



Pós-Graduação em Ciência da Computação

“MINIMIZANDO O MAU CONDICIONAMENTO NA
ANÁLISE POR RADIAÇÃO GAMA”

Por

Halisson Alberdan Cavalcanti Cardoso

Dissertação de Mestrado



Universidade Federal de Pernambuco
posgraduacao@cin.ufpe.br
www.cin.ufpe.br/~posgraduacao

RECIFE
2015



Universidade Federal de Pernambuco
Centro de Informática
Pós-graduação em Ciência da Computação

Halisson Alberdan Cavalcanti Cardoso

**“MINIMIZANDO O MAU CONDICIONAMENTO NA ANÁLISE POR
RADIAÇÃO GAMA”**

*Trabalho apresentado ao Programa de Pós-graduação em
Ciência da Computação do Centro de Informática da Univer-
sidade Federal de Pernambuco como requisito parcial para
obtenção do grau de Mestre em Ciência da Computação.*

Orientador: *Silvio de Barros Melo*

Co-Orientador: *Ricardo Martins de Abreu Silva*

RECIFE

2015

Catálogo na fonte
Bibliotecária Jane Souto Maior, CRB4-571

C268m Cardoso, Halisson Alberdan Cavalcanti
Minimizando o mau condicionamento na análise por radiação
gama / Halisson Alberdan Cavalcanti. – Recife: O Autor, 2015.
99 f.: il., fig., tab.

Orientador: Silvio de Barros Melo.
Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de
Pernambuco. CIn, Ciência da computação, 2015.
Inclui referências e anexo.

1. Algoritmos. 2. Matemática. 3. Heurística. 4. Otimização. I.
Melo, Silvio de Barros (orientador). II. Título.

005.1

CDD (23. ed.)

UFPE- MEI 2015-40

Dissertação de mestrado apresentada em 26 de Fevereiro de 2015 por **Halisson Alberdan Cavalcanti Cardoso** ao programa de Pós-Graduação em Ciência da Computação do Centro de Informática da Universidade Federal de Pernambuco, sob o título **Minimizando o mau condicionamento na análise por radiação gama**, orientada pelo **Prof. Silvio de Barros Melo** e aprovada pela banca examinadora formada pelos professores:

Prof. Silvio de Barros Melo
Centro de Informática/UFPE

Prof. Emerson Alexandre de Oliveira Lima
Escola Politécnica de Pernambuco- Poli/ UPE

Prof. Claudio Tadeu Cristino
Departamento de Estatística e Informática-DEINFO/ UFRPE

*Dedico essa dissertação a todos que colaboraram, direta ou
inderetamente, para a realização das pesquisas e para a
escrita desse trabalho, sem os quais eu não teria
conseguido.*

Agradecimentos

Agradeço a Deus e ao Centro de informática pela oportunidade de realizar um pós graduação acadêmica, mesmo após quase dez anos de graduado.

Agradeço aos meus orientadores, Silvio de Barros Melo e Ricardo Martins de Abreu e Silva, que não mediram esforços no intuito de fazer com que os trabalhos fossem feitos da melhor maneira possível.

Agradeço a minha família, em especial a minha filha, minha esposa e meus pais, que tiveram toda paciência possível para lidar com minha ausência em situações marcantes em nossas vidas. A eles, ficam minhas desculpas pelos aborrecimentos.

Não poderia esquecer de agradecer ao Governo do Estado de Pernambuco, que forneceu as condições possíveis para o bom andamento dos trabalhos ao longo do curso, em especial aos funcionários: Sinésio Monteiro, coordenador da Gerência Regional de Educação Metro Norte, que dispendeu todas as atenções necessárias para orientar as negociações junto à Secretaria de Educação ; Natali Vieira e Ademir Ferreira, apoiadores do professor Sinésio e que também contribuíram junto à secretaria.

Aos meus amigos e professores de cadeira, com quem aprendi tanto ao longo das disciplinas, em especial à Marcelo Bassani , Shayane de Oliveira Moura, Antúlio de Oliveira ,George Darmiton da Cunha Cavalcanti, Frederico Luiz Gonçalves de Freitas, Emerson Lima, Carlos Alexandre Barros de Melo e Judith Kelner.

Não poderia esquecer de agradecer à Ilker Meric, pelo seu artigo, e à Universitetet i Bergen, pela paciência e pela parceria que resultou no presente trabalho.

Resumo

Sistemas de análise por radiação gama, para determinação de fração percentual de vários compostos em uma amostra, apresentam diversas etapas. Entre elas, pode-se enumerar: Suposição inicial da fração percentual de cada compostos em uma amostra; Execução de simulações Monte Carlo para obtenção de bibliotecas espectrais; Determinação dos coeficientes de fração em peso por meio da aproximação de solução do sistema de equações lineares pelos mínimos quadrados; se os valores retornados pelos mínimos quadrados estiverem distantes da suposição inicial, retorna-se ao primeiro passo. Uma etapa importante na determinação dos coeficientes pelos mínimos quadrados é a utilização de uma matriz de covariância que apresente um valor de condicionamento próximo de 1, para que a aproximação seja a mais fidedigna possível dos valores de fração em peso realmente encontrados na amostra. Esse trabalho focará na utilização da metaheurística Greedy Randomized Adaptative Search Procedure (GRASP) para encontrar uma matriz de covariância que seja mais apropriada para a aproximação do sistema de equações lineares pelos mínimos quadrados. Para isso, serão trabalhadas várias etapas, internamente ao GRASP. O GRASP, ao longo do seu desenvolvimento, se mostrou bastante eficaz no intuito de se conseguir os objetivos do presente trabalho. É possível enumerar os algoritmos que constituem o GRASP: Algoritmos de construção de soluções, Algoritmos de busca em torno de soluções construídas e algoritmos de linkagem entre soluções candidatas, no intuito de se conseguir melhores soluções entre elas. Por fim, serão apresentados encaminhamentos para trabalhos futuros, e que tem apresentados resultados motivadores para o prosseguimento dos esforços.

Palavras-chave: *Prompt gamma neutron analysis activation(PGNAA)*. Número de condicionamento. *Monte Carlo Library Least Square (MCLLS)*. GRASP. Mínimos Quadrados. SVD

Abstract

Analysis systems using gamma radiation to determine the percentage fraction of several compounds in a sample under analysis, show several stages. Among them, we can enumerate: Initial Guess percentage fraction of each compound in a sample; Implementation of Monte Carlo simulations to obtain spectral libraries; Determination of weight fraction ratios by means of the approximation solution of the least squares linear equation system; If the values returned by the least squares are far from the initial assumption, returns to the first step. An important step in determining the least squares coefficients is the use of a covariance matrix that presents a low fitness value, so that the approximation is as close as possible to the weight fraction values actually to be found in the sample. That work will focus on the use of metaheurística ac GR to find a covariance matrix that is most appropriate to the approach of linear equações system by least squares. For this, several steps will be worked internally to GRASP, which, throughout its development, proved very consolidated in order to achieve the objectives of this work: Construction Algorithms solutions, search algorithms built around solutions and linking algorithms between candidate solutions in order to achieve better solutions between them. Finally, will be presented referrals for future work, and has presented results motivators for further efforts.

