Universidade Federal do Rio Grande Instituto de Matemática, Estatística e Física Pós-GraduaÇão em Física

Brenda Matoso Abreu Miranda

# Propriedades dos hidrocarbonetos aromáticos policíclicos em galáxias Starbursts: uma análise estatística multivariada

Rio Grande 2020

# Propriedades dos hidrocarbonetos aromáticos policíclicos em galáxias Starbursts: uma análise estatística multivariada

Dissertação apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Física, da Universidade Federal do Rio Grande - FURG, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física

Área de Concentração: Astronomia Extragaláctica Orientadora: Dra. Dinalva A. Sales Co-orientador: Dr. Stavros Akras

Rio Grande 2020

### Propriedades dos hidrocarbonetos aromáticos policíclicos em galáxias Starburst: uma análise estatística multivariada

Brenda Matoso Abreu Miranda

Orientadora: Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Dinalva Aires de Sales

Dissertação de Mestrado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física no Curso de Mestrado em Física, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Física.

Aprovada por:

Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Dinalva Aires de Sales

Prof. Dr. Stavros Akras

Teliano lesan r avorter

Prof. Dr. Juliano César Marangoni

Rio Grande Julho de 2020

Dedico esse trabalho a minha família que sempre me disse: Vai!

## Agradecimentos

À minha família, que me apoiou e assumiu responsabilidades que eram minhas para que eu pudesse dar mais um passo em direção ao meu objetivo profissional;

À colega de mestrado e amiga, Lara M. Gatto, que me incentivou em todos os momentos durante o mestrado;

À orientadora Dinalva A. de Sales, por todo o suporte e por ter acreditado no meu potencial. Isso com certeza tem sido peça chave para que eu continue alimentando a vontade de seguir em frente;

Aos pesquisadores e colegas que dividiram momentos comigo durante esses dois anos (Walas, Daniele, John, Taneo, Roseane), com certeza foram fundamentais para tornar esse tempo muito mais especial;

Aos Professores do programa;

À PROPESP e CAPES, pelo apoio financeiro;

Esta dissertação foi escrita em IAT<sub>E</sub>X com a classe IMEF-DISSERTAÇÃO, para dissertações do PPG-Física IMEF FURG.

"Que nada nos defina, que nada nos sujeite. Que a liberdade seja a nossa própria substância, já que viver é ser livre."

Simone de Beauvoir

### Resumo

As galáxias ativas são os objetos mais energéticos do universo. Essas galáxias possuem uma forte emissão no infravermelho médio, característica que normalmente é atribuída a presença de moléculas de Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos (PAHs). Sabe-se que, cerca de 20%, do carbono presente no meio interestelar se encontra na composição dessas moléculas. A literatura aponta as PAHs como forte indicadora de formação estelar, no entanto há divergências quanto a sobrevivência dessas moléculas em galáxias de núcleo ativo. Neste sentido se faz necessário ampliar os estudos a respeito de moléculas de PAHs em ambientes de altas energias para compreender os mecanismos que fazem com que essas moléculas resistam a essas condições. Assim, este trabalho teve como objetivo principal utilizar ferramentas estatísticas de análise por agrupamento e componentes principais, para estudar uma amostra de 148 galáxias dominadas por formação estelar, afim de inferir maiores informações a respeito de suas propriedades físico-químicas e a relação entre tamanhos moleculares dos PAHs e a principal fonte de ionização das galáxias. A partir deste estudo foi possível inferir que a maior porcentagem da variância da amostra de galaxias dominadas por formação estelar é atribuída as propriedades relacionadas as classes moleculares e fontes de ionização. Através da análise multivariada também foi possível identificar as correlações entre diferentes classes moleculares e fontes de ionização. A análise realizada aqui se mostrou robusto para o estudo de astroquímica e suportado por resultados anteriores em que foram utilizadas diferentes técnicas e modelagens.

### Abstract

Active galaxies are the most energetic objects in the universe. These galaxies have a strong emission in the medium infrared, a characteristic that is normally attributed to the presence of Polycyclic Aromatic Hydrocarbon molecules (PAHs). It is known that about 20% of the carbon present in the interstellar medium is found in the composition of these molecules. The literature points to PAHs as a strong indicator of star formation, however there are divergences regarding the survival of these molecules in active nucleus galaxies. In this sense, it is necessary to expand the studies regarding PAH molecules in high energy environments to understand the mechanisms that make these molecules resist these conditions. Thus, this study had as main objective to use statistical tools of clustering analysis and main components, to study a sample of 148 galaxies dominated by star formation, in order to infer more information about their physicochemical properties and the relationship between the molecular sizes of PAHs and the main source of ionization in the galaxies. From this study it was possible to infer that the largest percentage of the sample variance of galaxies dominated by star formation is attributed to properties related to molecular classes and ionization sources. Through multivariate analysis it was also possible to identify the correlations and anti-correlations between different molecular classes and ionization sources. The analysis performed here proved to be robust for the study of astro-chemistry and supported by previous results in which different techniques and modeling were used.

# Lista de Figuras

1.1	Os períodos das estrelas são regulares e podem variar de 1 a 100 dias. Essa	
	variação de período está diretamente relacionada com a magnitude absoluta	
	do objeto. Fonte da Imagem: http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/Ast	ro/
1.2	Imagem no Infravermelho Ultra Profunda do Universo, feita pelo Telescópio	
	Espacial Hubble. (Fonte da Imagem: Site Hubble Space Telescope)	26
1.3	Diagrama de Hubble (1921) que representa as estruturas morfológicas das	
	galáxias, onde $({\cal E})$ são as galáxias elípticas, $({\cal S})$ são as espirais normais e	
	(SB)são as espirais barradas. Fonte: Tese de Doutorado do Dr. João	
	Rodrigo Souza Leão (2006)	27
1.4	Esquema de classificação de galáxias quanto ao processo de atividade nu-	
	clear. (LIR = Luminoso no infravermelho; $BAL = Linha de absorção larga;$	
	FR = Fanaroff-Riley; NELG = galáxia com linha de emissão estreita).	
	Fonte: Roy (1994)	28
1.5	Contínuo de um AGN, representado pelo traçado continuo em preto (galáxia	
	"Radio-Loud") e o tracejado em rosa (Galáxia "Radio-Quiet"). O contínuo	
	de uma galáxia normal está representado pela linha pontilhada em verde.	
	Fonte: (Gastão, 2018) (imagem adaptada da Fig. 1.3 de ?) $\ldots$	29
1.6	(a) - Seyfert 1 representada pelo espectro da galáxia NGC5141. (b) -	
	Seyfert 2 representada pelo espectro da galáxia 4941. Fonte: Bill Keel	
	$(\rm https://pages.astronomy.ua.edu/keel/agn/)$ - última atualização: Novem-	
	bro, 2002	30

26

1.7	Esquema representativo do modelo unificado de AGN. No centro da imagem	
	(em preto) está representado um buraco-negro supermassivo (SMBH, do	
	inglês "Super-Massive Black-Hole"). Em vermelho está o disco de acreção.	
	Os jatos são representados pela parte em amarelo. A NLR é representada	
	pelos pontos em azul escuro. A região em torno do disco de acresção é a	
	BLR. O toro molecular é representado pelas regiões em cinza em ambos os	
	lados da figura.). Fonte: (Sales, 2012)	31
1.8	Espectros de 4 Starbursts representados pelas galáxias N3310, N7714, N1614	
	e N34. Fonte: Fig.9 (Riffel et al., 2006)	34
1.9	(a) Ilustração das interações frontais causadas pelos orbitais sigmas no anel	
	benzenico $\sigma.$ (b) Ilustração da interação paralela causada pelos orbitais $\pi$	
	no anel benzenico.	35
1.10	Estrutura trigonal plana da molécula de Benzeno com ligações duplas e	
	simples distribuídas alternadamente.	36
1.11	Estrutura trigonal plana da molécula de Benzeno com ligações duplas e	
	simples distribuídas alternadamente.	36
1.12	Estrutura trigonal plana da molécula de Benzeno com ligações duplas e	
	simples distribuídas alternadamente.	37
1.13	Molécula de Benzeno [C6H6], base das moléculas de Hidrocarbonetos Aromático	DS
	Policíclicos. Acima e a baixo do anel benzênico está a região de maior pro-	
	babilidade de encontrar o elétron denominada região de ressonância	37
1.14	Modos normais de vibrações moleculares. Fonte: La PTeC - Unesp (https://www.38	w2.sorocaba.unesp.
1.15	Sobreposição de nove espectros de galáxias Starbursts observadas pelo IRS	
	em que são identificadas as principais bandas de emissão características de	
	PAHs. Fonte: (Brandl et al., 2006)	39
1.16	Classe de PAHs: Pericondensados - Átomos de carbonos são parte de três	
	anéis benzênicos simultaneamente. Catacondensados - Moléculas de estru-	
	tura linear, átomos de carbono participam de até dois anéis benzênicos	40
1.17	Classe de PAHs: Pericondensados - Átomos de carbonos são parte de três	
	anéis benzênicos simultaneamente. Catacondensados - Moléculas de estru-	
	tura linear, átomos de carbono participam de até dois anéis benzênicos	41

2.1	Telescópio Espacial Spitzer, lançado no ano de 2003, especificamente desen-	
	volvido para realizar observações no comprimento de onda do Infravermelho.	
	Fonte: http://www.spitzer.caltech.edu/	45
2.2	A emissão das bandas de PAHs em 6.2 $\mu m,7.7\mu m,8.6\mu m,11.2\mu m$ e 12.8 $\mu m$	
	podem ser claramente identificadas	48
2.3	Distribuição de PAHs da versão 2.0 do PAHDb. O eixo y representa o	
	número de espécies moleculares e o eixo x representa a quantidade de átomos	
	de carbono presente em cada PAH. PAHs com adição de oxigênio são re-	
	presentados pela cor amarela, magnésio/ferro pela cor marrom e nitrogênio	
	pela cor verde. Em azul aparecem os PAHs "puros" compostos apenas por	
	carbono e hidrogênio. Fonte: Boersma et al. (2014)	49
2.4	Distribuição de PAHs da versão 3.20 do PAHDb. O eixo y representa o	
	número de espécies moleculares e o eixo x representa a quantidade de átomos	
	de carbono presente em cada PAH. Os PAHs neutros são representados	
	pela cor marrom, ânions pela cor amarela e cátions pela cor verde. Fonte:	
	Boersma et al. (2014)	49
2.5	Representação do ângulo espectral ( $\alpha$ ) calculado entre o espectro de interesse	
	(material $x$ ) em relação ao espectro de referência (material $r$ ). Diagrama	
	SAM. Fonte: http://vision.gel.ulaval.ca/jflalonde/cours/4105/h15/tps/result	s/projet/SASO
2.6	Diagrama SAM das galáxias Starburst da nossa amostra (simbolos "+" em	
	azul). Linha diagonal representa o espectro de referência da classe de PAHs	
	neutro muito pequeno (menos que 30 átomos de carbono). Retirado de	
	Espinoza & Sales (2020, no prelo)	52
2.7	Diagrama SAM das galáxias Starburst da nossa amostra (simbolos "+" em	
	azul). Linha diagonal representa o espectro de referência da classe de PAHs	
	neutro pequeno (de 31 a 150 átomos de carbono). Retirado de Espinoza $\&$	
	Sales (2020, no prelo)	52
2.8	Diagrama SAM das galáxias Starburst da nossa amostra (simbolos "+" em	
	azul). Linha diagonal representa o espectro de referência da classe de PAHs	
	neutro médio (de 151 a 225 átomos de carbono). Retirado de Espinoza $\&$	
	Sales (2020, no prelo)	53

2.9	Diagrama SAM das galáxias Starburst da nossa amostra (simbolos "+" em	
	azul). Linha diagonal representa o espectro de referência da classe de PAHs	
	neutro grandes (de 226 a 300 átomos de carbono). Retirado de Espinoza $\&$	
	Sales (2020, no prelo)	53
2.10	Diagrama SAM das galáxias Starburst da nossa amostra (simbolos "+" em	
	azul). Linha diagonal representa o espectro de referência da classe de PAHs	
	neutro pequeno (mais do que 300 átomos de carbono). Retirado de Espinoza	
	& Sales (2020, no prelo)	54
2.11	Neste dendrograma é possível identificar a existência de um grande grupo	
	que abrange sub-grupos em níveis hierárquicos diferentes. A quantidade	
	de clusters neste caso vai depender da escolha da distância em que será	
	realizado o corte (eixo y). Fonte: (Gil, 2019)	56
2.12	O Plot 1A e 1B, demonstram graficamente a projeção da dimensão do con-	
	junto original em PCAs é realizada através da identificação das principais	
	direções de variação dos dados. Fonte: (Kassambara, 2017) $\hdots$	59
3.1	Contribuição de cada componente principal para a variância total da amos-	
	tra, em ordem decrescente. As 2 primeiras componentes compreendem	
	$\sim 57\%$ da variância total das observações	68
		00
3.2	Diagrama da correlação das componentes principais 1 (Dim. 1) versus 2	00
3.2	Diagrama da correlação das componentes principais 1 (Dim. 1) versus 2 (Dim. 2) para a amostra total de galáxias dominadas por Starburst. As	
3.2	Diagrama da correlação das componentes principais 1 (Dim. 1) versus 2 (Dim. 2) para a amostra total de galáxias dominadas por Starburst. As correlações de cada propriedade estudada das galáxias estão mostradas pelos	
3.2	Diagrama da correlação das componentes principais 1 (Dim. 1) versus 2 (Dim. 2) para a amostra total de galáxias dominadas por Starburst. As correlações de cada propriedade estudada das galáxias estão mostradas pelos seus respectivos vetores e barra de cores mostra a intensidade de correlação.	
3.2	Diagrama da correlação das componentes principais 1 (Dim. 1) versus 2 (Dim. 2) para a amostra total de galáxias dominadas por Starburst. As correlações de cada propriedade estudada das galáxias estão mostradas pelos seus respectivos vetores e barra de cores mostra a intensidade de correlação. Dimensão 1 e 2 contém $\sim$ 57% do total de informações contidas nos dados	
3.2	Diagrama da correlação das componentes principais 1 (Dim. 1) versus 2 (Dim. 2) para a amostra total de galáxias dominadas por Starburst. As correlações de cada propriedade estudada das galáxias estão mostradas pelos seus respectivos vetores e barra de cores mostra a intensidade de correlação. Dimensão 1 e 2 contém $\sim$ 57% do total de informações contidas nos dados da amostra	70
3.2 3.3	Diagrama da correlação das componentes principais 1 (Dim. 1) versus 2 (Dim. 2) para a amostra total de galáxias dominadas por Starburst. As correlações de cada propriedade estudada das galáxias estão mostradas pelos seus respectivos vetores e barra de cores mostra a intensidade de correlação. Dimensão 1 e 2 contém ~57% do total de informações contidas nos dados da amostra	70
3.2 3.3	Diagrama da correlação das componentes principais 1 (Dim. 1) versus 2 (Dim. 2) para a amostra total de galáxias dominadas por Starburst. As correlações de cada propriedade estudada das galáxias estão mostradas pelos seus respectivos vetores e barra de cores mostra a intensidade de correlação. Dimensão 1 e 2 contém ~57% do total de informações contidas nos dados da amostra	70
3.2 3.3	Diagrama da correlação das componentes principais 1 (Dim. 1) versus 2 (Dim. 2) para a amostra total de galáxias dominadas por Starburst. As correlações de cada propriedade estudada das galáxias estão mostradas pelos seus respectivos vetores e barra de cores mostra a intensidade de correlação. Dimensão 1 e 2 contém ~57% do total de informações contidas nos dados da amostra	70 71
<ul><li>3.2</li><li>3.3</li><li>3.4</li></ul>	Diagrama da correlação das componentes principais 1 (Dim. 1) versus 2 (Dim. 2) para a amostra total de galáxias dominadas por Starburst. As correlações de cada propriedade estudada das galáxias estão mostradas pelos seus respectivos vetores e barra de cores mostra a intensidade de correlação. Dimensão 1 e 2 contém ~57% do total de informações contidas nos dados da amostra	70 71
<ul><li>3.2</li><li>3.3</li><li>3.4</li></ul>	Diagrama da correlação das componentes principais 1 (Dim. 1) versus 2 (Dim. 2) para a amostra total de galáxias dominadas por Starburst. As correlações de cada propriedade estudada das galáxias estão mostradas pelos seus respectivos vetores e barra de cores mostra a intensidade de correlação. Dimensão 1 e 2 contém ~57% do total de informações contidas nos dados da amostra	70 71

