



Governo do Estado do Rio de Janeiro  
Secretaria de Estado de Ciência e Tecnologia  
Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro  
SECRETARIA ACADÊMICA/REITORIA

## PROGRAMA ANALÍTICO DE DISCIPLINA

Disciplina: PCN1742 - Análise Multivariada de Dados em Ciências Naturais

CCT/LCQUI - Laboratório de Ciências Químicas

Início: 2022/2

Pré-requisito(s): não tem

Co-requisito(s): não tem

Equivalência(s): não tem

Carga horária: 85 (34 teóricas , 0 práticas, 51 extraclasse)

Créditos: 3

Tipo de aprovação: Média/Frequência

### EMENTA

Elementos de estatística básica;  
Elementos de álgebra Linear e geometria analítica;  
Pré-processamento de dados;  
Análise exploratória de dados (PCA e HCA)  
Classificação supervisionada (PLS-DA e SIMCA)  
Calibração multivariada (CLS, RLM, PCR e PLS)  
Validação analítica multivariada  
Atividades extra-classe (51h)

O estudante deverá realizar três estudos dirigidos:

1º Estudo Dirigido:

Pré-processamento de dados;

Análise exploratória de dados (PCA e HCA)

2º Estudo Dirigido:

Classificação supervisionada (PLS-DA e SIMCA)

3º Estudo Dirigido:

Calibração multivariada (CLS, RLM, PCR e PLS)

Apresentação de seminário:

Cada estudante deverá apresentar um seminário sobre um dos temas abordados

### CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

Introdução a Quimiometria e Revisão de Estatística 04h

Revisão de Álgebra Linear e Geometria Analítica 04h

Pré-processamento de dados e Análise Exploratória de Dados (PCA e HCA) 04h

Aula Prática de PCA e HCA 02h

Classificação Supervisionada (PLS-DA e SIMCA) 06h

Aula Prática de PLS-DA e SIMCA 02h

Revisão de Calibração Univariada e Introdução a Calibração multivariada (CLS, RLM e PCR) 02h

Calibração multivariada (PLS) e Validação analítica multivariada 04h

Aula Prática de PLS 02h

Apresentação de seminários 04h

### BIBLIOGRAFIA

1-Quimiometria: conceitos, métodos e aplicações. Autor: Márcia Miguel Castro Ferreira. | Editora: EDITORA UNICAMP. Categoria: QUÍMICA. Ano: 2015



Governo do Estado do Rio de Janeiro  
Secretaria de Estado de Ciência e Tecnologia  
Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro  
SECRETARIA ACADÊMICA/REITORIA

2-Chemometrics with R: Multivariate Data Analysis in the Natural Sciences and life Sciences, Ron Wehrens, Springer, Heidelberg, 2011.

3-Sena, M. M.; Almeida, M. R.; Braga, J. W. B.; Poppi, R. J. Multivariate Statistical Analysis and Chemometrics. Em: Adriana S. Franca; Leo M L Nollet. (Org.). Spectroscopic Methods in Food Analysis. 1st ed. Boca Raton, USA: CRC Press (Taylor & Francis Group), 2017, Cap.10, p. 273-314.

4-Sтивен Brown, Рома Tauler, Beata Walczak. Comprehensive Chemometrics - Chemical and Biochemical Data Analysis (Elsevier, Ed. Romà Tauler)