Keywords: *Prompt gamma neutron analysis activation(PGNAA)*. Número de condicionamento. *Monte Carlo Library Least Square (MCLLS)*. GRASP. Least Square. SVD

Lista de Figuras

1.1	Proposta	16
2.1	Ortogonalização de dois vetores	28
2.2	Ortogonalização de três vetores	28
2.3	Projeção de vetores	30
2.4	Gráfico contagem espectral	33
3.1	Interação nêutron-núcleo	47
3.2	Configuração experimental	48
4.1	Resultados da fase construtiva para matriz covariância, instância 3	66
4.2	Resultados da fase construtiva para matriz covariância ortogonalizada, instância 3	67
4.3	Resultados da fase construtiva para matriz de mudança de base, instância 3	67
4.4	Resultados da fase construtiva para matriz de covariância , instância 2	68
4.5	Resultados da fase construtiva para matriz de covariância ortogonalizada, instância 2	68
4.6	Resultados da fase construtiva para matriz de mudança de base, instância 2	69
4.7	Resultados da primeira busca para matriz covariância, instância 3	70
4.8	Resultados da primeira busca para matriz covariância ortogonalizada, instância 3	71
4.9	Resultados da primeira busca para matriz de mudança de base, instância 3	71
4.10	Resultados da primeira busca para matriz de covariância, instância 2	72
4.11	Resultados da primeira busca para matriz de covariância ortogonalizada, instância 2	72
4.12	Resultados da primeira busca para matriz de mudança de base, instância 2	73
4.13	Resultados do path-relinking, para matriz de covariância, instância 3	74
4.14	Resultados do path-relinking, para matriz de covariância ortogonalizada, instância 3	74
4.15	Resultados do path-relinking, para matriz de mudança de base, instância 3	75
4.16	Resultados do path-relinking, para matriz de covariância, instância 2	75
4.17	Resultados do path-relinking, para matriz de covariância ortogonalizada, instância 2	76
4.18	Resultados do path-relinking, para matriz de mudança de base, instância 2	76
4.19	Resultados da segunda busca local, para matriz de covariância, instância 3	77
4.20	Resultados da segunda busca local, para matriz de covariância ortogonalizada, instância 3	78
4.21	Resultados da segunda busca local, para matriz de mudança de base, instância 3	78
4.22	Resultados da segunda busca local, para matriz de covariância, instância 2	79

4.23	Resultados da segunda busca local, para matriz de covariância ortogonalizada, instância 2	79
4.24	Resultados da segunda busca local, para matriz de mudança de base, instância 2	80
4.25	Resultados gerais do GRASP, instância água	81
4.26	Resultados gerais do GRASP, instância óleo	82
4.27	Matriz de covariância, dimensão 5, escolha de canais sucessivos	84
4.28	Matriz de covariância delimitada, dimensão 5, escolha de canais sucessivos . .	84
4.29	Matriz de covariância ortogonalizada, dimensão 5, escolha de canais sucessivos	85
4.30	Matriz de covariância ortogonalizada delimitada, dimensão 5, escolha de canais sucessivos,	85
4.31	Matriz de mudança de base, dimensão 5, escolha de canais sucessivos,	86
4.32	Matriz de mudança de base delimitada, dimensão 5, escolha de canais sucessivos,	86
5.1	Coordenadas baricêntricas	90
5.2	Proposta para rastreabilidade do background	91

Lista de Tabelas

3.1	Estados excitados	46
4.1	Instâncias	65
4.2	Resultados-gerais	65
4.3	Intervalos dados globais	83

Lista de Acrônimos

GRASP	Greedy Randomized Adaptative Search Procedure	16
PGNAA	Prompt Gamma-ray Neutron Activation Analysis	15
MCA	Multi-Channel Analyzer	15
MCLLS	Monte Carlo Library Least Squares	15
SVD	Singular Value Decomposition	21
ALI	Linear Interpolation Approach	41
LLS	Lybrary Least Square	49
RCL	Restricted List Candidates	37

Sumário

1	Introdução	14
2	Fundamentos	18
2.1	Condicionamento	18
2.2	Decomposição em Valores Singulares (SVD)	21
2.3	Condicionamento e Decomposição em Valores Singulares	22
2.4	Ortogonalização	26
2.5	Mínimos Quadrados	29
2.6	Independência linear dos dados usados	33
2.7	Monte Carlo Library Least Squares-MCLLS	33
2.8	GRASP	36
3	Condicionamento e o Monte Carlo	41
3.1	Estado da Arte	41
4	Metodologia e Resultados	50
4.1	metodologia	50
4.1.1	Bibliotecas de Energia	50
4.1.2	GRASP	51
4.1.3	Intervalos	53
4.1.4	Proporção	54
4.1.5	Número de canais por intervalo	54
4.1.6	Construtivo	55
4.1.6.1	Construção de matrizes de covariância de dimensão 2	55
4.1.6.2	Construção das matrizes de covariância de dimensão 5	57
4.1.7	Busca Local	57
4.1.8	Path-Relinking	59
4.1.9	Ortogonalização	61
4.2	Resultados	64
4.2.1	Resultados Gerais/Tabelas	64
4.2.2	Resultados Algoritmo Construtivo	66
4.2.3	Resultados 1° Busca Local	70
4.2.4	Resultados Path-Relinking	73
4.2.5	Resultados 2° Busca Local	77
4.2.6	Resultados do Grasp	80
4.2.7	Estudo do Condicionamento das Matrizes de Dimensão 5	83

5	Conclusões e Trabalhos Futuros	87
5.1	Conclusões	87
5.2	Trabalhos futuros	89
	Referências	93
	Referências	93
	Anexo	97
A	Norma Matricial	98

1

Introdução

Após a descoberta do neutrôns, suas reações nucleares começaram a ser investigadas a fundo. Durante os estudos sobre a reação de captura de neutrôns em materiais contendo hidrogênio, a emissão de radiação gama altamente penetrante já foi observada em 1934 ([FERMI et al. \(1934\)](#)). Esta foi a primeira radiação gama detectada.

Em 1936 [HEVESY; LEVI \(1936\)](#), propôs detectar os núcleos radioativos formados durante a irradiação com nêutrons, para propósitos de análise elementar. A análise por ativação com nêutrons é uma das técnicas mais importantes na determinação elementar de compostos. ([HEVESY; LEVI \(1936\)](#))

Medidas nucleares tem sido utilizadas em diferentes contextos dentro da indústria. Essas medidas oferecem uma maneira não intrusiva e não destrutiva de analisar diversas amostras de interesse. Podem ser usadas na indústria metalúrgica, alimentícia, processamento de ração animal e dentro da indústria do petróleo por meio da medição de fração de volume de gás ([JOHANSEN; JACKSON \(2004\)](#), [HOLSTAD \(2000\)](#), [TJUGUM; FRIELING; JOHANSEN \(2002\)](#), [PARK; CHUNG \(2007\)](#)). Estudos recentes com medidores nucleares, baseados em medidas de raios gama espalhados e transmitidos, foram conduzidos em conjunto com detectores de cintilação para realizar medições de salinidade([TJUGUM; JOHANSEN; HOLSTAD \(2001\)](#), [JOHANSEN; JACKSON \(2000\)](#)) .