3.5	Contribuição de cada componente principal para a variância total do grupo	
	1. As 2 primeiras componentes compreendem $\sim 59\%$ da variância total das	
	observações	79
3.6	Diagrama da análise de correspondência das componentes principais 1 (Dim.	
	1) versus 2 (Dim. 2) para as galáxias do grupo 1. As correlações de cada	
	propriedade estudada das galáxias estão mostradas pelos seus respectivos	
	vetores e barra de cores mostra a intensidade de correlação. Dimensão 1 e	
	$2$ contém ${\sim}59\%$ do total de informações contidas nos dados da amostra	79
3.7	Histograma das distribuições das variâncias das propriedades das galáxias	
	Starburst contidas na componente principal 1 (no topo, Dimensão 1) e 2 $$	
	(na base, Dimensão 2)	82
3.8	Contribuição de cada componente principal para a variância total do grupo	
	2. As 2 primeiras componentes compreendem $\sim 61\%$ da variância total das	
	observações	83
3.9	Diagrama da análise de correspondência das componentes principais 1 (Dim.	
	1) versus 2 (Dim. 2) para as galáxias do grupo 2. As correlações de cada	
	propriedade estudada das galáxias estão mostradas pelos seus respectivos	
	vetores e barra de cores mostra a intensidade de correlação. Dimensão 1 e	
	$2$ contém ${\sim}61\%$ do total de informações contidas nos dados da amostra	83
3.10	Histograma das distribuições das variâncias das propriedades das galáxias	
	Starburst contidas na componente principal 1 (no topo, Dimensão 1) e 2 $$	
	(na base, Dimensão 2)	85
A.1	Histograma das distribuições das variâncias das propriedades das galáxias	
	Starburst contidas na componente principal 3 (Dimensão 3) $\ldots \ldots \ldots$	97
A.2	Histograma das distribuições das variâncias das propriedades das galáxias	
	Starburst contidas na componente principal 4 (Dimensão 4) $\ldots \ldots$	98
A.3	Histograma das distribuições das variâncias das propriedades das galáxias	
	Starburst contidas na componente principal 5 (Dimensão 5) $\ldots \ldots \ldots$	98
A.4	Histograma das distribuições das variâncias das propriedades das galáxias	
	Starburst contidas na componente principal 3 (Dimensão 3) $\ldots \ldots \ldots$	99

A.5	Histograma das distribuições das variâncias das propriedades das galáxias	
	Starburst contidas na componente principal 4 (Dimensão 4) $\ldots \ldots$	100
A.6	Histograma das distribuições das variâncias das propriedades das galáxias	

- Starburst contidas na componente principal 5 (Dimensão 5) . . . . . . . 100 A.7 Histograma das distribuições das variâncias das propriedades das galáxias
- Starburst contidas na componente principal 3 (Dimensão 3) . . . . . . . 101 A.8 Histograma das distribuições das variâncias das propriedades das galáxias
- Starburst contidas na componente principal 4 (Dimensão 4) ..... 101
- A.9 Histograma das distribuições das variâncias das propriedades das galáxias
  Starburst contidas na componente principal 5 (Dimensão 5) . . . . . . . . . . . . . . . 102

# Lista de Tabelas

1.1	Bandas de emissão características de moléculas de Hidrocarbonetos Aromáticos			
	Policíclicos e os modos vibracionais correspondentes. Fonte: Adaptada do			
	Tielens, 2004	43		
2.1	Amostra de Galáxias Starbursts e suas propriedades físico-químicas	61		
3.1	Correlação das variáveis com as dimensões 1 e 2	69		
3.2	Galáxias pertencentes aos grupos 1 e 2	73		
3.3	Contribuição das variáveis para as dimensões 1 e 2	80		
3.4	Contribuição das variáveis para as Dimensões 1 e 2 $\ \ldots \ \ldots$	84		

# Sumário

1.	Intro	Introdução				
	1.1	Galáxi	as Ativas	28		
		1.1.1	Galáxias Seyfert	29		
		1.1.2	Quasar	32		
		1.1.3	Galáxia LINER	32		
		1.1.4	Galáxia Starburst	32		
	1.2	Hidroc	earbonetos Aromáticos Policíclicos	34		
		1.2.1	A Estrutura da Molécula de Benzeno	35		
		1.2.2	Emissão Por Vibração Molecular No Infravermelho	37		
	1.3	Motiva	ação e Objetivos	40		
2.	Mat	eriais e	Métodos	45		
	2.1 Telescópio Espacial Spitzer					
		2.1.1	Fotômetro IRAC	46		
		2.1.2	Fotômetro MIPS	46		
		2.1.3	Espectrógrafo IRS	46		
		2.1.4	O Projeto Spitzer/IRS ATLAS	47		
	2.2	Base d	le dados do NASA Ames PAH IR	47		
2.3 Determinação do Tamanho dos PAHs Usando Mapeament		ninação do Tamanho dos PAHs Usando Mapeamento de Ângulo Es-				
		pectra	l (SAM)	50		
	2.4	Anális	e de Agrupamento	55		
		2.4.1	Clustering Hierárquico	55		
			2.4.1.1 Método Ward	57		

		2.4.2	Análise de Componentes Principais	57
	2.5	Caract	erização da Amostra das Galáxias Dominadas por Starburst	59
3.	Resu	ltados e	e Discussões	67
	3.1	Análise	e de Componentes Principais das Galáxias Starburst	67
	3.2	Análise	e de Agrupamento utilizando Método Ward	72
		3.2.1	Análise de Componentes Principais dos Grupos	77
4.	Cone	clusões .		87
Re	ferên	cias		91
Ap	êndic	e		95
A.	Aná	lise das	Componentes Principais das Galáxias Starburst	97
	A.1	Grupo	1	99
	A.2	Grupo	2	99

Capítulo

## Introdução

Mesmo as civilizações que ainda não possuíam formas de escrita já sentiam-se atraídas pelo céu e deixaram indícios de utilização da Astronomia como forma de organizar suas vidas em sociedade. Várias tribos indígenas brasileiras utilizavam conhecimentos sobre os movimentos dos astros como ferramenta de orientação na floresta, para atividades de caça, plantio e até mesmo como forma de orientar a construção de suas aldeias. O interesse do ser humano pelo céu evoluiu ao longo do tempo e os estudos científicos em Astronomia refletiram e seguem refletindo fortemente na evolução da humanidade.

Até meados do século XVIII estavam sendo revelados e catalogados os primeiros objetos observados além do nosso sistema solar. O astrônomo William Hershel com seu telescópio Great Forty-Foot Telescope de 1,2 metros de diâmetro e 12 metros de distância focal, estudava cometas e alguns objetos extensos e difusos nomeados como nebulosas. Apesar de Kant (1724-1804) já ter mencionado que esses objetos poderiam ser "Universos Ilhas", ou seja, outras galáxias, até o fim do século XIX sistemas como aglomerados estelares, galáxias e nebulosas planetárias eram classificados unicamente como nebulosas. Só foi possível estudar com maiores detalhes a natureza desses objetos a partir da construção de grandes telescópios entre o final do século XIX e início do século XX.

Somente em 1923 Edwin Hubble, Astrônomo nascido nos Estados Unidos, realizou estudos com Cefeidas (tipo de estrelas pulsantes com luminosidade variável Fig. 1.1) na nebulosa espiral atualmente conhecida como Andrômeda. Astrônomos da época sabiam que o brilho aparente de uma estrela diminui conforme o quadrado da sua distância, além disso, sabiam que descobrindo o brilho intrínseco do objeto era possível calcular sua distância.

Em posse da relação conhecida entre período e luminosidade de estrelas Cefeidas, Hubble identificou que a nebulosa espiral era na realidade um objeto extragaláctico (Gastão,



*Figura 1.1:* Os períodos das estrelas são regulares e podem variar de 1 a 100 dias. Essa variação de período está diretamente relacionada com a magnitude absoluta do objeto. Fonte da Imagem: http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/Astro/

2018), ou seja, estava situada além do limite de 100 mil anos-luz de diâmetro da Via Lactea. Hoje é sabido que o universo é composto por uma infinidade de galáxias e que elas são sistemas de alta complexidade compostos por estrelas, gás, poeira e matéria escura.

O Telescópio Espacial Hubble, no ano de 2004, após um período de aproximadamente 4 meses de observação de uma pequena região do espaço, obteve uma imagem ultra profunda do universo. Esta imagem (Fig. 1.2) deixa evidente a existência de milhões de galáxias além da nossa Via Láctea. Na imagem, feita com o espectrômetro de infravermelho próximo acoplado no Telescópio Espacial Hubble da NASA/ESA foi possível identificar galáxias a bilhões de anos-luz de distância, que existiram a muito tempo atrás revelando uma imagem do Universo mais distante.



*Figura 1.2:* Imagem no Infravermelho Ultra Profunda do Universo, feita pelo Telescópio Espacial Hubble. (Fonte da Imagem: Site Hubble Space Telescope).

As galáxias possuem morfologias distintas classificadas em espirais normais (S) e barradas (SB), elípticas (E) com diferentes graus de achatamento e irregulares (I), de acordo com o Diagrama de Hubble (1921), exemplificado na Fig. 1.3. Neste diagrama, também conhecido como diagrama da forca, as galáxias foram classificadas conforme sua morfologia, ou seja, de acordo com a configuração de sua estrutura aparente, esta não é uma representação evolutiva, mas sim um diagrama que auxilia na compreensão das representações existentes de uma galáxia e suas principais características como a variação da quantidade de gás e populações estelares. As galáxias elípticas são dominadas por estrelas velhas  $(t > 10^9 \text{ anos})$  e mais pobres em gás, enquanto as galáxias classificadas como espirais são ricas em gás e dominadas por populações estelares mais jovens (com  $t \sim 10^6$  anos) (Leão, 2006).

A estrutura morfológica possui 3 principais componentes: o bojo, o disco e o halo. Além disso, as galáxias são também classificadas conforme suas características de atividade como será visto na próxima seção.



Figura 1.3: Diagrama de Hubble (1921) que representa as estruturas morfológicas das galáxias, onde (E) são as galáxias elípticas, (S) são as espirais normais e (SB) são as espirais barradas. Fonte: Tese de Doutorado do Dr. João Rodrigo Souza Leão (2006).

### 1.1 Galáxias Ativas

Após longos processos as galáxias já estruturadas apresentam três tipos distintos de evolução. De acordo com Gastão (2018), esses processos podem ser classificados como evolução da dinâmica da galáxia considerando as características de velocidades, interações e distribuição espacial, evolução de acordo com a taxa de formação de estrelas em função do tempo e a evolução química onde o ambiente é enriquecido devido as formações e explosões estelares.

Milhares de galáxias possuem em sua região central uma luminosidade intensa proveniente de diferentes processos de atividade nuclear, desta forma, é possível utilizar essas peculiaridades para classificá-las. Na Fig.1.4 são apresentadas as classificações conhecidas, onde podemos perceber que entre os Núcleos Ativos de Galáxias (AGN, do inglês "active galactic nuclei") encontram-se galáxias LINERs, Starbursts, Seyferts 1 e 2 e Quasares, conhecidos como os AGSs mais luminosos com luminosidade bolométrica entre ~  $10^{44}$  e  $10^{48} \ erg s^{-1}$ .



*Figura 1.4:* Esquema de classificação de galáxias quanto ao processo de atividade nuclear. (LIR = Luminoso no infravermelho; BAL = Linha de absorção larga; FR = Fanaroff-Riley; NELG = galáxia com linha de emissão estreita). Fonte: Roy (1994)

Um dos pontos fundamentais da astrofísica moderna é entender qual é a origem da fonte

de energia responsável pelo contínuo e linhas de emissão observadas em galáxias AGN. A luminosidade de uma galáxia normal é da ordem de ~  $10^{38} ergs^{-1}$ , os AGNs mais intensos podem chegar a luminosidades na ordem de ~  $10^{48} ergs^{-1}$ . A energia de um AGN vai dos raios gama até as ondas de rádio, o seu contínuo, conhecido como distribuição espectral de energia (SED, do inglês "Spectral Energy Distribution"), difere das galáxias normais (Sales, 2012), como pode-se perceber na Fig.1.5, onde o continuo típico de uma galáxia normal é representado pelo pontilhado em verde e o contínuo de um AGN, linha em preto, está representado pelo espectro de uma galáxia "Radio Loud".



*Figura 1.5:* Contínuo de um AGN, representado pelo traçado continuo em preto (galáxia "Radio-Loud") e o tracejado em rosa (Galáxia "Radio-Quiet"). O contínuo de uma galáxia normal está representado pela linha pontilhada em verde. Fonte: (Gastão, 2018) (imagem adaptada da Fig. 1.3 de ?)

### 1.1.1 Galáxias Seyfert

Estudo desenvolvido por Carl K. Seyfert identificou que várias galáxias possuem características semelhantes á da galáxia NGC 1068, que foi anteriormente estuda por Fath (1909). Fath identificou na NGC 1068, seis linhas de emissão intensas características de regiões HII e nebulosas planetárias, uma dessas linhas era a  $H\beta$ . As demais linhas estavam relacionadas a transições proibidas, ou seja, linhas que são emitidas por átomos submetidos a transições de energia que fogem a regra de seleção estabelecida pela mecânica quântica, são elas:  $[O \ II] \lambda 3727$ ,  $[Ne \ III] \lambda 3869$ ,  $[O \ III] \lambda 4363$ , 4959, 5007 (Audibert, 2015). No entanto, as linhas da NGC 1068 eram extremamente alargadas, com algumas centenas de  $Km \ s^{-1}$ , comparadas as linhas de emissão encontradas em nebulosas planetárias (Riffel, 2008).

As galáxias que apresentam essas características ficaram conhecidas como uma classe específica de objetos, as Galáxias Seyfert, elas apresentam em suas regiões centrais um alto brilho superficial, linhas de emissão alargadas e com alto índice de ionização (Audibert, 2015). As galáxias Seyferts são divididas em: Seyfert tipo 1 (Sy 1) e Seyfert tipo 2 (Sy 2).

A diferença entre as galáxias do tipo Seyfert 1 e Seyfert 2 esta relacionada a presença ou ausência da componente larga nas linhas de recombinação do hidrogênio correspondentes a H $\beta$ , H $\alpha$  e H $\gamma$ . Na Fig.1.6 - (a) é possível perceber que nas galáxias do tipo Seyfert 1 as linhas de emissão são alargadas, onde o gás pode atingir velocidade da ordem  $\sim 10.000 - 50.000 km/s$ . Já nas galáxias Seyfert 2 (Fig.1.6 - (b)) identificamos as regiões de linhas estreitas onde o gás chega a velocidades da ordem de  $\sim 500 - 1.000 km/s$ .



Figura 1.6: (a) - Seyfert 1 representada pelo espectro da galáxia NGC5141. (b) - Seyfert 2 representada pelo espectro da galáxia 4941. Fonte: Bill Keel (https://pages.astronomy.ua.edu/keel/agn/) - última atualização: Novembro, 2002

O alargamento dessas linhas reflete um efeito geométrico do observador para com a galáxia de acordo com o modelo unificado de AGN (Fig.1.7). Este modelo foi proposto por

Antonucci e Miller (1985) e sugere que no centro da galáxia existe um buraco-negro com um disco de gás ao seu redor, denominado disco de acresção. As diferenças observadas nos espectros de emissão das galáxias Seyfert tipo 1 e 2 podem ser atribuídas ao angulo de visada do observador de acordo com esse modelo.

Na Fig.1.7 pode-se perceber que o angulo de visada de quem observa uma galáxia do tipo Seyfert tipo 1 não é obscurecido pelo toro molecular ("face-on"), desta forma o observador consegue identificar a região central da galáxia e a região de linhas largas (BLR, do inglês "Broad Line Region"). Já nas galáxias do tipo Seyfert tipo 2 o ângulo de visada do observador é obscurecido pelo toro molecular ("edge-on") impedindo a observação das regiões centrais da galáxia resultando no espectro de regiões de linhas estreitas (NLR, do inglês "Narrow Line Region") (Sales, 2012).



Figura 1.7: Esquema representativo do modelo unificado de AGN. No centro da imagem (em preto) está representado um buraco-negro supermassivo (SMBH, do inglês "Super-Massive Black-Hole"). Em vermelho está o disco de acreção. Os jatos são representados pela parte em amarelo. A NLR é representada pelos pontos em azul escuro. A região em torno do disco de acresção é a BLR. O toro molecular é representado pelas regiões em cinza em ambos os lados da figura.). Fonte: (Sales, 2012)

### 1.1.2 Quasar

São AGNs raros e altamente luminosos, com luminosidade bolométrica de  $X10^{45}$  á  $X10^{48} \ ergs^{-1}$ , seu nome vem do inglês quasi-stellar radio source, que em português significa fonte de rádio quase estelar. Esses objetos possuem esta nomenclatura por acreditar-se que em seu centro exista um buraco negro maior que uma estrela, porém este objeto não possui tamanho suficiente para ser considerado uma galáxia. A função de luminosidade das galáxias do tipo Seyfert 1 ajusta-se suavemente a função de luminosidade de um Quasar em magnitudes absolutas M = -21 ou M = -22. A magnitude absoluta de um quasar é M < -23 (Osterbrock, 1989).

Nos Quasares, da mesma forma como ocorre nas galáxias do tipo Seyfert 1, as linhas permitidas *HI*, *HeI* e *HeII* são alargadas, porém uma diferença importante de característica espectral dos Quasares para as Seyferts 1 é que as linhas proibidas são de baixíssima intensidade e na maior parte das vezes inexistentes. Acredita-se que isso ocorra em função do processo de desexcitação ocorrer por colisão (Rees et al., 1989).

#### 1.1.3 Galáxia LINER

LINERs, do inglês Low-Ionization Nuclear Emission-Line Region, são galáxias com núcleo ativo e caracterizada por possuir espectro dominado por linhas de emissão estreitas, produzidas por ions de baixa ionização. O gás é ionizado por fonte não térmica. Aproximadamente 80% das galáxias LINERs são espirais Sa e Sb, isso significa 1/3 de todas as galáxias espirais. Também são encontradas LINERs com estrutura morfológica do tipo Sc e Elípitcas, mas em menor número.

