMBRAPA LMQPN) e Lorena Mara A. Silva (EMBRAPA LMQPN)

LIMITE DE VAGAS: não há

PRÉ-REQUISITO RECOMENDADO: não há

OBJETIVOS: Capacitar o aluno a realizar análises multivariadas tratando os dados com os métodos apresentados; interpretar os resultados obtidos, criando modelos matemáticos; e testar os modelos em relação ao seu desempenho e à previsibilidade.

PROGRAMA

Teoria e aplicações quimiométricas de RMN na avaliação de matrizes complexas, como alimentos (*foodomics*), fluidos biológicos e produtos naturais para a detecção de adulterações, *fingerprints*, estudo de estresse biótico e abiótico de plantas e predições multivariadas. O curso será dividido em aulas teóricas e práticas no ambiente computacional Matlab – PLS_Toolbox.

1. Introdução;
2. Características gerais da análise multivariada;
3. Visualização dos dados;
4. Pré-tratamentos e processamentos
5. Análise exploratória;
6. Análise de Componentes Principais (PCA): *scores* e *loadings*; diferenças entre PCA e Análise Fatorial; validação de modelos;
7. Análise de Agrupamentos Hierárquicos (HCA): usos e tipos de análises de agrupamentos; medidas de distâncias;
8. Análises classificatórias. Método dos vizinhos mais próximos. Modelagem de analogia de classe por similaridade (PLS-DA e SIMCA);
9. Calibração e regressão por mínimos quadrados parciais com ou sem análise discriminante: método dos mínimos quadrados parciais para estimativas de variáveis preditas a partir de um número menor de variáveis preditoras

(componentes ou variáveis latentes) e análise discriminante - o problema da separação de grupos; validação dos modelos;

10. Seleção de variáveis;

11. Exercícios práticos: análise de dados e problemas trazidos pelos alunos, de preferência relacionados às suas dissertações/teses.

Bibliografia

1. Bro, R.; Smilde, A. K., Principal component analysis. *Analytical Methods* 2014, 6, 2812-2831.
2. Correia, P. R. M.; Ferreira, M. M. C., Reconhecimento de padrões por métodos não supervisionados: explorando procedimentos quimiométricos para tratamento de dados analíticos. *Química Nova* 2007, 30, 481-487.
3. Souza, A. M. d.; Poppi, R. J., Experimento didático de quimiometria para análise exploratória de óleos vegetais comestíveis por espectroscopia no infravermelho médio e análise de componentes principais: um tutorial, parte I. *Química Nova* 2012, 35, 223-229.
4. Souza, A. M. d.; Breitkreitz, M. C.; Filgueiras, P. R.; Rohwedder, J. J. R.; Poppi, R. J., Experimento didático de quimiometria para calibração multivariada na determinação de paracetamol em comprimidos comerciais utilizando espectroscopia no infravermelho próximo: um tutorial, parte II. *Química Nova* 2013, 36, 1057-1065.
5. Beebe, K. R.; Pell, R. J.; Seasholtz, M. B., *Chemometrics: a practical guide*. Wiley: 1998.
6. Canal no You Tube da Universidade de Copenhagen (prof. Rasmus Bro): QualityAndTechnology - Playlist dedicada a explicar a base da técnica de Análise de Componentes Principais (PCA) e alguns outros recursos avançados (<https://www.youtube.com/channel/UCFxfyqM00LnjFl4xJgf0Fw>).