Na indústria do petróleo, a tendência é abandonar o uso de instalações tradicionais de produção e focar em instalações em mar aberto ([MERIC \(2012\)](#)). Sendo assim, se faz cada vez mais necessária sistema de medições multifásicos. Existe, então, uma necessidade cada vez maior em métodos analíticos precisos, rápidos que requerem manutenção mínima e que apresentem um funcionamento estável sob condições exigentes.

A principal motivação do presente trabalho em questão é lidar com condicionamento de matrizes que determinam a salinidade e composição de amostras de água produzidas durante atividades de exploração de petróleo. Entenda-se por água produzida aquela advinda conjuntamente com óleo e gás durante a recuperação de compostos de hidrocarbonetos. A caracterização dessa qualidade de água é demasiadamente importante, pois a composição pode variar como resultado da localização, do tempo de vida do campo ([VEIL et al. \(2004\)](#)) de onde essa amostra

foi extraída, assim como de bruscas transformações de pressão e composição na localidade.

Uma técnica para a análise elementar requerida, segundo os critérios acima descritos, é a Prompt Gamma-ray Neutron Activation Analysis (PGNAA). PGNAA é baseado no bombardeamento de uma amostra de interesse com nêutrons, a partir de uma fonte, e monitoramento da energia dos raios gama eminentes do alvo, usando um espectrômetro apropriado, em conjunto com Analisador Multi Canal (Multi-Channel Analyzer (MCA)). Os raios gama são característicos de cada elemento. Além disso, o nêutron pode penetrar em grandes profundidades o material amostral, já que esses possuem energias que variam de centenas de Kev até 11-12 MeV. Essas propriedades mencionadas permitem a utilização em casos em que se faz necessária a análise de composição de uma amostra.

A viabilidade de se utilizar o PGNAA para determinação quantitativa de diferentes componentes foi demonstrados em [WANG; LI; GARDNER \(2008\)](#). Esse desenvolvimento levou a considerar o uso do PGNAA para caracterização de amostras de água produzidas na extração de compostos de hidrocarbonetos.

Em [WANG; LI; GARDNER \(2008\)](#), além de se demonstrar a viabilidade do PGNAA, o Monte Carlo Library Least Squares (MCLLS) ([ARINC et al. \(1975\)](#), [VERGHESE et al. \(1988\)](#), [SHYU; GARDNER; VERGHESE \(1993\)](#)) foi usado para análises quantitativas. O MCLLS é utilizado fazendo uso de toda a informação contida dentro do espectro de raios gama, diferentemente da análise espectral por fotopicos. Supõe-se que a taxa de contagem da amostra, em um valor de canal, pode ser determinado como uma combinação linear dos compostos, onde os coeficientes da combinação são os valores da fração em peso dos constituintes da amostra,

Em [MERIC \(2012\)](#), um novo processo iterativo é sugerido no intuito de se determinar os compostos inseridos em uma amostra. Nesse processo, inicialmente estima-se uma composição inicial; O passo seguinte consiste na determinação da biblioteca de cada composto, pelo Monte Carlo; Segue-se, então, a solução pelos mínimos quadrados, que retornará uma estimativa da fração em peso de cada composto na amostra; Se essa estimativa estiver distante da suposição inicial, ocorre uma nova iteração, até que os valores retornados pelos mínimos quadrados concorde, sob uma certa tolerância, com os o valores estimados inicialmente. Nessa nova iteração, descrita no último passo, os novos valores de fração em peso corresponderá as saídas de fração em peso encontradas no passo anterior.

Uma grande problemática nesse tipo de abordagem é quanto à radiação de fundo detectada na contagem espectral total, que pode ser proveniente de várias fontes, destacando-se: (a) raios gama emitidos a partir da fonte de nêutrons; (b) A ativação dos dispositivos de detecção podem vir acompanhada da emissão de raios gama; (c) radiação gama atrasada emitidas a partir das amostras; (d) emissão a partir de isótopos de Na-24 e I-128([GARDNER et al. \(2006\)](#)).

Devido à grande quantidade de fontes a partir das quais o ruído pode se originar ([MERIC \(2012\)](#)), é muito difícil a rastreabilidade dos mesmos, em cada um dos respectivos valores de energia. O tratamento dado é encará-lo como um composto qualquer. Os trabalhos futuros podem incluir uma maneira de determinar os valores de ruído (background), para um dado conjunto de

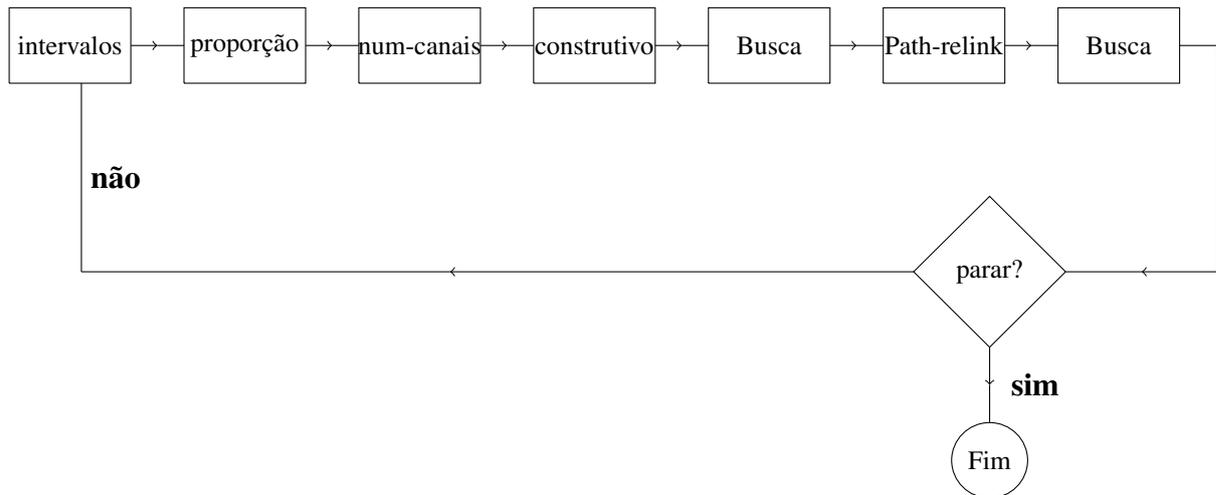


Figura 1.1: Proposta do trabalho. Inicia-se com os dados brutos, que são sujeitos ao algoritmo *Intervalos*, que verifica em quantos conjuntos os dados podem ser separados; o algoritmo *proporção* determina a proporção da quantidade de canais em cada um dos conjuntos; *num-canais*, para uma quantidade específica de canais na chamada da rotina principal, determina quantos canais farão parte de cada conjunto, obedecendo o que está em *proporção*; *construtivo* traz uma solução a partir do espaço de soluções possíveis; *busca* realiza uma procura em torno da solução construída em *construtivo*; *path-relink* faz uma linkagem entre duas soluções construídas durante o algoritmo principal, seguido de uma nova Busca. O critério de parada é um determinado valor de condicionamento ou um número máximo de iterações do algoritmo principal.

dados.