### 1.1.4 Galáxia Starburst

As galáxias classificadas como Starburst são geralmente compreendidas como objetos que possuem episódios de formação estelar intensa durante um período de tempo relativamente curto ao ser comparado com a idade do universo. As galáxias Starburst possuem várias regiões de formação estelar jovem na região central ( $\approx 1 Kpc$ ) da galáxia. Esses são fenômenos importantes para estudar a evolução de estrelas massivas, gás e poeira e processos físicos associados aos estágios iniciais da formação de galáxias.

Galáxias Starbursts possuem alta concentração de gás (Leitherer et al., 2001), e alta

taxa de formação estelar ( $\approx 10 M_{\odot} s^{-1} \text{ Kpc}^{-2}$ ), cerca de 10<sup>3</sup> vezes mais intensa que a taxa de formação estelar da Via Láctea  $(1, 65, \pm 0.20 M_{\odot})$  originando estrelas do tipo O e B com massa >  $25 M_{\odot}$  a temperatura eletrônica  $t_e \sim 10^4 K$ , e que são responsáveis pela emissão de linhas características intensas de S IV  $\lambda 1400$  e C IV  $\lambda 1550 \text{ Å}$  (Leão, 2006).

A maior parte da luminosidade das galáxias Starburst encontra-se no comprimento de onda do ultra-violeta (1 a 380 nm) em função da formação de estrelas jovens (Searle et al., 1973), responsáveis pela ionização da poeira que absorve essa radiação e nesse processo de excitação acaba re-emitindo no comprimento de onda do infravermelho. O período estimado de vida de uma galáxia como a Via Láctea é de aproximadamente  $10^9$  anos e o período de formação estelar pode durar quase toda a sua existência (~  $10^8$ ). Em galáxias Starbursts o gás é consumido rapidamente devido aos surtos de formação estelar, ou seja, em galáxias com essas características o período de formação de estrelas jovens é sustentado por um curto período de tempo. Uma característica espectral marcante nas Starbursts são a presença de linhas de emissão estreitas e intensas como pode ser visto na 1.8 onde temos o espectro de quatro Starbursts representados pelas galáxias N3310, N7714, N1614 e N34.

Ainda não está claro para a ciência quais são os mecanismos que geram esses surtos de formação estelar. No entanto, existem duas teorias sobre como se forma um Starburst. Em galáxias espirais barradas, a existência da barra pode ser responsável por atrair e acumular gás na região central ( $r \leq 1 K pc$ ) e iniciar um processo de formação estelar. Além disso os surtos também podem ser ocasionados a partir de colisões galácticas (Toomre e Toomre, 1972).

Para o desenvolvimento desta pesquisa foi utilizada uma amostra de galáxias dominadas por Starburst, essas galáxias foram assim classificadas por terem a emissão dominada por surtos de formação estelar jovem, considerando os critérios estabelecidos por Hernán-Caballero e Hatziminaoglou (2011), as características dessa amostra serão melhor detalhadas no capítulo de Observação e Redução de Dados.

Para facilitar a compreenção apartir daqui iremos nos referir a Starburts como galáxias dominadas por surtos de formação estelar e a AGN como galáxias que possuem buraco negro ativo.



*Figura 1.8:* Espectros de 4 Starbursts representados pelas galáxias N3310, N7714, N1614 e N34. Fonte: Fig.9 (Riffel et al., 2006)

### 1.2 Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos

A espectroscopia se preocupa principalmente em estudar a interação da luz com a matéria e é uma ferramenta fundamental para o estudo na Astronomia. Ela é capaz de revelar as propriedades mais inerentes de uma galáxia, conectando a Astronomia à Física em seus níveis atômicos e moleculares (Anil K. Pradhan, 2011). Vários compostos químicos, orgânicos e inorgânicos, que possuam ligações covalentes emitem ou absorvem radiação com frequências na região do infravermelho, como por exemplo as moléculas de Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos que emitem no infravermelho médio através de vibrações moleculares.

Cerca de 20% do carbono do meio interestelar está na forma de hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (da sigla em inglês PAHs), moléculas que dominam a emissão nas bandas do infravermelho médio (Canelo, 2016). De acordo com Berné et al. (2015), estimase que moléculas compostas por carbonos, como os PAHs, possuem um papel de extrema importância no meio interestelar. O Benzeno é o composto orgânico que forma a família de hidrocarbonetos aromáticos (Chang, 2010). De acordo com registros históricos, o primeiro
cientista a identificar o Benzeno foi Michael Faraday, no ano de 1825, enquanto estudava um resíduo oleoso procedente de um gás de iluminação. Antes disso, era sabido que apenas o Benzeno era formado por seis átomos de carbono e seis de hidrogênio (C6H6), porém a estrutura do benzeno ainda era uma incógnita. O cientista Friedrich August Kekulé, no ano de 1865, foi o primeiro a identificar e propor uma estrutura para o Benzeno que explicasse efetivamente todas as suas características. Em Astronomia a primeira observação realizada de moléculas formadas por Benzeno, hidrocarbonetos aromáticos policíclicos -PAHs, foi realizada por Gillett em 1975 (Gillett, F. C. and Kleinmann, D. E. and Wright, E. L. and Capps, R. W., 1975). Os PAHs são moléculas orgânicas que possuem uma rede hexagonal planar aromática formada por anéis benzenicos (Sales, 2012).

## 1.2.1 A Estrutura da Molécula de Benzeno

A molécula de Benzeno pertence à classe dos hidrocarbonetos e é formado apenas por seis átomos de carbonos e seis átomos de hidrogênios. É explicado pela química que o átomo de carbono pode fazer quatro ligações classificadas em três tipos: simples, dupla e tripla. Aqui nos concentraremos nas duas primeiras. A ligação simples denominamos de ligação sigma,  $\sigma$ . Este tipo de ligação é responsável pela interação frontal dos orbitais moleculares, como exemplificado na 1.9 - (a), onde é possível ver dois átomos de carbono em ligação simples.



Figura 1.9: (a) Ilustração das interações frontais causadas pelos orbitais sigmas no anel benzenico  $\sigma$ . (b) Ilustração da interação paralela causada pelos orbitais  $\pi$  no anel benzenico.

A ligação dupla denomina-se de ligação pi,  $\pi$ . A ligação  $\pi$  é dependente direta da ligação  $\sigma$ , pois quando se tem uma ligação dupla a primeira será sempre sigma ( $\sigma$ ) e a segunda será pi ( $\pi$ ). Na 1.9 - (b) pode-se observar a interação paralela entre orbitais ocasionada pela ligação dupla entre dois carbonos. Por enquanto vamos nos deter apenas à estrutura formada pelos carbonos. No Benzeno os carbonos formam o que chamamos de geometria trigonal plana, com ligações simples ( $\sigma$ ) e duplas ( $\pi$ ) distribuídas alternadamente pela molécula, conforme 1.10.



*Figura 1.10:* Estrutura trigonal plana da molécula de Benzeno com ligações duplas e simples distribuídas alternadamente.

O que acontece no Benzeno é que todos os seus carbonos participam de uma das ligações duplas, logo não podemos afirmar que a 1.10 está totalmente correta, pois as ligações duplas poderiam estar distribuídas de outra maneira, como na 1.11.



*Figura 1.11:* Estrutura trigonal plana da molécula de Benzeno com ligações duplas e simples distribuídas alternadamente.

Em consequência disso, assume-se que a melhor representação da mesma é um híbrido de todas as possibilidades de configurações da molécula. Desta forma o Benzeno é representado pela 1.12.

Outra consequência, proveniente das ligações duplas em todos os carbonos do Benzeno, é a sua deslocalização eletrônica, já que os carbonos participam de ligações  $\pi$  e todos



*Figura 1.12*: Estrutura trigonal plana da molécula de Benzeno com ligações duplas e simples distribuídas alternadamente.

eles formam orbitais paralelos. No Benzeno existem 42 elétrons distribuídos par a par em cada orbital. 24 elétrons estão nos orbitais de interação frontal, ou seja, nas ligações sigma, e são distribuídos localizadamente. Porém os carbonos com ligações  $\pi$  formam três orbitais paralelos de interação dos pares de elétrons. Nesse tipo de interação os elétrons circulam livremente entre os orbitais, formando uma nuvem acima e abaixo do plano do anel benzênico, que é a região de maior probabilidade de encontrarmos esses elétrons, conforme 1.13. A essa distribuição deslocalizada de elétrons no Benzeno dá-se o nome de Ressonância.



*Figura 1.13:* Molécula de Benzeno [C6H6], base das moléculas de Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos. Acima e a baixo do anel benzênico está a região de maior probabilidade de encontrar o elétron denominada região de ressonância.

#### 1.2.2 Emissão Por Vibração Molecular No Infravermelho

No decorrer da década de 1860, James C. Maxwell conseguiu mostrar a possibilidade de se encontrar uma equação de onda que pudesse descrever a propagação de um campo magnético, bem como uma equação para descrever a propagação do campo elétrico. Isto o levou a relacionar a luz a uma onda eletromagnética. Entre as regiões do espectro eletromagnético existe a do infravermelho, que por sua vez é divida em infravermelho próximo – NIR (do inglês "Near Infrared") (4000 até 12000  $cm^{-1}$ ), infravermelho médio – MIR (do inglês "Middle Infrared") ( de 4000 a 400  $cm^{-1}$ ) e infravermelho distante – FIR (do inglês "Far Infrared") (400 até 40  $cm^{-1}$ ) (Hilzette et al., 2008). Na química, a principal região de interesse é a que se encontra no intervalo de comprimentos de onda entre 2,5 $\mu m$  e  $25\mu m$ , por ser característica das emissões por vibrações moleculares. Os principais modos vibracionais são os de estiramento e de deformação angular, representados na 1.14.



*Figura 1.14:* Modos normais de vibrações moleculares. Fonte: LaPTeC - Unesp (https://www2.sorocaba.unesp.br/gpm/)

Nos modos de Deformações Axiais ocorre a variação da distância entre os átomos e nos modos de Deformações Angulares ocorre a variação dos ângulos formados pelas ligações entre os átomos, conforme a figura pode-se notar que essas deformações podem ocorrer no plano ou fora do plano da ligação química. A emissão no infravermelho ocorre quando uma molécula absorve um fóton ultra-violeta alterando seu estado energético, ou seja a molécula é levada de um estado menos energético para um estado mais energético, isso faz com que seus modos vibracionais sejam excitados consumindo uma parte dessa energia e no processo de desexcitação ocorre a emissão no comprimento de onda do infravermelho que dependerá também da geometria e carga da molécula. No meio interestelar as PAHs são o material orgânico mais abundante.

Acredita-se que até 50% da luminosidade emitida no infravermelho médio pode estar relacionada as bandas de emissão das PAHs. Além disso, essa classe de moléculas são importantes traçadoras de regiões de formação estelar. As bandas mais intensas características dessas moléculas são 3.3, 6.2, 7.7, 8.6 e 11.3  $\mu m$ . Existem outras 13 bandas de menor intensidade que também estão associadas a presença de PAHs, são elas: 3.4, 3.5, 5.25, 5.65, 6.0, 6.9, 10.5, 11.0, 12.7, 13.5, 14.2, 17.4 e 16.4  $\mu m$  (Tielens, 2005). Na tabela 1.1 é possível identificar os tipos de modos vibracionais associados a cada banda característica dos PAHs.



*Figura 1.15:* Sobreposição de nove espectros de galáxias Starbursts observadas pelo IRS em que são identificadas as principais bandas de emissão características de PAHs. Fonte: (Brandl et al., 2006)

Os PAHs são basicamente arranjos de anéis benzenicos interligados e são o material orgânico mais abundante no meio interestelar (Ehrenfreund et al., 2006). Estudos indicam que essas moléculas, juntamente com outras macro moléculas, foram levadas aos planetas através de meteoritos e deposições de poeira interplanetária (Ehrenfreund et al., 2002). Esses materiais podem ter sido produzidos dentro do sistema solar ou em outras partes da nossa galáxia, chegando na Terra intactos (Canelo, 2016).

As moléculas PAHs podem ser divididas em classes. Na Figura 1.16 pode-se identificar de um lado a classe das PAHs Pericondensados, nessas moléculas os átomos de carbono do anel benzenico podem participar de 3 (três) anéis diferentes simultaneamente. Já do outro lado da figura consta a classe de PAHs mais abertas, onde os átomos de carbono participam de no máximo dois anéis benzenicos diferentes, denominada de Catacondensados.

Em detrimento disso, as PAHs Pericondensados são mais estáveis pois nessas moléculas a núvem de deslocalização eletrônica geralmente é maior devido a sua configuração geométrica (Tielens, 2005). Os PAHs podem ser formados no meio interestelar a partir de processos de condensação de fuligem de material de estrelas (Canelo, 2016). As reações acontecem a partir da molécula de acetileno (C2H2), passando pelo processo de adição de hidrogênio



# *Figura 1.16*: Classe de PAHs: Pericondensados - Átomos de carbonos são parte de três anéis benzênicos simultaneamente. Catacondensados - Moléculas de estrutura linear, átomos de carbono participam de até dois anéis benzênicos.

e a partir do fenil (C6H6) é estabelecido um curso estável para a molécula de Benzeno (C6H6) e então anéis aromáticos começam a se conectar formando moléculas de PAHs mais complexas.

# 1.3 Motivação e Objetivos

As galáxias ativas (AGNs e Starbursts) são os objetos mais energéticos do universo, chegando a emitir de 100 a 1000 vezes a energia da Via Láctea ( $10^{48} erg/s$ ) (Sales, 2012). Essas galáxias possuem uma forte emissão no infravermelho médio, característica que normalmente é atribuída a presença de moléculas de PAHs. A emissão em comprimentos de onda do MIR da amostra de galáxias dominadas por Starburst, ou seja, intensa formação estelar é caracterizada tanto por emissão molecular, PAHs e silicatos, quanto por emissão de gás ionizado por estrelas (ver Fig. 1.15 deste trabalho e também Figura 12 de (Hernán-Caballero A., Hatziminaoglou E., 2011) ) ou choques devido ao disco de acresção nos AGNs. Neste sentido, uma pergunta fundamental é sobre a compreensão da contribuição da fonte de excitação em galáxias Starburst e AGNs, pois as fontes de excitação possuem origens distintas, onde Starburst possui fontes térmicas vindo de estrelas e AGNs fontes não térmicas devido ao disco de acresção do SMBH.



Figura 1.17: Classe de PAHs: Pericondensados - Átomos de carbonos são parte de três anéis benzênicos simultaneamente. Catacondensados - Moléculas de estrutura linear, átomos de carbono participam de até dois anéis benzênicos.

Portanto, ao estudar as moléculas de PAHs, material orgânico, em uma amostra composta por galáxias dominadas por emissão estelar, porém, que também possuem alguma contribuição de AGNs teremos a oportunidade, utilizando técnicas multivariadas de modelagem da estrutura de covariância, de derivar a contribuição das atividades Starburst e AGN para a evolução das propriedades físicas e químicas das moléculas orgânicas de PAHs nas galáxias, e assim, ressaltar algum elemento importante na evolução das moléculas orgânicas ao longo do Universo.

A literatura científica aponta as PAHs como forte indicadora de formação estelar (Starbursts), e que apesar de serem moléculas estáveis, os PAHs não sobrevivem em AGNs. Essas informações foram obtidas através de estudos realizados por e.g. Smith et. al (2007) e O'Dowd et. al. (2009) que utilizou uma pequena amostra (> 20) AGNs. Em contra partida, o trabalho realizado por Sales et. al. (2010, 2011, 2013) com uma amostra contendo 186 objetos extragalácticos (AGNs e Starbursts), propôs que as PAHs sobrevivem em ambientes altamente energéticos devido a existência de grãos de poeira com geometria toroidal que absorvem a luz direta do núcleo ativo (Sales et. al. 2010). Neste sentido se faz necessário ampliar os estudos a respeito de moléculas de PAHs em ambientes de altas energias para compreender os mecanismos que fazem com que essas moléculas resistam a essas condições.

Sendo assim, este trabalho teve como objetivo principal utilizar ferramentas estatísticas de análise por agrupamento e componentes principais, para estudar uma amostra de 148 galáxias dominadas por Starbursts, afim de inferir maiores informações a respeito de suas propriedades físico-químicas e a possível relação entre tamanhos moleculares dos PAHs e a principal fonte de ionização das galáxias. Tabela 1.1 - Bandas de emissão características de moléculas de Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos e os modos vibracionais correspondentes. Fonte: Adaptada do Tielens, 2004

Frequêcia	Modos Vibracionais	
$3.3 \ \mu m$	aromatic C-H stretching mode	
$3.4 \ \mu m$	aliphatic C-H stretching mode in methyl groups C-H stretching mode	
	in hydrogenated PAHs hot band of the aromatic C-H stretch	
$5.2~\mu m$	combination mode, C-H bend and C-C stretch	
$5.65~\mu m$	combination mode, C-H bend and C-C stretch	
$6.0~\mu m$	C-O stretching mode	
$6.2 \ \mu m$	aromatic C-C stretching mode	
$6.9~\mu m$	aliphatic C-H bending mode	
7.6 $\mu m$	C-C stretching and C-H in-plane bending modes	
$7.8~\mu m$	C-C stretching and C-H in-plane bending modes	
$8.6~\mu m$	C-H in-plane bending modes	
11.0 $\mu m$	C-H out-of-plane bending modes, solo, cation	
11.2 $\mu m$	C-H out-of-plane bending modes, solo, neutral	
$12.7~\mu m$	C-H out-of-plane bending modes, solo, cation	
13.6 $\mu m$	C-H out-of-plane bending modes, quartet	
14.2 $\mu m$	C-H out-of-plane bending modes, quartet	
16.4 $\mu m$	in-plane and out-of-plane C-C-C bending modes in pendant ring	
Plateaus		
3.2-3.6 $\mu m$	overtone and combination modes, C-C stretch	
$6-9 \ \mu m$	blend of many C-C stretch and C-H in-plane bend modes	
11-14 $\mu m$	blend of C-H out-of-plane bending modes	
15-19 $\mu m$	in-plane and out-of-plane C-C-C bending modes	

Capítulo 1. Introdução

Capítulo 2\_\_\_\_\_

# Materiais e Métodos

No decorrer deste capítulo é detalhado as informações a respeito dos instrumentos de observação, bases de dados, métodos e ferramentas matemáticas utilizadas para viabilizar a realização desta pesquisa.

