

## TUTORIAL PARA USO DO CONJUNTO COMPUTACIONAL MASDA

O conjunto de aplicativos MASDA é disponibilizado na internet, podendo ser baixado livremente do seguinte endereço: <http://www.dqi.uem.br/arquivos.html>. Recomenda-se que as atividades desenvolvidas com o MASDA sejam creditadas à Prof. Dr<sup>a</sup>. Ieda Spacino Scarminio (Universidade Estadual de Londrina - UEL, Londrina, Paraná).

Para o uso dos aplicativos MASDA, deve-se salvar todo os espectros individualmente a diferentes pH na mesma pasta do executável do programa, ou seja, junto com os 4 aplicativos: **UV**, **FATOR**, **ROTAÇÃO** e **MATK1**.

Os espectros devem estar no formato “.txt”, com os decimais separados por ponto e os pares de coordenadas separados por um espaço (ex.: 500.003 0.1512 o que corresponde ao par  $\lambda$  e absorbância separados por um espaço entre si). Para isso pode-se utilizar o editor de texto “Bloco de Notas” do Windows. Esses arquivos devem ser numerados em sequência para facilitar a entrada dos dados no aplicativo de entrada, o programa **UV**, que organiza todos os espectros na forma matricial. (ex.: Ex.: 01.txt; 02.txt; 03.txt e assim por diante, até o último espectro obtido). Em seguida, o aplicativo **FATOR** calcula a matriz de associação, aplicando o método Q de Imbrie. Esses dados são submetidos à projeção oblíqua e rotação varimax usando o terceiro aplicativo, o **ROTAÇÃO**, a partir do qual se obtém as concentrações relativas das espécies protolíticas. Finalmente, com o uso do **MATK1**, obtêm-se os espectros das espécies puras.

### APLICATIVO 1. UV

**Função: Gerar a matriz de associação (representar os dados na forma matricial)**

1. Abra o aplicativo **UV**.

2. Digite o nome do arquivo de entrada. **Ex.: 01.txt + enter** (nome dado ao primeiro espectro).
3. Digite um nome para o arquivo de saída. **Ex.: dye.txt + enter** (será utilizado no programa 2).
4. Digite o número de espectros a serem analisados. **Ex.: 30 + enter.**
5. Digite o número de pontos experimentais em cada espectro. Nessa opção, deve-se digitar a quantidade de pares ( $\lambda$ , Abs) dos espectros.

**Ex.: 351** ( $n^{\circ}$  de  $\lambda = 351$  nm, numa varredura de 350 a 700 nm, de 1 em 1 nm) + **enter**.

6. Digite o número de variáveis de corte. **Como regra, digite: 0 + enter.**
7. Digite um a um, os nomes dos demais arquivos, por exemplo **02.txt + enter, 03.txt + enter** e assim por diante. O programa é interativo, ou seja, necessita que o usuário determine os nomes dos arquivos até o último espectro.

## **APLICATIVO 2. FATOR**

**Função: Calcular a matriz de associação (Método Q de Imbrie)**

1. Abra o aplicativo **FATOR**.
2. Digite o nome do arquivo de entrada: **dye.txt + enter** (nome do arquivo de saída gerado no Programa 1)
3. Digite o número de amostras (espectros) a serem analisados. **Ex.: 30 + enter.**
4. Digite o número de variáveis (o número de comprimentos de onda). **Ex.: 351 + enter.**
5. Digite o número de fatores desejados. Obs.: Geralmente o número de fatores é igual o número de espécies absorventes no meio ( $n \geq 2$ ). Verifique a consistência dos resultados a cada mudança de número de fatores.
6. Ao final do programa serão gerados 7 (sete) arquivos FAT. Alguns deles serão analisados no aplicativo **ROTAÇÃO**. O FAT06 contém a matriz de associação obtida no UV. O FAT03 contém a análise dos componentes principais (o comprimento do vetor de cada espectro, a matriz de

similaridade, a tabela de variância acumulada e tabela de correlação matriz-coluna). O FAT08 contém a matriz dos escores (sem as rotações). O FAT09 contém a matriz dos loadings (sem as rotações). O FAT02, o FAT04 e o FAT07 são arquivos de trabalho, utilizados para o programa funcionar corretamente.

### **APLICATIVO 3. ROTAÇÃO**

**Função: Obter as concentrações relativas calculadas (Projeção Obliqua e Varimax)**

1. Abra o aplicativo **ROTAÇÃO**.
2. Digite um nome para o arquivo de saída. **Ex.: dye3f.txt + enter**
3. Ao final, o programa gerará outros três arquivos além do arquivo de saída dye3f.txt: o WORK 1, WORK2 e VARX 05. Para visualizar os resultados, importe o arquivo de saída (**dye3f.txt**) em um software com planilha de dados, como o Origin<sup>®</sup> ou Microsoft Excel<sup>®</sup> e correlacione os valores de concentração relativa com os valores de pH.

WORK1, WORK2 e VARX05 são arquivos de trabalho.

### **APLICATIVO 4. MATK1**

**Função: Gerar os espectros calculados das espécies puras**

1. Abra o aplicativo **MATK1**.
2. Para matriz de calibração, **digite 0 + enter**.
3. Nome do arquivo contendo os espectros (gerado na Etapa 1) **Ex.: dye.txt + enter**
4. Digite o nome do arquivo com as concentrações (gerado na Etapa 3). **Ex.: dye3f.txt + enter**
5. Digite um nome para o arquivo de saída. **Ex.: dyeespc.txt + enter**
6. Digite o número de pontos no espectro. **Ex.: 351 + enter**

7. Digite o número de componentes na amostra (número de fatores). **Ex.: 3 + enter**
8. Digite o número de amostras no conjunto de treinamento (número de espectros). **Ex.: 30 + enter**
9. Digite o número de amostras no conjunto teste (número de espectros). **Ex.: 30 + enter**
10. O aplicativo gerará um número x de arquivos (a quantidade é dependente do número de amostras de trabalho). Para visualizar os espectros das espécies puras, importe o arquivo WORK5 no Programa Origin<sup>®</sup> e correlacione os valores de absorvância relativa com os números de comprimento de onda.
11. Ao final serão gerados outros três arquivos de trabalho: WORK7, WORK8 e dyeespc.