No Capítulo 2, serão apresentados alguns fundamentos matemáticos utilizados para a proposta do presente trabalho, incluindo-se: Definição de condicionamento (Seção 2.1) e sua relação com os valores singulares de uma matriz (Seção 2.3); fundamentos de Decomposição em valores Singulares (Seção 2.2); Seção 2.4, detalhará o processo de ortogonalização de Gram-Schmidt; aproximação de soluções para sistemas de equações lineares inconsistentes (Seção 2.5); dados utilizados e independência linear (Seção 2.6); princípios do MCLLS (Seção 2.7); descrição da heurística utilizada, Greedy Randomized Adaptive Search Procedure (GRASP), no intuito de atacar o problema de condicionamento das matrizes de covariância (Seção 2.8)

No Capítulo 3, serão apresentados alguns trabalhos em que foram utilizados o conceito de mínimos quadrados, e de condicionamento de matrizes, para uma boa aproximação de solução de sistemas de equações lineares. Também será apresentada uma revisão de alguns trabalhos importantes utilizados na elaboração dessa dissertação, Na revisão dos trabalhos, metodologias serão apresentadas para a criação de alguns dados utilizados (como algoritmos empregados e resultados obtidos) e boas práticas serão mencionadas para se conseguir chegar aos resultados alcançados.

No Capítulo 4, será detalhada toda a metodologia empregada na seleção de algum subespaço do conjunto solução disponível, além do detalhamento dos algoritmos utilizados. A visão geral sobre a computação presente no trabalho está na Figura 1.1.

Ainda no Capítulo 4 são apresentados os resultados, analisando-se mais profundamente as saídas de cada um das subrotinas que compõem o algoritmo principal (intervalos, proporção, num-canais, construtivo, busca e path-relinking), assim como os resultados utilizando a heurística GRASP. Nessa seção, será bastante utilizada a linguagem gráfica no intuito de se demonstrar a eficiência dos algoritmos na construção de matrizes de covariância que apresentem valores de condicionamento o mais baixo possíveis.

No Capítulo 5 são apresentadas as conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

Ao final do trabalho, pretende-se alcançar matrizes de covariância que apresentem melhores valores de condicionamento pela seleção de algum subconjunto de canais do espaço de soluções disponível, além de demonstrar que matrizes que possuam um espaço coluna ortogonal apresentam melhores valores de condicionamento que as matrizes de covariância cujo espaço coluna não seja ortogonal. Uma ressalva a se fazer: Ao longo do texto, matrizes serão nomeadas por letras maiúsculas em negrito, e vetores serão nomeados por letras minúsculas em negrito. Vetores de coordenadas receberão os colchetes (como em $[\mathbf{x}]_{\beta}$).

2

Fundamentos

2.1 Condicionamento

Em [GILL; MURRAY; WRIGHT \(1991\)](#), o condicionamento de um problema reflete a sensibilidade da solução exata ser transformada após uma perturbação nos dados de entrada. Para quantificar esta idéia, assumamos que o problema é definido por um conjunto de dados d . Denote $s(d)$ a solução exata do problema para os dados de entrada d . Se pequenas transformações em d conduzem a pequenas transformações em $s(d)$, pode-se concluir que o problema é bem condicionado. De outro modo, o problema será considerado mau condicionado. Supondo que d_1 e d_2 são dois possíveis conjuntos de dados, o *Condicionamento* (ou *número de condicionamento*) pode ser definido:

Definição 2.1 (Condicionamento). O condicionamento é medido como o máximo valor da razão:

$$\frac{\|s(d_1) - s(d_2)\|}{\|d_1 - d_2\|} \quad (2.1)$$

Uma ilustração do número de condicionamento: Considere o problema de se determinar as raízes do polinômio:

$$p(x) = (x - 1)^4,$$

para o qual as quatro raízes são reais e iguais a 1. Suponha uma pequena perturbação, da ordem de 10^{-8} , de tal modo que a equação a ser resolvida será:

$$(x - 1)^4 = 10^{-8}$$

Uma das raízes é $1 + 10^{-2}$, ou seja, a raiz real foi transformada de 1 para $1 + 10^{-2}$. Isso faz com que o valor da equação (2.1) seja da ordem de 10^6 , configurando-o como mau condicionado devido ao fato de ser muito maior que 1.

O mau condicionamento não é restrito a problemas polinomiais. Também pode ser definido para sistemas lineares.

Considere A uma matriz não singular (ou seja, determinante não nulo, o que implica a

existência e unicidade da inversa) e o seguinte sistema linear:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad (2.2)$$

cuja solução exata é $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$. Perturba-se, então, o lado direito do sistema, de \mathbf{b} para $\mathbf{b} + \delta\mathbf{b}$, permanecendo \mathbf{A} inalterado. Representando a solução para o problema perturbado por $(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}_b)$, tem-se que:

$$\mathbf{A}(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}_b) = \mathbf{b} + \delta\mathbf{b} \quad (2.3)$$

A ocorrência de um ‘ δ ’ precedendo a nomeação do vetor \mathbf{x} significa a perturbação, de modo que $\delta\mathbf{b}$ é a transformação no vetor \mathbf{b} e $\delta\mathbf{x}_b$ é a perturbação na solução do problema

Sabendo que:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}_b) &= \mathbf{b} + \delta\mathbf{b} \\ \mathbf{Ax} + \mathbf{A}\delta\mathbf{x}_b &= \mathbf{b} + \delta\mathbf{b} \end{aligned} \quad (2.4)$$

e que $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, implica que $\mathbf{A}\delta\mathbf{x}_b = \delta\mathbf{b}$, e

$$\delta\mathbf{x}_b = \mathbf{A}^{-1}\delta\mathbf{b} \quad (2.5)$$

Usando propriedades de normas (inequação (A.6)), obtém-se um limite superior para $\|\delta\mathbf{x}_b\|$

$$\|\delta\mathbf{x}_b\| \leq \|\mathbf{A}^{-1}\| \|\delta\mathbf{b}\| \quad (2.6)$$

onde a igualdade é verificada para um vetor $\delta\mathbf{b}$. A inequação (2.6) mostra que o tamanho da transformação de $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ resultante a partir da transformação de $\delta\mathbf{b}$ no lado direito pode ser tão grande quanto $\|\mathbf{A}^{-1}\|$ multiplicado por $\|\delta\mathbf{b}\|$.