# 2.1 Telescópio Espacial Spitzer



*Figura 2.1:* Telescópio Espacial Spitzer, lançado no ano de 2003, especificamente desenvolvido para realizar observações no comprimento de onda do Infravermelho. Fonte: http://www.spitzer.caltech.edu/

O telescópio espacial Spitzer foi lançado em 25 de agosto de 2003, pesa cerca de 865 kg

em sua totalidade e possui um espelho de 85cm de diâmetro. Foi projetado para realizar observações e coleta de dados no comprimento de onda do infravermelho. Até o momento do seu lançamento foi o maior projeto desenvolvido para captura de dados nesse intervalo do espectro eletromagnético.

Possui um compartimento com três instrumentos científicos, resfriados criogenicamente. Esses instrumentos são os responsáveis por realizar as observações de dados fotométricos e espectroscópicos. São eles: IRAC, MIPS e IRS.

## 2.1.1 Fotômetro IRAC

O IRAC (da sigla em inglês "Infrared Array Camera"), foi projetada para captar imagens nos comprimentos de onda do infravermelho próximo e médio (entre 3.6 á 8.0  $\mu m$ ). Este instrumento possui quatro detectores com dimensões de 256 x 256 pixeis cada um, que são responsáveis por medir a luz e comprimentos de ondas distintos: 3.6, 4.5 , 5.8 e 8.0  $\mu m$ .

#### 2.1.2 Fotômetro MIPS

O MIPS (do inglês "Multiband Imaging Photometer for Spitzer") é uma câmera assim como o IRAC, porém realiza capturas no comprimento de onda do infravermelho médio e distante. O conjunto de detectores responsáveis pela banda de 24  $\mu m$  possuem dimensões de 228 x 228 pixels, já os detectores responsáveis pelas bandas de 70 e 160  $\mu$ m possuem dimensões de 32 x 32 e 2 x 20 pixels. Além disso, o MIPS é capaz de realizar espectroscopia simples assim como o IRS.

#### 2.1.3 Espectrógrafo IRS

O IRS (do inglês "Infrared Spectrograph"), como o próprio nome sugere, é um espectrógrafo que fornece dados com alta (R ~ 600) e baixa (R ~ 60-130) resolução no infravermelho médio, cobrindo um intervalo espectral entre 5 a 40  $\mu m$ . Este instrumento também possui quatro módulos que atuam em comprimentos de onda e qualidade de resolução diferentes. Um módulo possui baixa resolução e comprimento de onda curto, que detecta luz entre o intervalo de 5,3 á 14  $\mu m$ . Um módulo de baixa resolução e comprimento de onda longo para observação nos intervalos de 14 á 40  $\mu m$ . Um módulo com alta resolução e comprimento de onda curto e cobre o intervalo de 10 á 19,5  $\mu m$  e por último um módulo de alta resolução e comprimento de onda longo, para observações entre 19 á 37  $\mu m$ . Além disso cada módulo possui uma fenda individual.

## 2.1.4 O Projeto Spitzer/IRS ATLAS

O projeto Spitzer/IRS ATLAS é um catálogo público que contém cerca de 750 espectros já reduzidos de diversas classes de galáxias, como Starburts, Seyferts e Rádio galáxias. Os dados foram observados pelo espectrógrafo no infravermelho presente no Telescópio Espacial Spitzer, que realizou capturas em baixa, média e alta resolução (Canelo, 2016). Neste trabalho, foram utilizados dados de galáxias retirados do projeto Spitzer/IRS ATLAS que fazem parte de uma amostra classificada como dominadas por Starbursts (MIR SB), de acordo com os parâmetros derivados por Hernán-Caballero A., Hatziminaoglou E. (2011), ou seja, galáxias cuja emissão é dominada por surtos de formação estelar. A amostra completa contém 257 galáxias Starbursts, porém, devido a ausência de dados espectrais no intervalo entre 5 e  $13\mu m$  e/ou alto valor de ruído nos dados de 109 galáxias o presente estudo possui uma amostra composta por 148 objetos.

A Fig. 2.2 mostra os espectros normalizadas das galáxias da amostra final estudada, onde podemos ver, claramente, a emissão das bandas de PAHs em  $6.2\mu m$ ,  $7.7\mu m$ ,  $8.6\mu m$ ,  $11.2\mu m$  e  $12.8\mu m$ .

# 2.2 Base de dados do NASA Ames PAH IR

Desde meados dos anos 90 são realizados estudos, computacionais e experimentais, com os espectros eletromagnéticos no infravermelho de PAHs. Nos últimos 20 anos esses estudos foram intensificados pelo centro de pesquisa da Administração Nacional da Aeronáutica e Espaço (NASA, do inglês "National Aeronautics and Space Administration"), com o objetivo de, a longo prazo, coletar uma quantidade considerável de informações sobre as PAHs para desenvolver sondas que possibilitem a realização de estudos mais detalhados dessa classe molecular em objetos astronômicos (Boersma et al., 2014). Os PAHs estudados por esses autores representam em tamanho, carga e estruturas moleculares a faixa que possivelmente está presente no meio interestelar. Os resultados desses estudos vem sendo reunido em uma biblioteca virtual e disponibilizada a comunidade científica e geral.



Figura 2.2: A emissão das bandas de PAHs em  $6.2\mu m$ ,  $7.7\mu m$ ,  $8.6\mu m$ ,  $11.2\mu m$  e  $12.8\mu m$  podem ser claramente identificadas

O NASA Ames PAH IR Spectroscopy Database - PAHdb foi publicado pela primeira vez em 2010 e possuía uma biblioteca com 583 espécies moleculares, experimentas e teóricas, de PAHs. Em 2013 houve uma atualização no banco de dados e a versão 2.00 apresentou 700 espécies moleculares. A versão 2.00 é a utilizada neste trabalho. Além dela, durante a realização desta pesquisa, uma nova atualização foi realizada, a versão 3.00 possui 2439 espécies moleculares.

Através da plataforma NASA Ames PAH IR Spectroscopy Database é possível ter acesso aos espectros de todas as moléculas simuladas. Além disso, o site oferece uma ferramenta em IDL (uma coleção de programas que utiliza uma linguagem de programação orientada a objetos) que permite realizar trabalhos offline com o PAHdb. A ferramenta denomina-se AmesPAHdbIDLSuite. As figuras 2.3 e 2.4 representam um comparativo dos PAHs presentes no banco de dados da versão 2.00. A discriminação levou em consideração propriedades como tamanho, carga e composição das moléculas. Podemos perceber que existe uma sobre abundância de moléculas pequenas de PAHs, tanto na versão 2.00 quanto na versão 3.0, e isso é devido ao custo computacional necessário para resolver a dinâmica molecular de espécies de moléculas grandes. Maiores detalhes podem ser encontrados no artigo publicado por (Boersma et al., 2014).



*Figura 2.3*: Distribuição de PAHs da versão 2.0 do PAHDb. O eixo y representa o número de espécies moleculares e o eixo x representa a quantidade de átomos de carbono presente em cada PAH. PAHs com adição de oxigênio são representados pela cor amarela, magnésio/ferro pela cor marrom e nitrogênio pela cor verde. Em azul aparecem os PAHs "puros" compostos apenas por carbono e hidrogênio. Fonte: Boersma et al. (2014).



*Figura 2.4:* Distribuição de PAHs da versão 3.20 do PAHDb. O eixo y representa o número de espécies moleculares e o eixo x representa a quantidade de átomos de carbono presente em cada PAH. Os PAHs neutros são representados pela cor marrom, ânions pela cor amarela e cátions pela cor verde. Fonte: Boersma et al. (2014).

# 2.3 Determinação do Tamanho dos PAHs Usando Mapeamento de Ângulo Espectral (SAM)

É comum a utilização da espectroscopia como ferramenta para identificar elementos químicos em objetos astronômicos. Isso só é possível porque cada molécula, no caso deste trabalho, possui um espectro característico devido a sua configuração geométrica, seus modos vibracionais, temperatura, carga e composição. O banco de dados moleculares citado anteriormente é um grande exemplo deste assunto. Neste contexto, Espinoza (2020, no Prelo) derivou o tamanho das moléculas de PAHs no estado neutro para cada galáxia Starburst da nossa amostra utilizando o algorítmo de mapeamento de ângulo espectral (SAM, do inglês "Spectral Angle Mapper").

O método matemático utilizado pelo algoritmo SAM, basicamente obtém os ângulos formados entre o espectro de referência e o espectro de interesse, tratando-os como vetores em um espaço com dimensionalidade igual ao número de bandas (Kruse et al., 1993). Nesta análise realizada por Espinoza (2020, no prelo) o espectro de referência é representado pela classe molecular e o os espectros de interesse são representados pelas galáxias.

O SAM pode ser expresso matematicamente da seguinte forma,

$$\alpha = \cos^{-1}\left(\frac{\sum xy}{\sqrt{\left(\sum (X)^2 \sum (Y)^2\right)}}\right),\tag{2.1}$$

onde,  $\alpha$  é o ângulo calculado entre o espectro de referência e o espectro de interesse que varia entre 0° e 90°; X é o espectro de interesse; Y é o espectro de referência. Quanto menor o ângulo  $\alpha$ , maior o índice de similaridade entre os espectros. Graficamente o SAM pode ser representado de acordo com a figura 2.5.

Tendo em vista uma analise dos tamanhos moleculares dos PAHs, baseados na quantidade de carbonos presentes na versão 2.00 do PAHDb, Espinoza & Sales (2020, no prelo) categorizou os PAHs neutros desse banco de moléculas em 5 classes objetivando diminuir a degenerescência. A classe de PAHs considerados muito pequenos, neste trabalho, foi representado por moléculas com até 30 carbonos ( $X6_{-}30$ ), a classe de moléculas pequenas compreende os PAHs entre 31 e 150 carbonos ( $X31_{-}150$ ), a classe de moléculas médias possuem PAHs entre 151 e 225 carbonos ( $X151_{-}225$ ), a classe com PAHs grandes inclui as moléculas entre 226 a 300 carbonos ( $X226_{-}300$ ) e a classe de PAHs muito grandes



Figura 2.5: Representação do ângulo espectral ( $\alpha$ ) calculado entre o espectro de interesse (material x) em relação ao espectro de referência (material r). Diagrama SAM. Fonte: http://vision.gel.ulaval.ca/jfla-londe/cours/4105/h15/tps/results/projet/SASOJ/index.html

compreende as moléculas com mais de 300 carbonos (maior300).

Esses 5 grupos formaram as classes moleculares que foram utilizadas como espectros de referência para assim o algorítmo SAM derivar o tamanho das moléculas de PAHs para cada galáxia Starburst da nossa amostra. Os espectros de referência foram estabelecidos em  $45^{\circ}$  (ver linha diagonal).

As figuras 2.6, 2.7, 2.8, 2.9 e 2.10 mostram os resultados do estudo realizado por Espinoza & Sales (2020, no prelo), onde derivaram o tamanho das moléculas de PAHs em cada galáxia Starburst da nossa amostra utilizando o algorítmo SAM. Em todas as figuras os símbolos em azul representam galáxias Starburts da nossa amostra, a linha diagonal em 45° representa a classe molecular determinada e os eixos x e y, que vão de 0% a 100%, representam intensidade. Desta forma, a distância da galáxia para com a diagonal representa o grau de similaridade entre elas. A distância do ponto em relação a origem dos eixos x e y representa a intensidade de contribuição da classe molecular para o fluxo da galáxia. Ou seja, quanto maior for a proximidade da galáxia com a linha diagonal de 45° e maior for a sua distância da origem, maior será a similaridade da galáxia com a classe molecular e maior será a contribuição da classe molecular para o fluxo da galáxia.

Ao analisar as figuras 2.6, 2.7, 2.8, 2.9 e 2.10, foi possível perceber que as galáxias dominadas por Starburts da nossa amostra possuem cerca de 65,74% de moléculas classificadas como muito pequenas e/ou pequenas em sua composição, ou seja, PAHs com até



*Figura 2.6:* Diagrama SAM das galáxias Starburst da nossa amostra (simbolos "+" em azul). Linha diagonal representa o espectro de referência da classe de PAHs neutro muito pequeno (menos que 30 átomos de carbono). Retirado de Espinoza & Sales (2020, no prelo).



*Figura 2.7:* Diagrama SAM das galáxias Starburst da nossa amostra (simbolos "+" em azul). Linha diagonal representa o espectro de referência da classe de PAHs neutro pequeno (de 31 a 150 átomos de carbono). Retirado de Espinoza & Sales (2020, no prelo).



*Figura 2.8:* Diagrama SAM das galáxias Starburst da nossa amostra (simbolos "+" em azul). Linha diagonal representa o espectro de referência da classe de PAHs neutro médio (de 151 a 225 átomos de carbono). Retirado de Espinoza & Sales (2020, no prelo).



*Figura 2.9:* Diagrama SAM das galáxias Starburst da nossa amostra (simbolos "+" em azul). Linha diagonal representa o espectro de referência da classe de PAHs neutro grandes (de 226 a 300 átomos de carbono). Retirado de Espinoza & Sales (2020, no prelo).



*Figura 2.10*: Diagrama SAM das galáxias Starburst da nossa amostra (simbolos "+" em azul). Linha diagonal representa o espectro de referência da classe de PAHs neutro pequeno (mais do que 300 átomos de carbono). Retirado de Espinoza & Sales (2020, no prelo).

150 carbonos (Fig. 2.6 e Fig. 2.7). Entretanto, também podemos perceber que mesmo existindo uma predominância de moléculas pequenas, essa classe de PAHs contribui apenas com  $\sim 15\%$  do fluxo espectral total das galáxias Starburst.

Essa contribuição para o fluxo total das galáxias é baixa quando comparada a de moléculas de PAHs neutras muito grandes (ver figura 2.10). Com esta figura foi possível concluir que a classe de PAHs neutros muito grandes, compõem 37,6% da composição de PAHs das galáxias da nossa amostra. Entretanto, constatou-se que mesmo em minoria, esta classe contribui com  $\sim 60\%$  do fluxo espectral total das galáxias Stabursts. Esses resultados de Espinoza & Sales (2020, em preparação) corroboram com os de Sales et al. (2010, 2013) e Ruschel-Dutra et al. (2014) onde mostrou que galáxias Starburst possuem moléculas menores e neutras enquanto AGNs moléculas grandes e ionizadas. É importante lembrar aqui que esse estudo está sendo desenvolvido por Espinoza & Sales (2020) e está em preparação, mas esses resultados foram utilizados na análise estatística realizada nesta dissertação.

# 2.4 Análise de Agrupamento

As técnicas estatísticas são ferramentas comumente utilizadas para análises e interpretações de conjuntos de dados. A análise por agrupamento, também conhecida como análise de cluster, é uma técnica estatística, que segundo Tan et al. (2009), tem como principal objetivo agrupar dados de acordo com a sua similaridade. Desta forma, a clusterização é utilizada para separar os registros de um determinado banco de dados em clusters (ou agrupamentos), de tal forma que os elementos de um cluster compartilhem propriedades comuns, que servem para distinguir os elementos em outros clusters, tendo como objetivo maximizar similaridade entre registros pertencentes a um mesmo grupo e minimizar a similaridade entre grupos distintos (Galvão e Marin (2009)).

São diversas as abordagens que podem ser realizadas através desse método. Existem algorítimos para diferentes análises de agrupamento, uma classificação consolidada cientificamente define os algorítimos de clusters como: particionais, grade, densidade ou hierárquicos (Jain, A. K. and Murty, M. N. and Flynn, P. J., 1999). Neste estudo utilizouse a análise por agrupamento hierárquico (ou clustering hierárquico).

## 2.4.1 Clustering Hierárquico

Esta é uma técnica não supervisionada que procura por padrões de forma automatizada. Cada algorítimo de cluster possui suas particularidades, como por exemplo, o clustering baseado em densidade assume que um agrupamento será uma região de alta densidade separada, de outras regiões de alta densidade, por regiões de baixa densidade. O clustering hierárquico também resulta em agrupamentos onde a similaridade é aumentada entre objetos de um mesmo grupo e é diminuída entre objetos pertencentes a grupos diferentes. Entretanto, o resultado obtido através da aplicação de clustering hierárquico, não se detém a apenas um número fixo de agrupamentos. Nesta modalidade é possível identificar diferentes níveis de clusters.

O método hierárquico pode ser encontrado como divisivo ou por aglomerativo. A modalidade divisiva, é pouco utilizada na literatura pelo seu baixo índice de eficácia em relação aos algorítimos aglomerativos, além disso, o método divisivo exige maior capacidade computacional (Costa, 1999). Já os métodos aglomerativos são comumente utilizados. Este método inicia-se com cada agrupamento possuindo apenas um único padrão, ou seja, os

elementos começam separados e a cada etapa do processo vão formando grupos maiores, até que, todos os elementos pertençam a um único grande grupo.

