

CARGA HORÁRIA: 24h

EMENTA

PARTE TEÓRICA

- Dados univariados e multivariados;
- Distribuições de probabilidade;
- Introdução à inferência estatística;
- Análise descritiva de dados multivariados;
- Análise de Componentes Principais (PCA);
- Análise de Redundância (RDA);
- Análise Hierárquica de Agrupamentos (HCA);
- Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS);
- Análise Discriminante pelos Mínimos Quadrados Parciais (PLS-DA);
- Classificação via k -NN: os k vizinhos mais próximos;
- Estruturação dos dados de RMN;
- Seleção de variáveis, *buckets* e pré-processamento dos dados de RMN.

PARTE PRÁTICA

- Exportação automatizada de dados de RMN;
- Conceitos gerais sobre o programa R;
- Introdução à programação em R;
- Estruturação de algoritmos utilizados no tratamento dos dados de RMN no programa R;
- Compreendendo os diferentes algoritmos existentes para executar PCA, RDA, HCA, PLS, PLS-DA e k -NN no programa R;
- Análises estatísticas de dados reais de RMN no programa R, incluindo um estudo de caso sobre a importância de dados de RMN quantitativos.

BIBLIOGRAFIA

1. Bussab, W. O.; Morettin, P. A.; Estatística Básica, Ed. Saraiva, São Paulo, 2004.

2. Mingoti, S. A.; *Análise de Dados Através de Métodos de Estatística Multivariada: Uma Abordagem Aplicada*, Ed. UFMG, Belo Horizonte, 2005.
3. Ferreira, M. M. C.; *Quimiometria: Conceitos, Métodos e Aplicações*, Ed. Unicamp, Campinas, 2015.
4. Brereton, R. G.; *Applied Chemometrics for Scientists*, Ed. Wiley, Chichester, 2007.
5. Wehrens, R.; *Chemometrics with R: Multivariate Data Analysis in the Natural Sciences and Life Sciences*, Ed. Springer, New York, 2011.