

ANÁLISE POR COMPONENTES PRINCIPAIS DE ESPECTROS NEXAFS NA ESPECIAÇÃO DO MOLIBDÊNIO EM CATALISADORES DE HIDROTRATAMENTO

Arnaldo da C. Faro Jr.*, Victor de O. Rodrigues e Jean-G. Eon

Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Centro de Tecnologia, Bl. A, Cidade Universitária, 21949-900 Rio de Janeiro - RJ, Brasil

Angela S. Rocha

COPPE – Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós-graduação e Pesquisa de Engenharia, Universidade Federal do Rio de Janeiro, CP 68502, Cidade Universitária, 21949-900 Rio de Janeiro - RJ, Brasil

O algoritmo de ACP para Matlab 7 mostrado a seguir necessita de dois conjuntos de dados de entrada: a matriz **ACP**, formada pelas absorções dos espectros de NEXAFS inseridos como colunas e um vetor coluna contendo as energias dos espectros, chamado de vetor **Energia**.

```
[n,m] = size (ACP);

‘Centrando os dados na média:
média = mean (ACP);
acp_centrada=ACP-ones(n,1)*média;

‘Normalizando os dados em relação ao desvio padrão:
acp_norm = std (ACP);
X = acp_centrada ./ (ones (n, 1) * acp_norm);

,Decomposição em valores singulares da matriz de trabalho X:
[u Theta v] = svd (X);

‘Obtendo a matriz de variâncias e grafando o Scree Plot:
variância = diag (Theta) .^2;
Var_percentual = variância/sum (variância) * 100;
plot(Var_percentual);

‘Obtendo as matrizes de scores, loadings e autovalores:
loadings = v;
eigenvalues = Theta;
scores = u * Theta;

‘Grafando os tres primeiros vetores de scores e as diferentes com-
ponentes principais:
figure;
subplot(2,2,1);plot (Energia, scores(:,1),’ro’, Energia,
scores(:,2),’bo’, Energia, scores(:,3),’go’);
subplot(2,2,2);plot (loadings(:,1), loadings(:,2),’o’);
subplot(2,2,3);plot (loadings(:,1), loadings(:,3),’o’);
subplot(2,2,4);plot (loadings(:,2), loadings(:,3),’o’);

‘Recuperando a matriz de dados originais retendo duas componen-
tes principais:
d = scores (:, 1:2);
e = loadings (:, 1:2);
X_rec=d * e’;
acp_centrada_rec=X_rec.*(ones(n,1)*acp_norm);
ACP_rec=acp_centrada_rec+ones(n,1)*média;
‘Calculando os resíduos e o valor de R2:
resíduos=ACP-ACP_rec;
R2=100*(1-(norm(resíduos,’fro’)^2/norm(ACP,’fro’)^2))
```