Pela mesma propriedade que permitiu escrever a inequação (2.6), também é possível escrever a seguinte expressão, a partir da inequação (2.2):

$$\|\mathbf{b}\| \leq \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{x}\| \quad (2.7)$$

onde a igualdade se verifica para certo valor de $\|\mathbf{x}\|$.

multiplicando a inequação (2.6) e inequação (2.7), é possível obter:

$$\|\mathbf{b}\| \|\delta\mathbf{x}_b\| \leq \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{A}^{-1}\| \|\mathbf{x}\| \|\delta\mathbf{b}\| \quad (2.8)$$

Multiplicando a inequação (2.8) por $\frac{1}{\|\mathbf{x}\|}$ (a fim de obter a perturbação relativa), e rearrumando os termos, tem-se:

$$\frac{\|\delta \mathbf{x}_b\|}{\|\mathbf{x}\|} \leq \|\mathbf{A}^{-1}\| \|\mathbf{A}\| \frac{\|\delta \mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|} \quad (2.9)$$

Ou seja, a transformação relativa na exata solução (lado esquerdo da equação) tem um limite superior quando a inequação (2.9) obedecer a igualdade para algum vetor \mathbf{b} e \mathbf{x} .

Perturbando-se a matriz \mathbf{A} , mantendo-se \mathbf{b} fixo :

$$(\mathbf{A} + \delta \mathbf{A})(\mathbf{x} + \delta \mathbf{x}_a) = \mathbf{b} \quad (2.10)$$

O subscrito 'a' na variável \mathbf{x} indica a transformação na matriz \mathbf{A} . Assume-se que $\|\delta \mathbf{A}\|$ pequeno suficiente de modo a fazer com que \mathbf{A} permaneça não singular. Um processo similar ao da equação (2.4) produz

$$\begin{aligned} \mathbf{b} &= \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{A}\delta \mathbf{x}_A + \delta \mathbf{A}\mathbf{x} + \delta \mathbf{A}\delta \mathbf{x}_A \\ \mathbf{A}\delta \mathbf{x}_A &= -\delta \mathbf{A}(\mathbf{x} + \delta \mathbf{x}_A) \\ \delta \mathbf{x}_A &= \mathbf{A}^{-1}(-\delta \mathbf{A}(\mathbf{x} + \delta \mathbf{x}_A)) \end{aligned} \quad (2.11)$$

pela propriedade de normas, é possível escrever, a partir de equação (2.11) e equação (A.6).

$$\begin{aligned} \|\delta \mathbf{x}_A\| &\leq \|\mathbf{A}^{-1}\| \|\delta \mathbf{A}\| \|\mathbf{x} + \delta \mathbf{x}_A\| \\ \frac{\|\delta \mathbf{x}_A\|}{\|\mathbf{x} + \delta \mathbf{x}_A\|} &\leq \|\mathbf{A}^{-1}\| \|\delta \mathbf{A}\| \\ \frac{\|\delta \mathbf{x}_A\|}{\|\mathbf{x} + \delta \mathbf{x}_A\|} &\leq \|\mathbf{A}^{-1}\| \|\mathbf{A}\| \frac{\|\delta \mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|} \end{aligned} \quad (2.12)$$

O valor $\|\mathbf{A}^{-1}\| \|\mathbf{A}\|$ aparece nas inequação (2.9) e na inequação (2.12), e determina a máxima possível transformação relativa na solução exata do sistema linear por meio da transformação dos dados. Define-se, então, o *condicionamento* para sistemas lineares da seguinte maneira:

Definição 2.2 (Condicionamento sistemas lineares). Condicionamento para sistemas lineares pode ser definido por:

$$cond(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}^{-1}\| \|\mathbf{A}\| \quad (2.13)$$

Sabendo que a matriz identidade tem norma 1, então $\mathbf{I} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}$ e $\|\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}\| = 1 \leq \|\mathbf{A}^{-1}\| \|\mathbf{A}\|$, conclue-se que $cond(\mathbf{A}) \geq 1$. Portanto, uma matriz bem condicionada tem condicionamento próximo da unidade. Um problema mau condicionado, tem número de condicionamento muito maior que 1.

Rearrmando as inequação (2.9) e inequação (2.12), obtém-se:

$$\text{cond}(\mathbf{A}) \geq \frac{\|\delta \mathbf{x}_b\| / \|\mathbf{x}\|}{\|\delta \mathbf{b}\| / \|\mathbf{b}\|} \quad e \quad \text{cond}(\mathbf{A}) \geq \frac{\|\delta \mathbf{x}_A\| / \|\mathbf{x} + \delta \mathbf{x}_A\|}{\|\delta \mathbf{A}\| / \|\mathbf{A}\|} \quad (2.14)$$

inequação (2.14) mostra que a transformação relativa na solução exata é muito maior que a perturbação em \mathbf{b} ou \mathbf{A} .

2.2 Decomposição em Valores Singulares (SVD)

Decomposição em valores singulares (Singular Value Decomposition (SVD)) é de grande importância para cálculos numéricos. Tem grande aplicabilidade na solução de sistemas de equações sobredeterminados, principal característica da análise por radiação gama (HARTLEY; ZISSERMAN (2004)). O condicionamento da matriz, como será visto na Seção 2.3, é fortemente relacionado aos valores singulares dessa matriz.

Dada uma matriz \mathbf{A} , o SVD é uma fatorização de \mathbf{A} como $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^T$, onde \mathbf{U} e \mathbf{V} são matrizes ortogonais, e \mathbf{D} é uma matriz diagonal com valores não negativos. A decomposição produz uma matriz diagonal \mathbf{D} em que as entradas, convencionalmente, tem ordem decrescente.

A decomposição em valores singulares também pode ser realizada para matrizes não quadradas. Sendo $\mathbf{A}_{m \times n}$ matriz com $m \geq n$. Neste caso, \mathbf{A} pode ser fatorada como $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^T$ onde \mathbf{U} é uma matriz $m \times n$, cujas colunas são ortogonais, \mathbf{D} é uma matriz diagonal $n \times n$ e \mathbf{V} é uma matriz ortogonal $n \times n$. Afirmar que \mathbf{U} tem colunas ortogonais significa que $\mathbf{U}^T\mathbf{U} = \mathbf{I}_{n \times n}$.

Note que, no caso da matriz \mathbf{A} ser quadrada, a decomposição em valores singulares não coincide com a diagonalização da matriz \mathbf{A} . Para perceber essa conexão entre valores singulares e autovalores, considere:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^T \\ \mathbf{A}^T\mathbf{A} &= [\mathbf{V}\mathbf{D}\mathbf{U}^T][\mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^T] \\ &= \mathbf{V}\mathbf{D}^2\mathbf{V}^T, \text{ sendo } \mathbf{U}^T\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{I} \\ \mathbf{A}^T\mathbf{A} &= \mathbf{V}\mathbf{D}^2\mathbf{V}^{-1}, \text{ sendo } \mathbf{V}^T\mathbf{V}^{-1} = \mathbf{I}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Definição 2.3. (semelhança de matrizes(KOLMAN (2006))) Uma matriz \mathbf{A} é dita semelhante a outra matriz \mathbf{B} se existe uma matriz invertível \mathbf{P} tal que:

$$\mathbf{B} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}$$

Definição 2.4. (Matriz diagonalizável(KOLMAN (2006))) Uma matriz é diagonalizável se ela for semelhante a uma matriz diagonal. Nesse caso, diz-se que \mathbf{A} pode ser diagonalizada.

