

APLICAÇÃO DE MÉTODOS DE AGRUPAMENTO DE DADOS PARA ANÁLISE DE *CLUSTERS* DE ÓXIDOS

Danielle R. Lopes¹, Mailde S. Ozório², Marcos G. Quiles³, Juarez L. F. da Silva³

Instituto de Ciências Matemáticas e Computação¹, Instituto de Química de São Carlos², USP; Universidade Federal de São Paulo³, UNIFESP

lopes.danielle@usp.br

Objetivos

Investigar métodos de agrupamento para análise de *clusters* de óxidos (TiO_2)_n, (ZrO_2)_n, e (CeO_2)_n, com $n=1-15$ [1], bem como os fundamentos teóricos, características e limitações desses métodos. Posteriormente, pretende-se utilizar a linguagem Python para implementação de um ou mais métodos. Mediante critérios de validação, espera-se identificar o(s) método(s) que apresentar(m) melhor desempenho no agrupamento dos *clusters* de óxidos em função do tamanho.

Métodos e Procedimentos

Essa é uma pesquisa bibliográfica, descritiva e aplicada, pois a teoria dos métodos de agrupamento de dados será elaborada a partir de materiais publicados, como livros, artigos e manuais. A priori será utilizado o método particional K-means e, posteriormente, serão identificados outros métodos considerando as abordagens hierárquicas, baseadas em densidade e em grafos [2,3,4]. Nesse projeto, tendo como objeto de estudo os *clusters* de óxidos (TiO_2)_n, (ZrO_2)_n, e (CeO_2)_n, serão implementados os métodos de agrupamentos utilizando a linguagem Python no ambiente computacional web Jupyter Notebook. Após o processamento dos dados, usaremos critérios de validação dos agrupamentos, por exemplo, a variância dos dados de cada grupo e a dissimilaridade inter-grupos [4]. Esses critérios serão utilizados para avaliação quantitativa dos resultados.

Resultados

Nesse projeto, em fase inicial, espera-se obter os desempenhos de processamento de cada método e sua acurácia na tarefa de agrupamentos dos *clusters* de óxidos (TiO_2)_n, (ZrO_2)_n, e (CeO_2)_n. Por conseguinte, obter uma separação adequada dos agrupamentos de óxidos considerando critérios específicos, como por exemplo o tamanho dos *clusters* de óxidos.

Conclusões

A perspectiva é concluir, a partir da análise de agrupamentos, se existe correlação nas propriedades dos *clusters* de óxidos (TiO_2)_n, (ZrO_2)_n, e (CeO_2)_n em função do tamanho, i.e., interpretar os possíveis casos de correlação.

Referências Bibliográficas

- [1]. Besse, L. Z.; Seminovski, Y.; Rosalino, I.; Guedes-Sobrinho, D.; Da Silva, J. L. F. *J. Phys. Chem.*, 2018, 122, 27702-27712.
- [2]. Cassiano, K. M. Análise de Séries Temporais Usando Análise Espectral Singular (SSA) e Clusterização de Suas Componentes Baseadas em Densidade. Ph.D. Dissertation, Pontifícia Universidade Católica, Rio de Janeiro, RJ, 2019.
- [3]. Xu, R.; Wunsch, D. *Clustering*; Wiley-IEEE Press: New Jersey, 2008.
- [4]. Jain, A. K.; Murty, M. N.; Flynn, P. J. *Data Clustering: A Review. ACM Comput. Surv.* 1999, 31, 3, 264-323.