



Curso: Modelagem de dados de primeira e segunda ordem empregando o método MCR-

ALS: Teoria e prática

Carga horária: 30 horas

Créditos: 02

Professor: Dr. José Licarion Pinto Segundo Neto

Horário: SEG-SEX – 9:00 12:00 | 14:00 17:00

PLANO DE AULA
PROGRAMA
GERAL: Apresentar de forma teórica e prática o algoritmo MCR-ALS para modelagem de dados de primeira e segunda ordem.
ESPECÍFICO: <ol style="list-style-type: none">1. Compreender os conceitos e desenvolver senso crítico quanto as aplicações das ferramentas quimiométricas para modelagem de dados de primeira e segunda ordem;2. Conceituar os alunos acerca das vantagens da modelagem de cada tipo de dados;3. Apresentar as formas de geração e organização de dados de primeira e segunda ordem, com exemplos e os equívocos mais comuns;4. Apresentar os principais tipos de pré-processamento de dados de segunda ordem, como correção de sinal de fundo, deslocamento de picos na cromatografia e espalhamento Rayleigh e Raman na fluorescência.5. Apresentar uma teoria breve dos princípios e da forma de cálculos do MCR-ALS.6. Desenvolver no aluno a capacidade de realizar todos os cálculos referente a modelagem de dados de primeira e segunda ordem usando interfaces gráficas do MCR-ALS.



METODOLOGIA DE ENSINO

1. As aulas serão desenvolvidas na modalidade de teoria e prática. A prática será focada na organização e modelagem de dados simulados e reais nas principais interfaces gráficas..

AVALIAÇÃO DO PROCESSO DE ENSINO E APRENDIZAGEM

1. Avaliação contínua, onde será considerado a atenção e interação dos alunos com o tema abordado;
2. Trabalho de tratamento de dados ao final do curso.

RECURSOS NECESSÁRIOS

1. Quadro e giz
2. Projetor de slides
3. Os alunos necessitarão de computadores com uma versão do MATLAB igual ou superior a 2010 instalado.

REFERÊNCIAS

- [1] Olivieri, A.C.; Escandar, G.M. Practical Three-Way Calibration, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2014.
- [2] De la Peña, A. M.; Goicoechea, H.C.; Escandar, G.M.; Olivieri, A.C. Fundamentals and Analytical Applications of Multiway Calibration, Data Handling in Science and Technology V. 29, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2015.
- [3] Escandar, G.M.; Goicoechea, H.C.; De la Peña, A. M.; Olivieri, A.C. Second- and higher-order data generation and calibration: A tutorial, Anal. Chim. ACTA (806), 2014, 8-26.
- [4] Jalalvand, A. R., Goicoechea, H. C., Applications of electrochemical data analysis by multivariate curve resolution-alternating least squares, Trends in Anal Chem (88), 2017, 134-166.