Então, a equação (2.15), obtida anteriormente, é a definição da equação para os autovalores, indicando que as entradas de \mathbf{D}^2 são os autovalores de $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ e as colunas de \mathbf{V} são os

autovetores de $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$. Em suma, os valores os valores singulares de \mathbf{A} são as raízes quadradas dos autovalores de $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$.

Se $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ é simétrica e definida semi-positiva, os autovalores são reais e não negativos.

Teorema 2.1. (definição SVD) Se $\mathbf{A}_{m \times n}$ é uma matriz qualquer, e $\mathbf{U}_{m \times m}$ e $\mathbf{V}_{n \times n}$ matrizes ortogonais, então:

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \mathbf{S} \mathbf{V}^T \quad (2.16)$$

onde \mathbf{S} é uma matriz diagonal $m \times n$ ($\mathbf{S} = \text{diag}\{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_p\}$), com $p = \min(m, n)$

Demonstração. ver [GOLUB; VAN LOAN \(2012\)](#). □

2.3 Condicionamento e Decomposição em Valores Singulares

A decomposição em valores singulares fornece uma ferramenta que permite analisar o condicionamento de uma matriz. Essa seção fornecerá uma visão a respeito da relação que o condicionamento de uma matriz tem com o seus valores singulares.

Definição 2.5 (Norma Matricial). A norma de uma matriz pode ser definida por:

$$\|\mathbf{A}\| = \max \frac{\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|}, \quad \mathbf{x} \neq \vec{\mathbf{0}} \quad (2.17)$$

Considere a seguinte razão:

$$\mu(\mathbf{A}, \mathbf{x}) = \frac{\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|_2^2}{\|\mathbf{x}\|_2^2} = \frac{(\mathbf{A}\mathbf{x})^T \mathbf{A}\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}} \quad (2.18)$$

Devido ao fato que $\mu(\mathbf{A}, \gamma \mathbf{x}) = \mu(\mathbf{A}, \mathbf{x})$ para qualquer escalar não nulo, a direção de \mathbf{x} será afetada por μ .

Qualquer vetor que maximiza $\mu(\mathbf{A}, \mathbf{x})$ também deve dar o máximo valor para $\frac{\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|_2}{\|\mathbf{x}\|_2}$ e para $\|\mathbf{A}\|_2$. O subscrito 2 está sendo aqui colocado para definir o tipo da norma que está sendo tratado.

Será mostrado que o SVD determina o vetor \mathbf{x} para o qual o valor máximo de $\mu(\mathbf{A}, \mathbf{x})$ é atingido. Considere $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$ representando as n colunas de \mathbf{V} , que são ortonormais e geram \mathbb{R}^n . Qualquer vetor \mathbf{x} pode unicamente ser representado como uma combinação linear dessas colunas:

$$\mathbf{x} = \alpha_1 \mathbf{v}_1 + \alpha_2 \mathbf{v}_2 + \dots + \alpha_n \mathbf{v}_n = \mathbf{V}[\mathbf{x}]_\beta \quad (2.19)$$

onde $[\mathbf{x}]_\beta = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)^T$, vetor de coordenadas de \mathbf{x} relativa à base $\beta = \{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\}$. Será desenvolvida uma expressão para $\mu(\mathbf{A}, \mathbf{x})$ em termos de $[\mathbf{x}]_\beta$, utilizando para isso as propriedades de matrizes e SVD.

Usando equação (2.19) e a ortogonalidade de \mathbf{V} , tem-se

$$\mathbf{x}^T \mathbf{x} = [\mathbf{x}]_\beta^T \mathbf{V}^T \mathbf{V} [\mathbf{x}]_\beta = [\mathbf{x}]_\beta^T [\mathbf{x}]_\beta = \sum_{i=1}^n \alpha_i^2 \quad (2.20)$$

Desde que \mathbf{V} é ortogonal e \mathbf{S} é diagonal, o vetor \mathbf{Ax} pode ser expresso como uma combinação linear das colunas de \mathbf{U} , se utilizando para isso da definição de SVD presente na Seção 2.2 ($\mathbf{A} = \mathbf{USV}^T$):

$$\begin{aligned} \mathbf{Ax} &= \mathbf{USV}^T (\mathbf{V} [\mathbf{x}]_\beta) \\ &= \mathbf{US} [\mathbf{x}]_\beta \\ &= \underbrace{\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & u_{1k} \\ u_{21} & u_{22} & \dots & u_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{n1} & u_{n2} & \dots & u_{nk} \end{pmatrix}}_{\mathbf{U}} \underbrace{\begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sigma_n \end{pmatrix}}_{\mathbf{S}} \underbrace{\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix}}_{[\mathbf{x}]_\beta} \\ &= \begin{pmatrix} u_{11}\sigma_1 & u_{12}\sigma_2 & \dots & u_{1k}\sigma_n \\ u_{21}\sigma_1 & u_{22}\sigma_2 & \dots & u_{2k}\sigma_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{n1}\sigma_1 & u_{n2}\sigma_2 & \dots & u_{nk}\sigma_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} u_{11}\sigma_1\alpha_1 + u_{12}\sigma_2\alpha_2 + \dots + u_{1k}\sigma_n\alpha_n \\ u_{21}\sigma_1\alpha_1 + u_{22}\sigma_2\alpha_2 + \dots + u_{2k}\sigma_n\alpha_n \\ \vdots \\ u_{n1}\sigma_1\alpha_1 + u_{n2}\sigma_2\alpha_2 + \dots + u_{nk}\sigma_n\alpha_n \end{pmatrix} \\ &= \sigma_1\alpha_1[\mathbf{u}_1] + \sigma_2\alpha_2[\mathbf{u}_2] + \dots + \sigma_n\alpha_n[\mathbf{u}_n] \\ &= \sum_{i=1}^n (\sigma_i\alpha_i)\mathbf{u}_i \quad (2.21) \end{aligned}$$

onde \mathbf{u}_i denota a i -ésima coluna de \mathbf{U} .