A representação do método hierárquico aglomerativo é dada a partir de dendrogramas, que são estruturas em formato de árvore, como mostra a figura 2.11, isso também permite que sejam identificados grupos com densidades diferentes.



*Figura 2.11:* Neste dendrograma é possível identificar a existência de um grande grupo que abrange subgrupos em níveis hierárquicos diferentes. A quantidade de clusters neste caso vai depender da escolha da distância em que será realizado o corte (eixo y). Fonte: (Gil, 2019)

Os grupos e sub-grupos são definidos através de medidas de similaridade e dissimilaridade, que utilizam a distância entre dois pontos para definir quem ficará em cada agrupamento. Existem diversas métricas de distâncias que podem ser aplicadas. Entretanto, a literatura comumente utiliza a distância Euclidiana para análises deste tipo, devido a sua considerável eficiência e facilidades em termos de recursos computacionais (Costa, 1999). Além disso, o método Ward, também utilizado neste trabalho, é compatível apenas com a métrica Euclidiana, portanto esta medida foi empregada a matriz de dados das propriedades físicas da amostra das galáxias dominadas por Starbust estudada neste trabalho e derivadas por Hernán-Caballero A., Hatziminaoglou E. (2011) e Espinoza & Sales (2020 em prelo, ver tabela 2.1).

A distância Euclidiana é definida com a seguinte equação 2.2,

$$dist(E_i, E_j) = \sqrt{\sum_{l=1}^{m} (X_{il} - X_{jl})^2},$$
(2.2)

onde  $X_{il}$  é o valor atribuído a variável  $X_l$  em *i*.  $X_{jl}$  é o valor atribuído variável  $X_l$  em *j* e *m* representa o número de variáveis.

#### 2.4.1.1 Método Ward

Neste trabalho optou-se por utilizar o método hierárquico aglomerativo denominado Ward, cujo estudos foram publicados no ano de 1963 (Ward, 1963). Este método tem como objetivo minimizar a perda de informação (Gil, 2019). Para isso, a cada etapa de análise todas as possibilidades de novos agrupamentos são considerados, e então, o cluster que apresentar a menor perda de informação é selecionado para formar um novo conjunto e assim sucessivamente, até o fim do processo. A função que descreve esse processo é dada por (Ward, 1963)

$$ESS = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - 1/n (\sum_{i=1}^{n} x_i)^2, \qquad (2.3)$$

onde  $x_i$  é o valor da i-ésima observação; n representa cada observação; e representa o cluster. Em resumo, este método calcula pontos, semelhantes a um centróide, minimizando as distâncias entre estes pontos e os demais a sua volta. A cada etapa de aglutinação executada o método respeita a regra de mínima variância interna dos grupos e a máxima variância entre os agrupamentos distintos. Ou seja, no início do processo, o erro é tido como nulo pois cada observação é considerada um agrupamento individual. A parir disso as aglutinações são realizadas sempre que o algorítimo encontrar a mínima variância entre duas observações. Esse processo resulta em clusters mais homogêneos, pois as observações contida em um mesmo agrupamento serão parecidas entre si.

#### 2.4.2 Análise de Componentes Principais

Análise de Componentes Principais (PCA, do inglês "Principal Component Analysis) é uma técnica multivariada descrita por Pearson em 1901 e é utilizada para explicar a estrutura de variância-covariância de um conjunto de variáveis (Richard Arnold Johnson, 2007). Seu objetivo principal é transformar linearmente um conjunto de observações descrito por diversas variáveis quantitativas correlacionadas entre si, em um conjunto reduzido não correlacionado e que contém a maior porcentagem da variância do conjunto original com mínima perda de informações (Kassambara, 2017). Cada PCA é uma combinação linear de todas as variáveis do conjunto original, são independentes e ortogonais entre si. A primeira componente principal contém a maior parte da variância total da amostra. A variância é representada matematicamente da seguinte forma,

$$\sigma^2(X_j) = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_{ij} - \bar{X}_j)^2$$
(2.4)

Onde n representa o número amostral de objetos;  $\bar{X}$  representa a média dos valores das propriedades contidas em X. A primeira componente é gerada através de uma combinação linear de máxima variância dos valores das propriedade contidas na matriz de dados originais. Matematicamente uma componente principal é representada de acordo com a

2.5.

$$Y_j = \sum_{i=1}^j a_{ij} x_i \tag{2.5}$$

Onde j representa a componente principal e  $a_{ij}$  representa o autovetor. Essa componente obedece a restrição que diz que a soma dos quadrados dos coeficientes é igual a um. As demais componentes são geradas aplicando-se o mesmo método repetidas vezes, obedecendo as devidas restrições de ortogonalidade. Além disso, o percentual de variância diminui a cada componente principal gerada.

Na Fig. 2.12, podemos ver que a projeção da dimensão do conjunto original nas PCAs é realizada através da identificação das principais direções de variação dos dados. O Plot 1A, descrito em termos dos eixos x e y, representa a distribuição das variáveis de um conjunto de dados, o eixo PC1, em vermelho, a direção ao longo do qual as observações mostram a maior variância. O eixo PC2 é a segunda direção mais importante e é ortogonal ao eixo PC1. A dimensionalidade dos dados é reduzida e a distribuição da amostra pode ser projetada na primeira componente principal (Plot 1B).

A análise de componentes principais é uma ferramenta estatística que facilita a interpretação de grandes conjuntos de dados. Além disso, a PCA pode ser utilizada de forma complementar a outros métodos, como o Ward por exemplo.



Figura 2.12: O Plot 1A e 1B, demonstram graficamente a projeção da dimensão do conjunto original em PCAs é realizada através da identificação das principais direções de variação dos dados. Fonte: (Kassambara, 2017)

Existem basicamente duas formas de extração das componentes principais de um conjunto de dados, via matriz de Covariância ou via matriz de correlação. No caso da matriz de covariância as componentes principais acabam sendo influenciadas pelas propriedades de maior valor. Neste trabalho utilizamos a extração por matriz de correlação, isso significa que as variáveis de interesse foram anteriormente padronizadas para evitar a discrepância e influência entre diferentes escalas e unidades de medidas.

# 2.5 Caracterização da Amostra das Galáxias Dominadas por Starburst

A amostra de dados é composta por 148 galáxias dominadas por Starbursts. As técnicas de estatística multivaliadas usando algorítmos de clustering e PCA foram aplicadas em 10 propriedades físicas das galáxias dominadas por Starburst conforme tabela 2.1, são elas: (2) indicador de excitação por AGN; (3) indicador de excitação por HII; (4) indicador de excitação por PDR; (5) classe molecular muito pequena  $X_{6-30}$ ; (6) classe molecular pequena  $X_{31\_150}$ ; (7) classe molecular média  $X_{151\_225}$ ; (8) classe molecular grande  $X_{226\_300}$ ; (9) classe molecular muito grande maior\_300; (10) Assinatura do Silicato Ssil; (11) largura equivalente na banda  $6.2\mu m$ .

As cinco classes moleculares, colunas (5), (6), (7), (8) e (9) da tabela 2.1, representam os resultados obtidos através do estudo realizado por Espinoza (em andamento), explicado anteriormente na sessão 2.3. Sendo assim, essas informações representam os percentuais de contribuição de cada classe molecular para o fluxo no infravermelho de cada galáxia da amostra.

Os valores apresentados nas colunas  $r\_AGN$  (2),  $r\_HII$  (3) e  $r\_PDR$  (4) foram retirados do Projeto Spitzer/IRS ATLAS. Essas propriedades foram calculadas a partir de um espectro ideal de AGN, HII e PDR, desta forma, "r" é a contribuição de cada componente espectral para a emissão total observada em cada galáxia. Os objetos de referências utilizados por Hernán-Caballero A., Hatziminaoglou E. (2011), foram para AGN a galáxia 3C273, para PDR foi utilizada a galáxia NGC7023 e para HII a galáxia M17.

A coluna 9, da tabela 2.1, apresenta os valores da largura equivalente da banda de PAH em  $6.2\mu m$  (EW6.2). É encontrada traçando-se uma área retangular correspondente a largura da linha de emissão (ou absorção), ou seja, o fluxo da largura equivalente é diretamente proporcional ao da linha espectral em estudo. Esta propriedade é usada para estabelecer relações entre o fluxo de emissão do gás e as fontes emissoras das galáxias.

A coluna 10, da tabela 2.1, apresenta os valores da propriedade Ssil, abreviatura utilizada para Silicato, um componente químico presente na poeira da galáxia, que pode estar localizado no torus do modelo unificado de AGN ou no meio interestelar. A assinatura de silicato em 10  $\mu m$ , que pode aparecer em emissão ou absorção, fornece informações sobre a geometria da distribuição de poeira ao longo da linha de visão das regiões formadoras de estrelas ou do torus dos AGNS (Hernán-Caballero A., Hatziminaoglou E., 2011).

Essas duas propriedades, EW6.2 e Ssil, foram utilizadas por Hernán-Caballero A., Hatziminaoglou E. (2011) como parâmetro para distinguir as galáxias como AGNs e Starbursts. Surtos de formações estelares tendem a ter valores altos de EW6.2 e valores baixos de Ssil. Entretanto, o contrário acontece em galáxias dominadas por AGN, onde EW6.2 é menos pronunciada e os silicatos, em absorção ou emissão, são mais intensas. Por isso, a intensidade da EW6.2  $\mu$ m é amplamente usada como indicador da presenta de formação estelar em galáxias ou no meio interestelar da nossa galáxia (Sales et al., 2010, 2013; Canelo, 2016).

Galáxias	r_AGN	r_HII	r_PDR	$X_{6-30}$	$X31_{-}150$	$X151_{-}225$	$X226_{-}300$	maior_300	EW 6.2	$\mathbf{Ssil}$
(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(9)	(7)	(8)	(6)	(10)	(11)
3C273	993	2	0	0.05421171	0.085240578	0.081085136	0.073800768	0.051473447	0.001317026	0.936383131
3C31	643	0.08	277	0.26348959	0.067587243	0.056177152	0.020190395	0.019730196	0.006543202	0.833690731
AGN15	343	0.49	168	0.053733743	0.083636663	0.081798322	0.074631854	0.051931851	0.005709579	0.655706457
Arp220	249	484	268	0.221144824	0.072502275	0.061263928	0.021483091	0.020962836	0.011433955	0.303550155
CGCG381-051	235	437	329	0.180612598	0.078804177	0.068007672	0.022829352	0.02224274	0.32175633	1
E12-G21	544	128	328	0.1791541	0.083642691	0.063896211	0.023278781	0.022669153	0.01139696	0.917560162
EIRS-13	266	219	515	0.052611417	0.082620812	0.082509958	0.075466537	0.052545638	1	0.896116274
EIRS-14	233	283	485	0.17288407	0.084449977	0.065528058	0.023499226	0.022878152	0.022641007	0.746485585
EIRS-16	203	291	507	0.152694111	0.091074517	0.06849022	0.024006005	0.023358223	0.023891442	0.993805099
EIRS-2	98	346	556	0.052477204	0.081842594	0.082644065	0.075994112	0.052758528	0.30365339	0.860614725
EIRS-21	646	157	197	0.150567429	0.09196946	0.068734132	0.024077403	0.023425814	0.001048195	0.322134858
EIRS-37	639	131	0.23	0.148857718	0.094670875	0.067199212	0.024284878	0.023622166	0.003995472	0.879675959
EIRS-41	458	306	236	0.051723919	0.079124919	0.08300482	0.077996808	0.053781664	0.006992076	0.98022397
EIRS-55	604	208	188	0.145516558	0.095681769	0.067885781	0.024535627	0.02385935	0.003038532	0.630926853
EIRS-9	212	306	482	0.144837454	0.095917064	0.068018357	0.024573659	0.023895312	0.268360056	0.717655468
GN26	224	159	617	0.051537338	0.078151027	0.082663551	0.079379836	0.053897337	0.017367971	0.790802954
IRAS02021-2103	167	606	226	0.09303122	0.104108092	0.082507672	0.039399397	0.030547501	0.016248252	0.640934
IRAS02480-3745	264	263	472	0.092649614	0.104896326	0.081611295	0.039902895	0.030661675	0.296229705	0.655944722
IRAS03209-0806	261	0.36	379	0.092247702	0.105096638	0.08143172	0.040180258	0.030796152	0.019629605	0.756254467
IRAS04074-2801	387	294	319	0.091213948	0.106114007	0.081215339	0.040418828	0.030923943	0.004318562	0.298308315
IRAS05020-2941	361	242	396	0.091174396	0.10588461	0.081269856	0.040574508	0.030934078	0.007628392	0.421968072
IRAS08474 + 1813	289	291	0.42	0.04634359	0.063940726	0.074201303	0.1044287	0.059869427	0.013853435	0.529664046
IRAS08591 + 5248	265	225	0.51	0.090689371	0.105998587	0.081350255	0.040779037	0.031020098	0.025807788	0.780319276
IRAS10594 + 3818	258	245	497	0.090012978	0.106514468	0.081371656	0.040909236	0.031094279	0.025479765	0.765785085
IRAS12447+3721	301	344	355	0.0898647	0.106442705	0.081311394	0.041127631	0.031133956	0.012469818	0.688348821
Continua na próxima página										

Tabela 2.1 - Amostra de Galáxias Starbursts e suas propriedades físico-químicas

n										
Galáxias	$r_AGN$	r_HII	$r_{-}PDR$	$X_{6_{-}30}$	$X31_{-}150$	$X151_{-}225$	$X226_{-}300$	maior_300	EW 6.2	$\mathbf{Ssil}$
(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(9)	(2)	(8)	(6)	(10)	(11)
IRAS13106-0922	482	57	462	0.087057184	0.10807479	0.082234022	0.041412465	0.031302828	0.002567461	0.461043603
IRAS14121-0126	351	201	448	0.083806429	0.108680737	0.083649419	0.042284996	0.031758005	0.016507218	0.655229926
IRAS14197+0813	0.18	474	346	0.083620603	0.110152284	0.082195057	0.04262932	0.031887148	0.017582542	0.777221825
IRAS14202+2615	525	136	339	0.082921976	0.110632592	0.082082254	0.042990095	0.031942426	0.011330369	0.803192757
IRAS14485-2434	459	248	293	0.082681748	0.110640847	0.081780526	0.043423285	0.032028777	0.008548337	0.683583512
IRAS15043+5754	219	252	529	0.082508072	0.11078124	0.081643831	0.04356351	0.03209052	0.021131606	0.70192995
IRAS21477+0502	221	528	251	0.082320433	0.111132395	0.081230385	0.043840612	0.032128192	0.019429831	0.768406004
IRAS22088-1831	269	468	263	0.081906873	0.110967195	0.081503687	0.044050294	0.032177195	0.005332228	0.367643555
IRAS_00091-0738	246	504	0.25	0.051336798	0.077443644	0.082092619	0.080632643	0.054120786	0.001072858	0.163926614
$IRAS_{00456-2904}$	0.19	281	529	0.13812562	0.095582143	0.071465956	0.025128586	0.024419698	0.025016093	0.743149869
IRAS_00482-2721	315	386	299	0.050967939	0.076245856	0.081499408	0.083040618	0.053989543	0.015742652	0.509888015
IRAS_01166-0844	297	486	217	0.050891095	0.075915042	0.081354723	0.083655635	0.053963819	0.000357619	0.233023588
$IRAS_{01199-2307}$	285	415	0.3	0.136758952	0.096181812	0.071653094	0.025236619	0.024521709	0.00677997	0.411246128
IRAS_01298-0744	409	268	322	0.050839315	0.075154729	0.080900014	0.084802268	0.054128701	0	0
IRAS_01355-1814	0.21	593	197	0.050653776	0.073266655	0.080741138	0.086942974	0.054388915	0.010378361	0.421729807
IRAS_01494-1845	0.23	312	458	0.134360569	0.097803165	0.071614713	0.025349704	0.024628465	0.024873045	0.600905409
$IRAS_{01569-2939}$	319	411	0.27	0.050371315	0.072045321	0.080564926	0.08848859	0.054679044	0.003689646	0.391946629
$IRAS_{02411+0353}$	248	372	0.38	0.133877183	0.095803535	0.070187111	0.03104759	0.02451593	0.021434966	0.777698356
$IRAS_{-03250+1606}$	231	0.32	0.4	0.049997108	0.071561496	0.080154493	0.089530085	0.055009531	0.266066359	0.652370741
$IRAS_{-03521+0028}$	259	388	354	0.132499828	0.094831186	0.071094013	0.031886879	0.024738947	0.014916428	0.667143198
$IRAS_{08201+2801}$	345	311	343	0.132369015	0.095359877	0.070487684	0.032139166	0.024873924	0.006303967	0.437455325
$IRAS_{-09039+0503}$	336	294	371	0.132064138	0.094682458	0.070815918	0.032598879	0.025021074	0.01593256	0.488682392
$IRAS_{-09116+0334}$	0.2	271	529	0.131164486	0.092747028	0.072445811	0.033154802	0.025249768	0.024806454	0.736954968
IRAS_09463+8141	315	305	0.38	0.130990851	0.092515068	0.072496608	0.033392604	0.025385456	0.021375774	0.471289016
$IRAS_{09539+0857}$	299	397	304	0.130901699	0.092335102	0.072571217	0.033551423	0.025400458	0.00854587	0.238027162
$IRAS_{-10035+2740}$	149	478	373	0.049959426	0.071130101	0.079645805	0.090683085	0.054964099	0.577910467	0.519895163
IRAS_10190+1322	204	237	559	0.049914735	0.070310722	0.078905276	0.092303856	0.055137041	0.253808646	0.733142721

Continua na próxima página...

