

APLICAÇÃO DO MODELO TUCKER-3 PARA A ANÁLISE DA BIODEGRADAÇÃO DE DIESEL

Marlon M. Reis* e Mariza G. Reis

AgResearch Limited, East Street, Private Bag 3123, Hamilton, New Zealand

Cleber C. Luz

Departamento de Química, Faculdade de Ciências Humanas, Exatas e Letras de Rondônia, falta universidade, endereço e CEP Porto Velho – RO, Brasil

Wanderley R. Bastos e Miyuki Yamashita

Universidade Federal de Rondônia, BR 364, km 9,5 78900-000 Porto Velho – RO, Brasil

MATERIAL SUPLEMENTAR

Representação esquemática do arranjo em multimodos

A Figura 1S-a mostra a representação esquemática do arranjo de dados e sua decomposição. Já o arranjo e sua decomposição em forma matricial são apresentados pela Figura 1S-b, sendo o produto tensorial de Kronecker representado pela Figura 1S-c. A Figura 1S-d apresenta a decomposição dos dados referentes à amostra 1, X_1 , onde a Equação 17 pode ser melhor entendida.

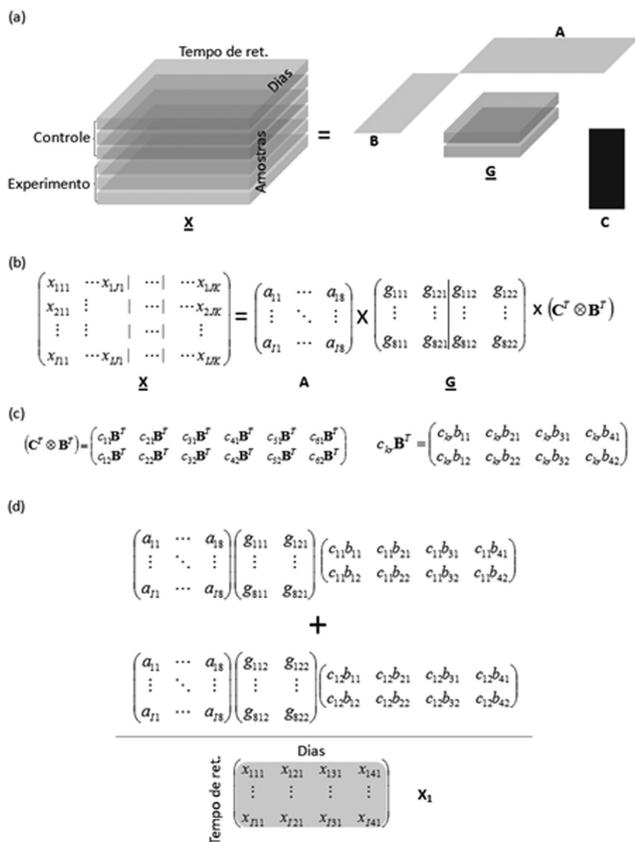


Figura 1S. Ilustração da decomposição do modelo Tucker-3 discutida

Solução adicional para o modelo Tucker-3

O modelo Tucker-3 admite soluções de um a quatro fatores para a matriz B , como discutido no texto principal. Estas possibilidades foram testadas, mas não resultaram em variação significativa no ajuste do modelo (91,17; 92,25 e 92,82% para número de fatores iguais a 2, 3 e 4, respectivamente). A Figura 2S apresenta os fatores da matriz B para um ajuste com quatro fatores, onde os dois fatores adicionais além de descreverem uma pequena fração da variância descrita pelo modelo também não apresentam significado químico, isto é, não apresentam variação contínua com o tempo.

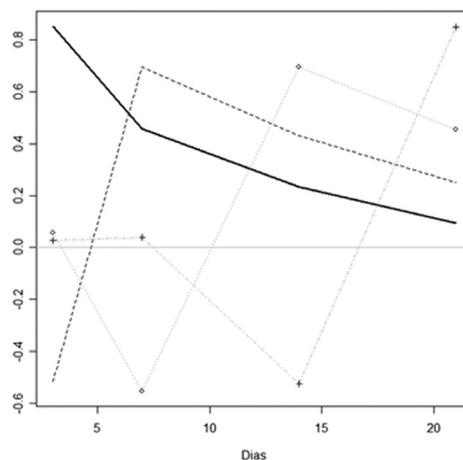


Figura 2S. Fatores resultantes da decomposição pelo modelo Tucker-3 com quatro fatores para o modo da variação temporal. Linha contínua e tracejada representam os fatores 1 e 2 respectivamente. Os símbolos ‘o’ e ‘+’ indicam os fatores 3 e 4, respectivamente

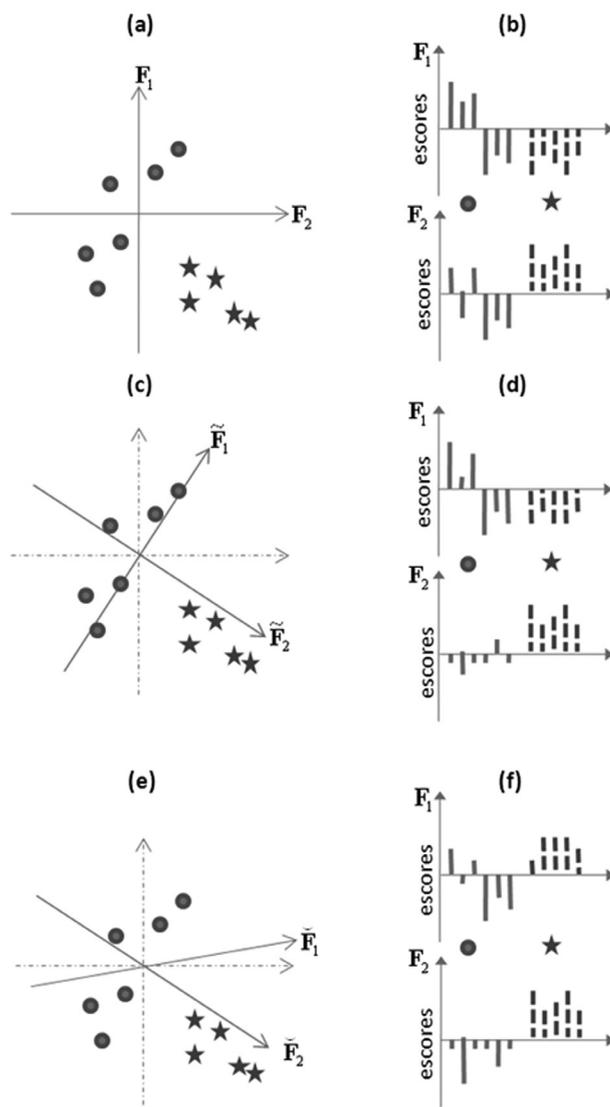


Figura 3S. Ilustração do processo de rotação de um conjunto de dados descrito originalmente pelos vetores F_1 e F_2 em (a). Os gráficos em (c) e (e) apresentam os resultados de rotações ortogonal e não ortogonal dos vetores \tilde{F}_1 e \tilde{F}_2 em relação à sua posição original em (a). Neste caso, os vetores tracejados representam os vetores originais. Na coluna da direita são apresentados os escores das amostras projetadas nos vetores \tilde{F}_1 e \tilde{F}_2 . Esta ilustração mostra que mesmo com as rotações é sempre possível discriminar os dois grupos de amostras