Quando $\mathbf{x} = \mathbf{v}_i$, o vetor $[\mathbf{x}]_\beta$ de equação (2.19) é \mathbf{e}_i , o i -ésimo vetor da base canônica, isto é, $\begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 1 & \dots & 0 & 0 \end{bmatrix}$. A equação (2.21), então, é simplificada para:

$$\mathbf{Av}_i = \sigma_i\mathbf{u}_i \quad (2.22)$$

A partir de equação (2.21), é possível escrever:

$$\begin{aligned}
\mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{x} &= [\mathbf{x}]_\beta^T \mathbf{S}^T \mathbf{U}^T \mathbf{U} \mathbf{S} [\mathbf{x}]_\beta \\
&= [\mathbf{x}]_\beta^T \mathbf{S}^2 [\mathbf{x}]_\beta \\
&= \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sigma_n^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_n \end{pmatrix} \\
&= \sum_{i=1}^n \alpha_i^2 \sigma_i^2 \tag{2.23}
\end{aligned}$$

Substituindo equação (2.23) e equação (2.20) na equação (2.18), obtém-se a seguinte equação:

$$\mu(\mathbf{A}, \mathbf{x}) = \frac{\sum_{i=1}^n \alpha_i^2 \sigma_i^2}{\sum_{i=1}^n \alpha_i^2} \tag{2.24}$$

Esta razão é maximizada quando $\alpha_1 \neq 0$ e $\alpha_2 = \dots = \alpha_n = 0$, já que σ_1 é o maior autovalor, o que significa que \mathbf{x} é um múltiplo não nulo de \mathbf{v}_1 (a primeira coluna de \mathbf{V}). Para $\mathbf{x} = \gamma \mathbf{v}_1$ com $\gamma \neq 0$, a partir de equação (2.20) $\mathbf{x}^T \mathbf{x} = \gamma^2$, e a partir da equação (2.23) $\mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = \gamma^2 \sigma_1^2$. Segue, então, que equação (2.24) $\mu(\mathbf{A}, \mathbf{x}) = \sigma_1^2$. Tomando a raiz quadrada, obtém-se:

$$\max_{\mathbf{x} \neq 0} \sqrt{\mu(\mathbf{A}, \mathbf{x})} = \max_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\|\mathbf{A} \mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} = \sigma_1 = \|\mathbf{A}\| \tag{2.25}$$

e o máximo é atingido quando $\mathbf{x} = \gamma \mathbf{v}_1$. Logo, sabendo que $\|\mathbf{A} \mathbf{x}\| \leq \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{x}\|$ (inequação (A.6)), o valor máximo para $\|\mathbf{A} \mathbf{x}\|$ acontecerá quando:

$$\|\mathbf{A} \mathbf{x}\| = \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{x}\| \quad \text{Se somente se} \quad \mathbf{x} = \gamma \mathbf{v}_1 \tag{2.26}$$

O maior valor singular de \mathbf{A} fornece o limite superior para o incremento no comprimento euclidiano de qualquer vetor transformado por \mathbf{A} . Pode-se observar também que a razão $\|\mathbf{A} \mathbf{x}\| / \|\mathbf{x}\|$ é um limite inferior do maior valor singular, já que $\frac{\|\mathbf{A} \mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} = \sigma_1$.

Por outro lado, o menor valor possível da razão $\mu(\mathbf{A}, \mathbf{x})$ ocorre quando \mathbf{x} é um múltiplo não nulo de \mathbf{v}_n (a última coluna de \mathbf{V}), isto é:

$$\min_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\|\mathbf{A} \mathbf{x}\|_2}{\|\mathbf{x}\|_2} = \sigma_n \quad \text{Se somente se} \quad \mathbf{x} = \gamma \mathbf{v}_n, \gamma \neq 0 \tag{2.27}$$

Se k menores valores singulares de \mathbf{A} são iguais, então qualquer combinação linear de k colunas de \mathbf{V} também irá produzir uma razão mínima em equação (2.27). Para uma matriz não singular \mathbf{A} , tem-se um limite inferior para a redução relativa no comprimento euclidiano de qualquer vetor não nulo transformado por \mathbf{A} . Assim como no máximo na equação (2.25), a

propriedade da equação (2.27) implica que a razão $\frac{\|\mathbf{Ax}\|}{\|\mathbf{x}\|}$ para qualquer vetor \mathbf{x} não nulo é um limite superior sobre o menor valor singular de \mathbf{A} .

A análise anterior mostra que as colunas de \mathbf{V} a partir do SVD de \mathbf{A} fornece um conjunto de vetores ordenados:

$$\sigma_1 = \frac{\|\mathbf{Av}_1\|}{\|\mathbf{v}_1\|} \geq \frac{\|\mathbf{Av}_2\|}{\|\mathbf{v}_2\|} \geq \dots \geq \frac{\|\mathbf{Av}_n\|}{\|\mathbf{v}_n\|} = \sigma_n \quad (2.28)$$

A primeira e última colunas de \mathbf{V} evidenciam as transformações extremas quando um vetor \mathbf{x} é transformado por \mathbf{A} . O SVD também determina a decomposição da matriz inversa. Sendo \mathbf{U} e \mathbf{V} matrizes ortogonais e \mathbf{S} diagonal, tem-se

$$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{VS}^{-1}\mathbf{U}^T \quad (2.29)$$

Os valores singulares de \mathbf{A}^{-1} são os recíprocos aos valores singulares de \mathbf{A} . Devido ao fato dos valores singulares serem positivos, pode-se verificar que o maior valor singular de \mathbf{A}^{-1} é $1/\sigma_n$, e o menor é $1/\sigma_1$, e as regras de ortogonalidade de \mathbf{U} e \mathbf{V} são inversas.

Tomando por base equação (2.19), é possível escrever:

$$\begin{aligned} \mathbf{Ax} &= \mathbf{VS}^{-1}\mathbf{U}^T(\mathbf{U}([\mathbf{x}]_\beta)) \\ &= \mathbf{VS}^{-1}[\mathbf{x}]_\beta \\ &= \underbrace{\begin{pmatrix} v_{11} & v_{12} & \dots & v_{1k} \\ v_{21} & v_{22} & \dots & v_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{n1} & v_{n2} & \dots & v_{nk} \end{pmatrix}}_{\mathbf{V}} \underbrace{\begin{pmatrix} 1/\sigma_n & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1/\sigma_{n-1} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1/\sigma_1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{S}^{-1}} \underbrace{\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix}}_{[\mathbf{x}]_\beta} \\ &= \begin{pmatrix} v_{11}(1/\sigma_n) & v_{12}(1/\sigma_{n-1}) & \dots & v_{1k}(1/\sigma_1) \\ v_{21}(1/\sigma_n) & v_{22}(1/\sigma_{n-1}) & \dots & v_{2k}(1/\sigma_1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{n1}(1/\sigma_n) & v_{n2}(1/\sigma_{n-1}) & \dots & v_{nk}(1/\sigma_1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} v_{11}(1/\sigma_n)\alpha_1 + v_{12}(1/\sigma_{n-1})\alpha_2 + \dots + v_{1k}(1/\sigma_1)\alpha_n \\ v_{21}(1/\sigma_n)\alpha_1 + v_{22}(1/\sigma_{n-1})\alpha_2 + \dots + v_{2k}(1/\sigma_1)\alpha_n \\ \vdots \\ v_{n1}(1/\sigma_n)\alpha_1 + v_{n2}(1/\sigma_{n-1})\alpha_2 + \dots + v_{nk}(1/\sigma_1)\alpha_n \end{pmatrix} \\ &= (1/\sigma_n)\alpha_1[\mathbf{v}_1] + (1/\sigma_{n-1})\alpha_2[\mathbf{v}_2] + \dots + (1/\sigma_1)\alpha_n[\mathbf{v}_n] \\ &= \sum_{i=1}^n ((1/\sigma_{n+1-i})\alpha_i)\mathbf{v}_i \end{aligned}$$