Galáxias	$r_AGN$	r_HII	r_PDR	$X_{6_{-}30}$	$X31_{-}150$	$X151_{-}225$	$X226_{-}300$	maior_300	EW 6.2	$\mathbf{Ssil}$
(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(9)	(2)	(8)	(6)	(10)	(11)
IRAS_10485-1447	274	535	0.19	0.130641013	0.092003556	0.072852231	0.033725738	0.025446574	0.00877524	0.289969025
IRAS_10494+4424	272	205	523	0.04990539	0.070101608	0.078559471	0.092817438	0.055244011	0.024448835	0.629973791
$IRAS_{11028+3130}$	319	361	0.32	0.049877989	0.069669957	0.078609358	0.093034053	0.055464312	0.01306174	0.477245652
IRAS_11095-0238	358	429	213	0.129627775	0.091968251	0.073356933	0.033860697	0.025522714	0.001492136	0.118179652
$IRAS_{11130-2659}$	349	371	279	0.049753959	0.069476581	0.078569238	0.093462657	0.055466991	0.005855093	0.304264951
$IRAS_{11180+1623}$	325	268	407	0.129287652	0.091983448	0.073501643	0.033910719	0.025546169	0.006521005	0.525137003
IRAS_11387+4116	199	322	479	0.049587108	0.069142342	0.078159693	0.094502836	0.055498016	0.023689202	0.739099357
IRAS_11506+1331	392	321	287	0.04941529	0.068515093	0.078250981	0.094835433	0.055924922	0.012348967	0.435787467
IRAS_11582+3020	382	297	321	0.128633321	0.091755176	0.07382345	0.03419408	0.025648238	0.002814095	0.385036931
IRAS_12032+1707	341	399	0.26	0.12416191	0.093848916	0.074385936	0.034667619	0.025827255	0.00148967	0.335001191
IRAS_12112+0305	274	323	403	0.123833647	0.09398005	0.07441257	0.034747791	0.025843042	0.019030284	0.594710508
IRAS_12359-0725	307	526	168	0.12379641	0.09380482	0.074431149	0.034923097	0.025857899	0.011330369	0.474148201
IRAS_13335-2612	219	288	493	0.049359313	0.068300032	0.078209564	0.09493773	0.056143522	0.261330985	0.699547296
$IRAS_{-13469+5833}$	322	332	346	0.122839782	0.092482269	0.07577501	0.035327289	0.026021403	0.015237052	0.56802478
$IRAS_{-13509+0442}$	251	291	458	0.122757685	0.091680211	0.076105358	0.035794487	0.026060248	0.031122752	0.642601858
$IRAS_{-13539+2920}$	243	235	522	0.049235555	0.067949562	0.075999129	0.096415043	0.057456822	0.02526766	0.661186562
$IRAS_{-14060+2919}$	165	337	499	0.12235407	0.091829168	0.076144568	0.035896764	0.02607771	0.317810185	0.764832023
IRAS_14252-1550	275	334	0.39	0.121748646	0.091981019	0.076217958	0.036113064	0.026092764	0.020167267	0.692875864
IRAS_14348-1447	0.39	264	346	0.118699851	0.092558168	0.07733879	0.036513258	0.026285281	0.011574537	0.49868954
$IRAS_{-15206+3342}$	315	445	239	0.049161798	0.067441304	0.076134615	0.096821169	0.057582478	0.015054543	0.813914701
$IRAS_{-15225}+2350$	368	413	219	0.048386162	0.067082451	0.075906176	0.098234238	0.057821129	0.005075729	0.460090541
$IRAS_{-16090-0139}$	0.48	0.23	291	0.048273897	0.067009733	0.075237703	0.098767816	0.058210208	0.002981806	0.42887777
$IRAS_{-16300+1558}$	384	347	269	0.117506817	0.092521551	0.077963745	0.036733531	0.026370419	0.006185582	0.356683345
$IRAS_{-16333} + 4630$	314	276	0.41	0.115398298	0.093269502	0.078535203	0.036978799	0.026465778	0.018514819	0.655468192
$IRAS_{-16468} + 5200$	348	403	249	0.048226921	0.066260765	0.074868447	0.100151206	0.058281704	0.004404884	0.437455325
$IRAS_{-16474+3430}$	244	289	467	0.047827416	0.066268838	0.074823719	0.100515038	0.058435766	0.248727985	0.669049321
$IRAS_{-16487+5447}$	252	394	354	0.113830281	0.09399537	0.078711948	0.037269484	0.026571245	0.017301379	0.590898261

'n										
Galáxias	r_AGN	r_HII	r_PDR	$X_{6_{-}30}$	$X31_{-}150$	$X151_{-}225$	$X226_{-}300$	maior_300	EW 6.2	Ssil
(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(9)	(2)	(8)	(6)	(10)	(11)
IRAS_17028+5817	214	272	513	0.113822754	0.093090921	0.077931984	0.037212645	0.029232814	0.253611339	0.644746247
IRAS_17068+4027	357	349	294	0.11237073	0.093951765	0.077849223	0.03749451	0.029432264	0.006225044	0.564212533
IRAS_20414-1651	233	0.35	417	0.111507406	0.094808314	0.077462037	0.037718659	0.029540659	0.023210732	0.552299261
IRAS_21208-0519	207	325	468	0.09852252	0.101106532	0.081053768	0.03874916	0.030186917	0.313247455	0.705503931
IRAS_21329-2346	336	269	395	0.097349861	0.101877452	0.081142884	0.038946893	0.030302835	0.009677921	0.443888492
IRAS_22206-2715	262	333	405	0.046912053	0.064681933	0.075330315	0.102490582	0.058952866	0.275167156	0.609959495
IRAS_22491-1808	179	469	352	0.046442454	0.064354257	0.075158375	0.103276843	0.059315665	0.01963947	0.654753395
$IRAS_{-23129+2548}$	357	301	342	0.04642908	0.064182897	0.075016851	0.103323694	0.059593746	0.003001537	0.355253753
$IRAS_{-23234+0946}$	0.27	441	289	0.095288817	0.102908217	0.081776137	0.039176803	0.030430841	0.018169531	0.528472719
M-2-33-34	0.35	411	239	0.081580351	0.110519419	0.081719015	0.044388904	0.032290376	0.006279303	0.85513462
M-2-40-4	705	131	164	0.081502073	0.110405741	0.081586869	0.044611036	0.032361274	0.003914083	0.900881582
M-5-13-17	466	297	237	0.045869221	0.063034614	0.072774196	0.106058675	0.06139322	0.006587596	0.885156064
MIPS15928	268	602	131	0.045789377	0.062225775	0.071729454	0.108010203	0.061881904	0.009722315	0.958065285
MIPS8342	318	535	147	0.078575	0.103384113	0.083525647	0.049024283	0.034468099	0.009894959	0.945198952
MIPS8521	657	161	182	0.045391556	0.05908359	0.070038579	0.113285693	0.063418259	0.000115918	0.468906362
Mrk1066	275	434	291	0.078006002	0.100924572	0.084443701	0.050077957	0.035091653	0.010666923	0.80247796
Mrk273	408	372	0.22	0.077704515	0.100899448	0.084122681	0.050354281	0.035459979	0.007527272	0.48772933
Mrk334	373	301	326	0.045384663	0.059082329	0.06955934	0.113705118	0.063607754	0.013446489	0.890636169
Mrk471	306	267	427	0.045247532	0.058209973	0.069502809	0.114500715	0.064149685	0.01316286	0.904217298
Mrk52	82	0.6	318	0.077211476	0.099292561	0.084843913	0.051152958	0.035755174	0.254326578	0.913986181
Mrk609	259	271	0.47	0.076283408	0.099240174	0.085390435	0.05144891	0.035907908	0.019269519	0.900166786
Mrk622	0.18	621	199	0.075995049	0.097221408	0.086066348	0.052428684	0.036213883	0.015135932	0.918036693
Mrk883	304	449	247	0.075695944	0.097246334	0.085880991	0.052772782	0.036296616	0.0163913	0.875863712
Mrk938	272	0.23	498	0.075610915	0.096948177	0.085385205	0.053259367	0.036590227	0.019030284	0.654991661
NGC1056	215	122	662	0.044935552	0.056636523	0.067568997	0.114623994	0.067901465	0.030012899	0.893257088
NGC1097	0.31	117	572	0.075008066	0.096658686	0.084932659	0.053881524	0.037239439	0.018867506	0.911841792
NGC1125	326	371	303	0.074743776	0.096634852	0.084576915	0.054285606	0.037431284	0.015286379	0.687157493

Continua na próxima página...

				110.00	CAT TOLE		1000 0001			:
Galaxias	r_AGN	r_HII	r_PDK	$X 6_{-30}$	$X31_{-150}$	67.77161 Y	X 226-300	malor_300	EW 6.2	SSI
(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(9)	(2)	(8)	(6)	(10)	(11)
NGC1222	0.08	484	436	0.074734007	0.095917397	0.083836001	0.05468139	0.038374317	0.281826276	0.852751966
NGC1365	416	411	173	0.074652992	0.095318059	0.08382442	0.055054506	0.038579747	0.005729309	0.938289254
NGC1566	475	103	422	0.074522726	0.094661904	0.083461141	0.055803245	0.038806605	0.011744714	0.891827496
NGC2146	86	258	656	0.044525357	0.055687274	0.065159976	0.116948923	0.070171096	0.304294639	0.73266619
NGC2273	406	364	0.23	0.074458935	0.094344011	0.083315113	0.055868596	0.039229364	0.006417418	0.86347391
NGC2623	181	376	442	0.074199661	0.094083183	0.083293555	0.05619503	0.0393852	0.020381839	0.572551823
NGC2639	0.58	56	365	0.044517387	0.054895457	0.064002436	0.117197772	0.072049057	0.01194942	0.84107696
NGC2992	485	305	0.21	0.04445823	0.052486596	0.063532638	0.117230221	0.07517756	0.008568067	0.862520848
NGC3031	784	0	216	0.044286948	0.052234707	0.062888957	0.117864342	0.075878734	0.002232038	0.921610674
NGC3227	542	287	172	0.074176916	0.093861154	0.082783035	0.056556103	0.039698751	0.006797235	0.862759114
NGC3256	102	484	414	0.07404008	0.092247301	0.08275509	0.057323063	0.04044711	0.025393443	0.848701453
NGC3511	144	155	701	0.044277266	0.051274406	0.062717068	0.117893021	0.077106341	0.324222671	0.870621873
NGC3556	136	257	607	0.073936608	0.088716035	0.084007048	0.058379244	0.04136635	0.023383375	0.827734096
NGC3628	144	0.2	656	0.073787555	0.088391205	0.083771072	0.058620779	0.041769025	0.251884901	0.548010484
NGC3786	494	218	288	0.073767726	0.087220161	0.083359145	0.059578628	0.04219587	0.008284438	0.892304027
NGC3982	238	194	568	0.044216462	0.050568666	0.062093828	0.116867112	0.079365959	0.019886104	0.893971885
NGC4088	0.13	331	539	0.073679606	0.086446199	0.083381003	0.059778511	0.042749017	0.025055554	0.826304503
NGC4388	481	322	196	0.044174695	0.049950502	0.06152076	0.11722474	0.080482087	0.005919217	0.743864665
NGC4501	672	19	309	0.043778942	0.049954613	0.060090061	0.11858071	0.08153586	0.002831359	0.823207053
NGC4579	814	0	186	0.073509466	0.085266795	0.083559395	0.060567179	0.042982449	0.006449481	0.976173457
NGC4594	709	0	291	0.043701066	0.04876468	0.059962059	0.120045085	0.082057495	0.002532932	0.952108649
NGC4676	125	0.24	635	0.073441769	0.084689707	0.083417002	0.060865586	0.04338933	0.267052896	0.763878961
NGC4945	162	0.24	598	0.073183238	0.084570257	0.083178663	0.061209353	0.043610102	0.017755186	0.137240886
NGC5033	339	0.1	562	0.073079083	0.084652912	0.082795824	0.061356795	0.043834682	0.018650468	0.867286157
NGC5135	265	258	477	0.07251585	0.084382198	0.083003561	0.061666005	0.044121512	0.017683662	0.809625923
NGC5194	284	129	588	0.04368258	0.04813517	0.059203745	0.121909605	0.082329429	0.019489024	0.910650465
NGC5929	202	395	403	0.043671475	0.047318339	0.058918917	0.122557454	0.083132961	0.001092589	0.840838694
Continua na próxima página										

Tabela 2.1 - Continuação										
Galáxias	$r_AGN$	r_HII	r_PDR	$X_{6_{-}30}$	$X31_{-}150$	$X151_{-}225$	$X226_{-}300$	maior_300	EW 6.2	Ssil
(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(9)	(2)	(8)	(6)	(10)	(11)
NGC5953	19	425	556	0.043387877	0.045492549	0.057150127	0.125703904	0.085360029	0.022530022	0.86347391
NGC6810	257	285	458	0.06375215	0.087752828	0.085967984	0.06368617	0.045213508	0.020658069	0.866809626
NGC6890	458	257	285	0.043333852	0.043350758	0.055854393	0.135293631	0.082944291	0.008612461	0.907314749
NGC7130	268	464	267	0.043333852	0.041387005	0.052760039	0.153754168	0.077974417	0.013643796	0.812246843
NGC7252	88	233	678	0.059930203	0.088900992	0.087231478	0.064554421	0.046162854	0.264734535	0.898975459
NGC7469	399	308	292	0.059255167	0.08882308	0.087365146	0.064764365	0.046595536	0.013920026	0.884203002
NGC7496	237	475	288	0.0590097	0.088544199	0.087213575	0.064716591	0.047261766	0.017404966	0.881105552
NGC7582	408	187	405	0.058748727	0.088567	0.087208591	0.064923661	0.047306036	0.012422958	0.71336669
NGC7603	842	0	158	0.057705881	0.0891349	0.087223084	0.065328469	0.047475617	0.00315445	0.974505599
NGC7714	103	538	359	0.057321585	0.088969446	0.08715788	0.065744988	0.047648707	0.283281417	0.94424589
SST172458.3 + 591545	685	0.1	215	0.055792486	0.086382768	0.085598086	0.069161579	0.04938098	0.005125056	0.616630927
SWIRE4_J105840.62+582124.7	133	326	0.54	0.055414441	0.085489988	0.083490485	0.071427083	0.050174595	0.023205799	0.886585656
SWIRE4_J105943.83+572524.9	385	321	295	0.055045171	0.085342295	0.083365443	0.071712171	0.050511807	0.009307969	0.449130331
UGC12138	531	315	154	0.054953175	0.085352545	0.082932054	0.072061693	0.050642529	0.005334695	0.897545866
UGC5101	417	258	325	0.054599423	0.085078055	0.081661355	0.07321955	0.051257536	0.009369628	0.539909459

Continuaçê
1
2.1
Tabela

Capítulo 3

# Resultados e Discussões

Este capítulo apresenta os resultados derivados para as propriedades físicas e químicas das moléculas de PAHs e silicatos, assim como as fontes de ionização, de uma amostra composta por 148 galáxias dominadas por Starburts utilizando análise de agrupamento e componentes principais.

# 3.1 Análise de Componentes Principais das Galáxias Starburst

A primeira etapa da análise apresentada neste trabalho, foi derivar as componentes principais de uma matriz de dados contendo as propriedades como fonte de ionização, tamanho das moléculas de PAHs e emissão de silicatos das 148 galáxias dominadas por Starburst para explicar a variância e covariância da amostra e agrupar os indivíduos pelas similaridades, assim será possível inferir de forma robusta o agrupamento das galáxias segundo suas características.

Os resultados das PCAs para nossa amostra podem ser visto na Figura 3.1. Com a análise mostrada nessa figura é possível verificar que as porcentagem de variância da amostra total de observações foram compreendidas pelas 5 primeiras componentes principais, onde essas componentes explicaram a maior variabilidade dos dados originais contabilizando cerca de  $\sim 90\%$  da variância total. Neste momento nos concentraremos na análise das duas primeiras componentes principais. Os resultados para as demais componentes podem ser encontrados no Apêndice A.

Além disso, os resultados vistos na Figura 3.1 mostram que  $\sim 57\%$  da variância total está compreendido nas duas primeiras componentes principais (Dim 1 e 2). As componentes 3, 4 e 5 ainda apresentam porcentagens significativas, onde contribuem com 14,5% (Dim



Figura 3.1: Contribuição de cada componente principal para a variância total da amostra, em ordem decrescente. As 2 primeiras componentes compreendem  $\sim 57\%$  da variância total das observações.

3), 12,8% (Dim 4) e 8,1% (Dim 5), da variância total respectivamente. A componente principal 6 compreende 6,6% (Dim 6) da variância total e as demais componentes (Dim 7, 8 e 9) são responsáveis por menos de 1,5% da variância total das observações.

