

**Seminário:** Quimiometria: planejamento, calibração multivariada e análise exploratória.

**Ministrante:** Charlie Guimarães Gomes

---

Devido ao desenvolvimento tecnológico do último século a análise de dados ganhou um grande impulso, cada vez mais é preciso compreender e utilizar as informações obtidas, da melhor forma possível. Na química a análise multivariada de dados surgiu baseada em ferramentas de outras áreas do conhecimento, como a economia e psicologia, que apesar de serem utilizadas para interpretar objetivos específicos em cada área, todas são baseadas métodos matemáticos e estatísticos sofisticados. Assim a Quimiometria, se define por ser a área onde utiliza-se ferramentas matemáticas e estatística para solucionar diversas problemáticas de origem química. A Quimiometria possibilita utilizar métodos de análise e otimização de experimentos, calibração multivariada através de matrizes aumentadas, resolução matemática de curvas entre outras metodologias que ajudam a entender melhor a relação entre dados obtidos e realidade, através de ferramentas como Planejamento fatorial, análise de componentes principais (PCA), regressão multivariada empregando quadrados mínimos parciais (PLS), metodologias de seleção de variáveis em calibração multivariada, análise dos fatores paralelos (PARAFAC) e regressão em multimodos PLS multilinear (*N*-PLS), entre outras. Na sua grande maioria a quimiometria é aplicada em estudos analíticos, mas ainda seus métodos de otimização são aplicados em reações e sínteses em diversas áreas da química. Os processos quimiométricos na maioria das vezes utilizam operações algébricas bem definidas como base de seu funcionamento. Dessa forma, este trabalho tem como objetivo realizar uma abordagem sobre a utilização de planejamento fatorial e calibração multivariada, bem como descrever a funcionamento de algumas ferramentas quimiométricas.