Portanto, é possível concluir através de análise de componentes principais que as 10 propriedades físicas e químicas das 148 galáxias dominadas por Starburst, podem ser explicadas principalmente pelas duas primeiras componentes principais ( $\sim 57\%$ ) e considerando as 5 primeiras componentes foi alcançado  $\sim 90\%$  da variância total da amostra. Neste sentido, com intuito de compreender a importância de cada propriedade em relação as duas primeiras componentes principais foi calculado a correlação de Pearson das variáveis para com as componentes. Os valores das cargas obtidas estão relacionados na tabela 3.1, que indicam intensidade e direção de correlação.

As Figuras 3.2 e 3.3 mostram as distribuições das correlações das 10 propriedades físicas da amostra de galáxias estudada para as duas primeira componentes principais. Cada vetor no diagrama de correspondência das componentes principais 1 e 2 (Figura 3.2) representa as propriedades físicas e químicas das galáxias, onde suas imagens ao longo das dimensões representam suas intensidades de contribuição para aquela componente principal. Além disso, nesse diagrama propriedades similares estão próximas e podem ser identificadas devido ao pequeno ângulos entre si, entretanto, é importante ressaltar que variáveis positivamente correlacionadas possuem valores similares de imagens ao longo dos eixos das dimensões e variáveis negativamente correlacionadas possuem valores opostos de imagens.

Propriedades	Correlação Dim 1	Correlação Dim 2
r_AGN	0.12455104	-0.90556633
r_HII	-0.25104462	0.38303410
r_PDR	0.09610823	0.70950454
X0_30	-0.75089634	-0.19883981
X31_150	-0.90451561	0.05576727
X151_225	-0.41642895	0.28406241
X226_300	0.97794839	0.04609721
maior_300	0.98453622	0.03428812
EW6.2	0.08848671	0.65109589
Ssil	0.27970242	0.08485028

Tabela 3.1 - Correlação das variáveis com as dimensões 1 e 2.

Da Figura 3.2 podemos inferir que a componente principal 1, com 36,5% da variabilidade total da amostra, engloba na sua maioria o tamanho das moléculas de PAHs alcançando um valor de contribuição de ~95% do total da variabilidade da dimensão 1 (ver Figura 3.3). Entretanto, as classes de moléculas de PAHs grandes ( $X226_{-}300$ ) e muito grandes (*maior\_300*) possuem correlações opostas às moléculas de PAHs pequenas ( $X31_{-}150$ ) e muito pequenas ( $X6_{-}30$ ). Nessa componente principal as fontes de ionização e assinatura de silicatos contribuem com menos de 5% da variabilidade.

Nas Figuras 3.2 e 3.3 também é possível inferir que a componente principal 2, que contribui com 20,3% da variância total da amostra, compreende a variância das propriedades das fontes de ionização, sendo r\_AGN e r\_PDR contribuindo com  $\sim 40\%$  e 25% da variância da dimensão 2, respectivamente. Além disso, a Figura 3.2 mostra que fonte de ionização r\_AGN está negativamente correlacionada com a fonte de ionização por estrelas, r\_PDR e r\_HII.



Figura 3.2: Diagrama da correlação das componentes principais 1 (Dim. 1) versus 2 (Dim. 2) para a amostra total de galáxias dominadas por Starburst. As correlações de cada propriedade estudada das galáxias estão mostradas pelos seus respectivos vetores e barra de cores mostra a intensidade de correlação. Dimensão 1 e 2 contém  $\sim 57\%$  do total de informações contidas nos dados da amostra.


*Figura 3.3*: Histogramas das distribuições das variâncias das propriedades das galáxias Starburst contidas nas componentes principais 1 (no topo, Dimensão 1) e 2 (na base, Dimensão 2).

Os resultados derivados da análise de componentes principais mostram que a primeira dimensão possui valores maiores de correlação de Pearson relacionados as propriedades das classes moleculares e a segunda dimensão possui valores maiores de correlação de Pearson relacionadas as propriedades das fontes de ionização. Os valores de correlação entre variáveis não foi calculado neste trabalho mas, através da Fig. 3.2 é possível observar um indicativo de que a fonte de ionização de AGN (r\_AGN) tem maior correlação com moléculas de PAHs grandes e muito grandes, enquanto, as fontes de ionização por estrelas (r\_PDR e r\_HII) estão mais correlacionadas com as moléculas pequenas, muito pequenas e médias. Isto porque o ângulo da fonte de ionização AGN é menor em relação aos vetores relacionados as moléculas maiores e o ângulo entre a fonte de ionização HII é menor em relação aos vetores das moléculas pequenas. Porém, para comprovar esses indicativos é necessário realizar a análise de correlação entre variáveis.

Portanto, é importante ressaltar que mesmo utilizando técnicas mais robustas para derivar o tamanho das moléculas, propostas por Espinoza & Sales (2020, em prelo), e uma análise estatística multivariada derivamos resultados que corroboram com os encontrados por Sales et al. (2010, 2013). Assim, o estudo realizado aqui se mostra muito robusto e suportado por resultados anteriores utilizando diferentes técnicas e modelagens.

Os diagramas de correlações e histogramas para as contribuições das 10 propriedades das galáxias dominadas por Starburst para as componentes principais 3, 4 e 5 podem ser consultadas no Apêndice A. É possível inferir através desses histogramas que a dimensão 3 é dominada pelas propriedades de fontes de ionização estelar e a dimensão 4 é dominada por moléculas médias. A contribuição da assinatura de silicato nessa análise foi pouco significativa, onde possui correlação maior com a dimensão 5 com cerca de 60% da variabilidade nessa dimensão. Assim podemos concluir que a maior variabilidade da amostra foram obtidas pelas moléculas de PAHs e a fonte de ionização estelar ou AGNs.

### 3.2 Análise de Agrupamento utilizando Método Ward

A ideia central da análise de agrupamento é a possibilidade de efetuar a classificação dos objetos em grupos, de forma que os objetos dentro do mesmo grupo sejam mais similares quanto possível e, de forma análoga, que os diversos grupos sejam mais diferentes o possível em sua constituição. Embora possa parecer semelhante a análise de componentes principais, a diferença está no fato de que a análise fatorial junta variáveis e efetua os agrupamentos considerando correlação dos dados, enquanto a análise de agrupamentos objetiva agregar objetos (e não variáveis), fazendo a agregação baseada na distância.

Nesta seção utilizamos técnicas estatística de agrupamento não supervisionado para encontrar grupos cuja características físicas e químicas das galáxias são semelhantes com o objetivo de derivar a influência e contribuição das fontes de ionização para a evolução do material orgânico das galáxias.

Portanto, nesta segunda etapa, foi realizado a análise de agrupamento, através do método estatístico multivariado de agrupamento hierárquico Ward com distância euclidiana, para a amostra composta por 148 galáxias dominadas por Starburst. Por meio dessa metodologia foi possível derivar dois grupos mutuamente exclusivo cuja distancia inferida foi 10.

A visualização dos grupos determinado pelo método Ward pode ser visto no dendrograma apresentado na Figura 3.4. O grupo 1 delimitado pela região em verde possui 109 galáxias, enquanto o grupo 2 (em vermelho) possui 39 galáxias. A tabela 3.2 mostra o nome das galáxias pertencentes a cada grupo e cujas discussões individuais foram realizadas na sessão 3.2.1.

Grupo 1	Grupo 2
(1)	(2)
3C273	Arp220
3C31	IRAS04074-2801
AGN15	IRAS05020-2941
CGCG381-051	IRAS13106-0922
E12-G21	IRAS22088-1831
EIRS-13	IRAS_00091-0738
EIRS-14	IRAS_00482-2721
EIRS-16	IRAS_01166-0844
EIRS-2	IRAS_01199-2307
EIRS-21	IRAS_01298-0744
EIRS-37	IRAS_01355-1814

Tabela 3.2 - Galáxias pertencentes aos grupos 1 e 2

-

EIRS-41	IRAS_01569-2939
EIRS-55	IRAS_08201+2801
EIRS-9	IRAS_09039+0503
GN26	IRAS_09463+8141
IRAS02021-2103	IRAS_09539+0857
IRAS02480-3745	IRAS_10485-1447
IRAS03209-0806	IRAS_11028+3130
IRAS08474+1813	IRAS_11095-0238
IRAS08591+5248	IRAS_11130-2659
IRAS10594+3818	IRAS_11180+1623
IRAS12447+3721	IRAS_11506+1331
IRAS14121-0126	IRAS_11582+3020
IRAS14197+0813	IRAS_12032+1707
IRAS14202+2615	IRAS_12359-0725
IRAS14485-2434	IRAS_13469+5833
IRAS15043+5754	IRAS_14348-1447
IRAS21477+0502	IRAS_15225+2350
IRAS_00456-2904	IRAS_16090-0139
IRAS_01494-1845	IRAS_16300+1558
IRAS_02411+0353	IRAS_16468+5200
IRAS_03250+1606	IRAS_17068+4027
IRAS_03521+0028	IRAS_21329-2346
IRAS_09116+0334	IRAS_23129+2548
IRAS_10035+2740	IRAS_23234+0946
IRAS_10190+1322	Mrk273
IRAS_10494+4424	NGC4945
IRAS_11387+4116	SWIRE4_J105943.83+572524.9
IRAS_12112+0305	UGC5101
IRAS_13335-2612	
IRAS_13509+0442	

IRAS_13539+2920
IRAS_14060+2919
IRAS_14252-1550
IRAS_15206+3342
IRAS_16333+4630
IRAS_16474+3430
IRAS_16487+5447
IRAS_17028+5817
IRAS_20414-1651
IRAS_21208-0519
IRAS_22206-2715
IRAS_22491-1808
M-2-33-34
M-2-40-4
M-5-13-17
MIPS15928
MIPS8342
MIPS8521
Mrk1066
Mrk334
Mrk471
Mrk52
Mrk609
Mrk622
Mrk883
Mrk938
NGC1056
NGC1056 NGC1097
NGC1056 NGC1097 NGC1125

NGC1365
NGC1566
NGC2146
NGC2273
NGC2623
NGC2639
NGC2992
NGC3031
NGC3227
NGC3256
NGC3511
NGC3556
NGC3628
NGC3786
NGC3982
NGC4088
NGC4388
NGC4501
NGC4579
NGC4594
NGC4676
NGC5033
NGC5135
NGC5194
NGC5929
NGC5953
NGC6810
NGC6890
NGC7130
NGC7252

NGC7469
NGC7496
NGC7582
NGC7603
NGC7714
SST172458.3+591545
SWIRE4_J105840.62+582124.7
UGC12138

#### 3.2.1 Análise de Componentes Principais dos Grupos

Uma vez determinado os grupos, utilizando clusterização hierárquica com o método Ward, foi realizado análise de componentes principais das 10 propriedades físicas e químicas das galáxias dos dois grupos, sendo o grupo 1 composto por 109 galáxias e o grupo 2 por 39 galáxias. Como já descrito anteriormente os dados analisados são: tamanhos das moléculas de PAHs, fontes de ionização (r\_PDR, r\_HII e r\_AGN), largura equivalente de banda de PAH em  $6,2\mu$ m e emissão de silicato.

**Grupo 1**: galáxias que pertencem ao agrupamento delimitado pela região em verde da Figura 3.4. Os resultados das PCAs para esse grupo podem ser visto na Figura 3.5. A partir desta análise é possível verificar que as porcentagem de variância da amostra total de observações foram compreendidas pelas 5 primeiras componentes principais, que explicaram a maior variabilidade dos dados originais contabilizando cerca de ~ 92% da variância total. Sendo a componente principal 1 englobando a maior porcentagem da variância com valor de 37,4% e a componente principal 2 compreende cerca de 21% da variância total, onde as mesmas totalizam ~ 59% da variância da amostra.

Além disso, a Figura 3.5 mostra que as componentes 3, 4, e 5 apresentam porcentagens significativas, compreendendo 13,7%, 10,4% e 8,9% respectivamente. A componente principal 6 compreende 7,1% da variância total e as demais componentes (7, 8 e 9) são responsáveis por 1,1% da variância total das observações. Aqui nos deteremos aos detalhes da análise das duas primeiras componentes, os resultados para as demais componentes do



*Figura 3.4:* Resultado do agrupamento para o corte realizado na altura 10 de acordo com o método de determinação do melhor número de grupos. Em verde o grupo 1 e em vermelho o grupo 2.

Objetos



Figura 3.5: Contribuição de cada componente principal para a variância total do grupo 1. As 2 primeiras componentes compreendem  $\sim 59\%$  da variância total das observações.



Figura 3.6: Diagrama da análise de correspondência das componentes principais 1 (Dim. 1) versus 2 (Dim. 2) para as galáxias do grupo 1. As correlações de cada propriedade estudada das galáxias estão mostradas pelos seus respectivos vetores e barra de cores mostra a intensidade de correlação. Dimensão 1 e 2 contém  $\sim$ 59% do total de informações contidas nos dados da amostra.

grupo 1 podem ser consultados no capítulo A.

1

As Figuras 3.6 e 3.7 mostram um diagrama de correlação entre as componentes principais 1 (Dim1) e 2 (Dim2) e suas respectivas contribuições para cada uma das 10 propriedades físicas e químicas estudadas nas galáxias do grupo 1. É possível ver nessas figuras que o grupo 1 possui comportamento similar ao encontrado para a amostra total, onde a dimensão 1 engloba a contribuição do tamanho das moléculas de PAHs e a dimensão 2 centralizou a contribuição da fonte de ionização, sendo as moléculas grandes e muito grandes negativamente correlacionadas com as moléculas pequenas e muito pequenas. O mesmo aconteceu com a fonte de ionização não-térmica de AGNs (r\_AGN) sendo negativamente correlacionada com as fonte térmicas r\_PDR e r\_HII.

Além disso, a análise de componentes principais do grupo 1 mostrou que a emissão de silicato contribui com mais de 80% da variabilidade da componente 5 (ver capítulo A). O resultado similar do grupo 1 comparado com a amostra total pode ser devido a este grupo representar a maior fração do número de galáxia da amostra total, pois o grupo 1 contém 74% do total de todas as galáxias Starburst. Na tabela 3.1 é possível identificar que os valores de correlação de Pearson demonstram maior intensidade para a fonte de ionização por AGN (r\_AGN) do que para as fontes r\_HII e r\_PDR. O mesmo acontece para as classes moleculares onde as classes de moléculas grandes e muito grandes possuem valores maiores de correlação de Pearson nas duas primeiras comentes comparadas a classe de moléculas muito pequenas. Estes resultados podem ser mais um indicativo de que as moléculas maiores estão mais correlacionadas com fontes de ionização por estrelas.

Propriedades	Contribuição Dim.1	Contribuição Dim.2
r_AGN	-0.178193081	-0.92438304
r_HII	0.257288602	0.48912098
r_PDR	-0.017014507	0.71379561
X0_30	0.702864269	-0.25205816
X31_150	0.928089796	-0.04062440
X151_225	0.553611751	0.19141836

Tabela 3.3 - Contribuição das variáveis para as dimensões 1 e 2

X226_300	-0.974144216	0.13053539
maior_300	-0.982338036	0.09802436
EW6.2	0.003067056	0.61439350
Ssil	-0.252611110	-0.20602517

**Grupo 2:** formado pelas galáxias contidas na região vermelha mostrado na Figura 3.4 e possui 39 galáxias Starburst, cerca de  $\sim 26\%$  da amostra total de galáxias. Os resultados das PCAs para o grupo 2 podem ser visto na Figura 3.8. A partir desta análise é possível verificar que as porcentagem de variância da amostra total de observações foram compreendidas pelas 5 primeiras componentes principais, onde essas componentes explicaram a maior variabilidade dos dados originais contabilizando cerca de  $\sim 97\%$  da variância total.

A componente principal 1 do grupo 2 contabilizou o maior valor de variância com cerca de  $\sim 38\%$  e a componente principal 2 compreende cerca de  $\sim 22\%$  da variância total, assim essas duas componentes totalizam  $\sim 61\%$  da variância total do grupo 2. Além disso, a Figura 3.8 mostra que as componentes 3, 4, e 5 apresentam porcentagens de aproximadamente 14\%, 11\% e 10\% respectivamente. A componente principal 6, 7, 8, 9 e 10 compreende  $\sim 3\%$  da variância total do grupo 2.

As Figuras 3.9 e 3.10 ilustram o diagrama de correlação entre as componentes principais 1 (Dim1) e 2 (Dim2) e suas respectivas contribuições para cada uma das 10 propriedades físicas e químicas estudadas nas galáxias do grupo 2. Diferentemente do que foi identificado no grupo 1, o grupo 2 demonstra um comportamento diferente ao encontrado na amostra total relativo a fonte de ionização (ver Figura 3.9), pois a componente principal 2 possui maior contribuição da emissão estelar r\_HII (~ 40%), enquanto as emissão r\_PDR e r\_AGN além de serem correlacionadas elas possuem valores contribuições aproximados, ~ 22% e ~ 17% respectivamente.

Também é possível ver nessas figuras que o grupo 2 possui comportamento similar, ao encontrado para a amostra total, com relação ao tamanho das moléculas de PAHs onde moléculas grandes e muito grandes são negativamente correlacionadas com moléculas pequenas e muito pequenas. Na tabela 3.4 estão os valores de correlação de Pearson das variáveis com as duas primeiras componentes principais. A partir destes valores é possível



Figura 3.7: Histograma das distribuições das variâncias das propriedades das galáxias Starburst contidas na componente principal 1 (no topo, Dimensão 1) e 2 (na base, Dimensão 2).



*Figura 3.8:* Contribuição de cada componente principal para a variância total do grupo 2. As 2 primeiras componentes compreendem ~ 61% da variância total das observações.



Figura 3.9: Diagrama da análise de correspondência das componentes principais 1 (Dim. 1) versus 2 (Dim. 2) para as galáxias do grupo 2. As correlações de cada propriedade estudada das galáxias estão mostradas pelos seus respectivos vetores e barra de cores mostra a intensidade de correlação. Dimensão 1 e 2 contém ~61% do total de informações contidas nos dados da amostra.

inferir que para o Grupo 2 os valores de correlação das fontes de ionização pore estrelas são maiores do que para as fontes de ionização por AGN, diferentemente do que ocorreu no Grupo 1, além disso, apesar dos valores de correlação das classes de moléculas grandes e muito grandes ainda serem bastante intensos é possível perceber que os valores para a classe de moléculas muito pequenas aumentou significativamente em relação ao grupo 1. Este resultado pode estar atrelado a correlação entre fontes de ionização por estrelas e as classes de moléculas muito pequenas, o que nos remete novamente a necessidade de realizar a análise de correlação entre propriedades para confirmar essas informações.

Além disso, no grupo 2 a EW do PAH em  $6.2\mu$ m e o silicato mostraram significativa contribuição para as dimensões 3 e 4, com ~53% e ~50% da variância total do grupo, respectivamente (ver capítulo A). Portanto, esses resultados mostram que a estatística multivariada além de ser robusta para estudar astroquímica ela também sugere que em ambiente estelar a contribuição das moléculas pequenas são mais significativas. As distribuições das contribuições das 10 propriedades físicas das galáxias do grupo 2 contidas nas 5 primeiras componentes principais são mostradas nos diagramas do Apêndice A.

Propriedades	Contribuição Dim.1	Contribuição Dim.2
r_AGN	0.16337283	0.612674212
r_HII	0.07272801	-0.941191044
r_PDR	-0.22704631	0.720683299
X0_30	-0.92733507	-0.238688585
X31_150	-0.74352802	0.318765187
X151_225	0.50769044	0.442722114
X226_300	0.97862758	-0.003048866
maior_300	0.98233141	0.015277761
EW6.2	-0.34276656	0.076650471
Ssil	-0.19333155	0.325166914

Tabela 3.4 - Contribuição das variáveis para as Dimensões 1 e 2



*Figura 3.10:* Histograma das distribuições das variâncias das propriedades das galáxias Starburst contidas na componente principal 1 (no topo, Dimensão 1) e 2 (na base, Dimensão 2).

Capítulo

4

## Conclusões

Ao longo deste trabalho estudamos propriedades físicas e químicas de uma amostra de 148 galaxias dominadas por Starburst no comprimento de onda do infravemelho, observadas pelo telescópio espacial Spitzer. As propriedades relacionadas as fontes de ionização, assinatura de silicato e largura equivalente dos PAHs foram inferidas por Hernán-Caballero A., Hatziminaoglou E. (2011), enquanto as propriedades referentes as classes moleculares foram retiradas da base de dados do NASA Ames PAH IR e derivadas por Espinoza e Sales (2020, em prelo). A amostra foi submetida a analise de componentes principais e agrupamento hierárquico Ward.

Na primeira etapa deste trabalho, através da analise de componentes principais aplicada a amostra de 148 galaxias dominadas por starburst foi possível concluir que:

- A variância das 10 propriedades físicas e químicas das 148 galáxias dominadas por Starburst, pode ser explicadas principalmente pelas duas primeiras componentes principais (~ 57%) e considerando as 5 primeiras componentes foi alcançado ~ 90% da variância total da amostra.
- A primeira componente principal da amostra total possui maior correlação com as classes moleculares de PAHs e a segunda componente principal carrega tem maior correlação com as fontes de ionização. Ressaltamos ainda, que as propriedades relacionadas as classes moleculares e fontes de ionização correspondem a maior parte da variância da amostra.
- Além disso, a análise demonstra indicativos de que a fonte de ionização de AGN (r\_AGN) tem maior correlação com moléculas de PAHs grandes e muito grandes, enquanto, as fontes de ionização por estrelas (r\_PDR e r\_Hii) estão mais correlacio-

nadas com as moléculas pequenas e muito pequenas. Para confirmar esses indicativos é necessário realizar uma análise de correlação entre as variáveis.

 A componente principal 3 compreende principalmente a variância de fontes de ionização por estrelas enquanto a componente principal 4 compreende melhor a variância das moléculas médias. A contribuição da assinatura de silicato nessa análise foi pouco significativa nas primeiras 4 componentes, apresentando ~ 60% da variância na dimensão 5.

Além disso, na segunda etapa deste trabalho, ao submetermos a amostra de 148 galáxias dominadas por starburst a análise de agrupamento hierárquico Ward e distancia euclidiana foram derivados 2 grupos. O primeiro grupo contendo 109 galáxias e o segundo grupo com 39 galáxias. Ao aplicarmos a análise de componentes principais aos dois grupos, foi possível concluir que:

- Para o grupo 1, a variância das 10 propriedades físicas e químicas das 109 galáxias podem ser explicadas principalmente pelas duas primeiras componentes principais (~ 58,9%). Quando consideramos as 5 primeiras componentes obtemos um total de ~ 92% da variância da amostra. Semelhante ao que ocorre na análise da amostra total, a componente principal 1 (dim1) engloba a contribuição das classes moleculares e componente principal 2 (dim2) engloba a contribuição das fontes de ionização.
- Além disso, a Fig. 3.6 mostra que as classes de moléculas de PAHs grandes e muito grande são negativamente correlacionadas com a componente principal 1 e as classes de PAHs pequenas e muito pequenas estão positivamente correlacionadas com a componente. Já em relação a componente principal 2 temos as fontes de ionização não-térmicas (r\_AGN) negativamente correlacionadas com as fontes de ionização térmicas (r\_PDR e r\_HII).
- Além disso, a fonte de ionização com maior correlação com as componentes no grupo 1 foi a fonte não-térmica (*r\_AGN*). A classe molecular de moléculas grandes e muito grandes obtiveram valores de correlação maiores com a componente principal 1 em relação as classes de moléculas menores para o grupo 1.
- A contribuição da assinatura de silicato na analise foi pouco significativa nas primeiras 4 componentes, apresentando ~ 80% da variância na dimensão 5.

- Para o grupo 2, a variância das 10 propriedades físicas e químicas das 39 galáxias podem ser explicadas principalmente pelas duas primeiras componentes principais (~ 60,8%). Quando consideramos as 5 primeiras componente obtemos um total de ~ 97% da variabilidade da amostra. Da mesma forma que ocorre no grupo 1, as classes moleculares de PAHs grandes e muito grandes negativamente correlacionadas com a componente principal 1 e as classes de PAHs pequenas e muito pequenas estão positivamente correlacionadas com a componente1. O mesmo acontece com as fontes de ionização, onde as fontes não-térmicas são negativamente correlacionadas com a componente 2 e as com as fontes térmicas estão positivamente correlacionadas com a mesma.
- A partir dos resultados para o grupo 2 foi possível inferir que as fontes de ionização por estrela obtiveram valores mais alto de correlação de Pearson com as componentes, diferentemente do grupo 1. Além disso, a classe de moléculas muito pequenas obteve um valor de correlação maior com a componente 1 em ralação as demais classes para o grupo 2.
- As variabilidades da EW dos PAHs em 6,2μm e do silicato foram melhor compreendidas nas dimensões 3 e 4, com ~ 53% e ~ 50%.

Utilizando a técnica para derivar tamanhos moleculares, proposta por Espinoza & Sales (2020, em prelo) e a análise estatística multivariada, encontramos resultados que corroboram com os apresentados por Sales et al. (2010, 2013). Esta análise também sugere que em ambiente estelar a contribuição das moléculas pequenas são mais significativas. De modo geral, as distribuições das 10 propriedades das galáxias estão contidas nas 5 primeiras componentes principais, mostradas nos diagramas do Apêndice A. Assim, o estudo realizado aqui se mostra robusto para o estudo de astroquímica e suportado por resultados anteriores em que foram utilizadas diferentes técnicas e modelagens. Capítulo 4. Conclusões

## Referências Bibliográficas

- Anil K. Pradhan S. N. N., Atomic Astrophysics and Spectroscopy 1 edn. Cambridge University Press, 2011
- Antonucci R. R., Miller J. S., Spectropolarimetry and the nature of NGC 1068, ApJ, 1985, vol. 297, p. 621
- Audibert A., Testando as propriedades físicas do modelo unificado de galáxias de núcleo ativo, Porto Alegre: Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2015, Dissertação de Mestrado, 92 p.
- Berné O., Montillaud J., Joblin C., Top-down formation of fullerenes in the interstelar medium. 557., 2015, 113 p.
- Boersma C., Bauschlicher C. W., Ricca A., Mattioda A. L., Cami J., Peeters E., de Armas F. S., Saborido G. P., Hudgins D. M., Allamandola L. J., THE NASA AMES PAH IR SPECTROSCOPIC DATABASE VERSION 2.00: UPDATED CONTENT, WEB SITE, AND ON(OFF)LINE TOOLS, The Astrophysical Journal Supplement Series, 2014, vol. 211, p. 8
- Brandl B. R., Bernard-Salas J., Spoon H. W. W., Devost D., Sloan G. C., Guilles S., Wu Y., Houck J. R., Weedman D. W., Armus L., Appleton P. N., Soifer B. T., Charmandaris V., Hao L., J. A. Marshall S. J. H., Herter T. L., The Mid-Infrared Properties of Starburst Galaxies fromSpitzer-IRS Spectroscopy, The Astrophysical Journal, 2006, vol. 653, p. 1129
- Canelo C. M., O Mundo Aromático dos PAHs no meio interestelar às condições bióticas,

São Paulo: Universidade de São Paulo - Instituto de Astronomia, Geofisica e Ciências Atmosfericas - Departamento de Astronomia, 2016, Dissertação de Mestrado, 162 p.

Chang R., Química geral: Conceitos Essenciais. 4. Porto Alegre: AMG, 2010

- Costa J. A. F., Classificação automatica e analise de dados por redes neurais autoorganizaveis, São Paulo: Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação, 1999, Tese de Doutorado, 345 p.
- Ehrenfreund P., Irvine W., Becker L., Blank J., Brucato J. R., Colangeli L., Derenne S., Despois D., Dutrey A., Fraaije H., Lazcano A., Owen T., Robert F., an International Space Science Inst ISSI-Team Astrophysical and astrochemical insights into the origin of life, Reports on Progress in Physics, 2002, vol. 65, p. 1427
- Ehrenfreund P., Rasmussen S., Cleaves J., Chen L., Experimentally tracing the key steps in the origin of life: The aromatic world.. 6., 2006, 490
- Galvão N. D., Marin H. d. F., TÂde minera§Âde dados: uma revisÂda literatura, Acta Paulista de Enfermagem, 2009, vol. 22, p. 686
- Gastão B. L. N., Astronomia Extragaláctica: Notas de Aula. Edicao. Cidade: Editora, 2018, 100 p.
- Gil V. d. O., Análise de Agrupamento a Partir de Parâmetros Morfométricos Para Identificar Classes Morfológicas de Galáxias, Santa Maria: Universidade Federal de Santa Maria - UFSM, 2019, Tese de Doutorado, 68 p.
- Gillett, F. C. and Kleinmann, D. E. and Wright, E. L. and Capps, R. W. Observations of M82 and NGC 253 at 8-13 microns, Astrophysical Journal., 1975, vol. 198, p. 65
- Hernán-Caballero A., Hatziminaoglou E. An atlas of mid-infrared spectra of star-forming and active galaxies., MNRAS, 2011, vol. 414, p. 500
- Hilzette P. C., Andrade M. F., Diniz M. F. P., Azevedo S. N. C., Comportamento de Cura de Adesivo Epoxídico Contendo Grupo Mercaptana Avaliado por Espectroscopia no Infravermelho (MIR/NIR) e Calorimetria Exploratória Diferencial (DSC). 4. Porto Alegre: AMG, 2008

- Jain, A. K. and Murty, M. N. and Flynn, P. J. Data clustering: a review., ACM Computing Surveys., 1999, vol. 31, p. 264
- Kassambara A., Multivariate Analysis II Practical Guide to Principal Component Methods in R. STHDA, 2017
- Kruse F. A., Lefkoff A. B., Boardman J. W., Heidebrecht K. B., Shapiro A. T., Barloon P. J., Goetz A. F. H., The spectral image processing system (SIPS) [U+2010] interactive visualization and analysis of imaging spectrometer data, AIP Conference Proceedings, 1993, vol. 283, p. 192
- Leitherer C., Leão J. R. S., Heckman T. M., Lennon D. J., Pettini M., Robert C., Ultraviolet Line Spectra of Metal-poor Star-forming Galaxies, ApJ, 2001, vol. 550, p. 724
- Leão J. R. S., As Populações de Estrelas Wolf-Rayet em Galáxias Starburst de Alta Metalicidade, Santa Catarina: Universidade Federal de Santa Catarina, 2006, Tese de Doutorado, 229 p.
- Osterbrock D., Astrophysics of Gaseous Nebulae and Active Galactic Nuclei. California: University Science Books, 1989
- Rees M. J., Netzer H., Ferland G. J., Small dense broad-line regions in active nuclei, Astrophysical Journal, 1989, vol. 347, p. 640
- Richard Arnold Johnson D. W. W., Applied multivariate statistical analysis 6 edn. Pearson Prentice Hall, 2007
- Riffel G. R., Rodriguez-Ardila A., Pastoriza M. G., Spectral Atlas of Active Galactic Nuclei, Astronomy and astrophysics, 2006, vol. 457, p. 61
- Riffel R., Galáxias de núcleo ativo: caracterização do contínuo e das linhas de emissão no infravermelho próximo, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2008, Tese de Doutorado, 130 p.
- Roy A., Active Galaxy Unification, School of Physics, University of Sydney, 1994, Tese de Doutorado, 6 p.
- Ruschel-Dutra D., Pastoriza M., Sales D. A., A mid-IR comparative analysis of the Seyfert galaxies NGC 7213 and NGC 1386, Royal Astronomical Society, 2014

- Sales D. A., Propriedades físicas dos silicatos e hidrocarbonetos aromáticos policíclicos presentes na região nuclear das galáxias Seyferts e Starburst, Porto Alegre: Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2012, Tese de Doutorado, 166 p.
- Sales D. A. d., Pastoriza M., Riffel R., Polycyclic Aromatic Hydrocarbon and Emission Line Ratios in Active Galactic Nuclei and Starburts Galaxies, The Astrophysical Journal, 2010, vol. 725, p. 605
- Sales D. A. d., Pastoriza M., Riffel R., Winge C., Polycyclic aromatic hydrocarbon in the central region of the Seyfert 2 galaxy NGC 1808, Royal Astronomical Society, 2013, vol. 429, p. 2634
- Searle L., Sargent W. L. W., Bagnuolo W. G., The History of Star Formation and the Colors of Late-Type Galaxies, ApJ, 1973, vol. 179, p. 427
- Tan P., Steinbach M., Kumar V., Introdução ao Data Mining Mineração., 2009
- Tielens A. G. G. M., The Physics and Chemistry of the Interstellar Medium, 2005
- Toomre A., Toomre J., Galactic Bridges and Tails, The Astrophysical Journal, 1972, vol. 178, p. 623
- Ward J. H. J., Hierarchical Grouping to Optimize an Objective Function, Journal of the American Statistical Association, 1963, vol. 58, p. 236

Apêndice

Apêndice A

# Análise das Componentes Principais das Galáxias Starburst

Este capítulo mostra os resultados derivadas dos coeficientes de ponderação das propriedades físicas e químicas da amostra de 148 galáxias dominadas por Starburst e seus coeficientes de correlações para as componentes principais 3, 4 e 5.



*Figura A.1:* Histograma das distribuições das variâncias das propriedades das galáxias Starburst contidas na componente principal 3 (Dimensão 3)



Figura A.2: Histograma das distribuições das variâncias das propriedades das galáxias Starburst contidas na componente principal 4 (Dimensão 4)



*Figura A.3*: Histograma das distribuições das variâncias das propriedades das galáxias Starburst contidas na componente principal 5 (Dimensão 5)

### A.1 Grupo 1

Esta sessão mostra os resultados derivadas dos coeficientes de ponderação das propriedades físicas e químicas da amostra de 109 galáxias dominadas por Starburst (Grupo 1) e seus coeficientes de correlações para as componentes principais 3, 4 e 5.



*Figura A.4:* Histograma das distribuições das variâncias das propriedades das galáxias Starburst contidas na componente principal 3 (Dimensão 3)

### A.2 Grupo 2

Esta sessão mostra os resultados derivadas dos coeficientes de ponderação das propriedades físicas e químicas da amostra de 39 galáxias dominadas por Starburst (Grupo 2) e seus coeficientes de correlações para as componentes principais 3, 4 e 5.



Figura A.5: Histograma das distribuições das variâncias das propriedades das galáxias Starburst contidas na componente principal 4 (Dimensão 4)



*Figura A.6*: Histograma das distribuições das variâncias das propriedades das galáxias Starburst contidas na componente principal 5 (Dimensão 5)



*Figura A.7:* Histograma das distribuições das variâncias das propriedades das galáxias Starburst contidas na componente principal 3 (Dimensão 3)



*Figura A.8:* Histograma das distribuições das variâncias das propriedades das galáxias Starburst contidas na componente principal 4 (Dimensão 4)



Figura A.9: Histograma das distribuições das variâncias das propriedades das galáxias Starburst contidas na componente principal 5 (Dimensão 5)