Se $\mathbf{x} = \mathbf{v}_i$, é possível escrever, lembrando que nesse caso o vetor $[\mathbf{x}]_\beta$ é o i -ésimo \mathbf{e}_i vetor unitário:

$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{v}_i = \frac{1}{\sigma_i}\mathbf{v}_i \quad (2.31)$$

conhecendo, a partir de equação (2.23), que $\mathbf{x}^T \mathbf{A}^{-T} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{x} = [\mathbf{x}_\beta]^T \mathbf{S}^{-2} [\mathbf{x}_\beta] = \sum_{i=1}^n \alpha_i^2 (\frac{1}{\sigma_i})^2$ e executando o mesmo procedimento da equação (2.25) e da equação (2.26) tem-se:

$$\max_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\|\mathbf{A}^{-1}\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} = \|\mathbf{A}^{-1}\| = \frac{1}{\sigma_n} \quad (2.32)$$

O valor máximo é atingido quando $\mathbf{x} = \gamma \mathbf{v}_n$. Combinando equação (2.32), equação (2.25) e equação (2.13), é possível obter:

$$\text{cond}(A) = \frac{\sigma_1}{\sigma_n} \quad (2.33)$$

ou seja, a razão entre o maior e o menor autovalor da matriz \mathbf{A} determina o condicionamento da matriz \mathbf{A} .

2.4 Ortogonalização

Como mencionado anteriormente, a base de compostos possui propriedades que afetam o condicionamento, tais como contagens espectrais correlacionadas e diferenças de magnitude entre os diversos compostos. Uma idéia para minimizar esse problema é encontrar uma base ortogonal, similar à base de compostos, pelo processo de ortogonalização de Gram-Schmidt.

Definição 2.6 (Conjunto ortogonal). (ANTON; RORRES (2001)) Um conjunto $S = \{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n\}$ é dito **ortogonal** se dois vetores distintos em S são ortogonais, isto é, se $\mathbf{u}_i \bullet \mathbf{u}_j = 0$ para $i \neq j$. Conjunto ortonormal de vetores é um conjunto ortogonal de vetores unitários, isto é, $S = \{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n\}$ é ortonormal se $\mathbf{u}_i \bullet \mathbf{u}_j = 0$ para $i \neq j$ e $\mathbf{u}_i \bullet \mathbf{u}_i = 1$ para $i = 1, 2, \dots, k$

O conjunto $\mathbf{x}_1 = (1, 0, 2)$, $\mathbf{x}_2 = (-2, 0, 1)$, $\mathbf{x}_3 = (0, 1, 0)$, é ortogonal em \mathbb{R}^3 . Já os vetores $\mathbf{u}_1 = (\frac{1}{\sqrt{5}}, 0, \frac{2}{\sqrt{5}})$ e $\mathbf{u}_2 = (-\frac{2}{\sqrt{5}}, 0, \frac{1}{\sqrt{5}})$ são vetores unitários com mesma direção e mesmo sentido que \mathbf{x}_1 e \mathbf{x}_2 , respectivamente. Sendo \mathbf{x}_3 unitário, $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{x}_3\}$ é um conjunto ortonormal. A base canônica $\{(1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1)\}$ é um conjunto ortonormal no \mathbb{R}^3

Teorema 2.2 (Ortogonalidade, LI). (ANTON; RORRES (2001)) Seja $S = \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_k$ um conjunto de vetores não nulos e ortogonal em \mathbb{R}^n . Então S é linearmente independente.

Demonstração

Considere a seguinte equação:

$$r_1 \mathbf{u}_1 + r_2 \mathbf{u}_2 + \dots + r_k \mathbf{u}_k = 0$$

fazendo o produto interno dos dois lados com \mathbf{u}_i , $1 \leq i \leq k$ tem-se:

$$(r_1 \mathbf{u}_1 + r_2 \mathbf{u}_2 + \dots + r_k \mathbf{u}_k) \bullet \mathbf{u}_i = \vec{0} \bullet \mathbf{u}_i$$

pela propriedade distributiva do produto escalar, o lado esquerdo torna-se:

$$r_1(\mathbf{u}_1 \bullet \mathbf{u}_i) + r_2(\mathbf{u}_2 \bullet \mathbf{u}_i) + \dots + r_k(\mathbf{u}_k \bullet \mathbf{u}_i) = \vec{0}$$

Como $\mathbf{u}_i \bullet \mathbf{u}_j = \vec{0}$ para todos $i \neq j$ fica:

$$r_i(\mathbf{u}_i \bullet \mathbf{u}_i) = r_i \|\mathbf{u}_i\|^2 = 0$$

como $\|\mathbf{u}_i\| \neq 0$, pois $\mathbf{u}_i \neq \vec{0}$, implica que $r_i = 0$, $1 \leq i \leq k$, e S é linearmente independente.

Teorema 2.3 (Processo de ortogonalização de Gram-Schmidt). (*ANTON; RORRES (2001)*)

Seja W um subespaço não nulo de \mathbb{R}^n com base $S = \{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_m\}$. Então, existe uma base ortonormal tal que $\{\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \dots, \mathbf{w}_m\} = \{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_m\}$

Demonstração Escolhe-se qualquer vetor em S , por exemplo, \mathbf{u}_1 , e denomine-o por \mathbf{v}_1 . Então, $\mathbf{v}_1 = \mathbf{u}_1$. Procura-se um vetor \mathbf{v}_2 no subespaço W_1 de W gerado por $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2\}$ que é ortogonal a \mathbf{v}_1 . Como $\mathbf{v}_1 = \mathbf{u}_1$, W_1 também é gerado por $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{u}_2\}$. Então:

$$\mathbf{v}_2 = r_1 \mathbf{v}_1 + r_2 \mathbf{u}_2$$

serão determinados os valores de r_1 e r_2 de modo que $\mathbf{v}_1 \bullet \mathbf{v}_2 = 0$

$$0 = \mathbf{v}_2 \bullet \mathbf{v}_1 = (r_1 \mathbf{v}_1 + r_2 \mathbf{u}_2) \bullet \mathbf{v}_1 = r_1(\mathbf{v}_1 \bullet \mathbf{v}_1) + r_2(\mathbf{u}_2 \bullet \mathbf{v}_1)$$

resolvendo para r_1 e r_2 , obtém-se, lembrando que $\mathbf{v}_1 \neq 0$:

$$r_1 = -r_2 \frac{\mathbf{u}_2 \bullet \mathbf{v}_1}{\mathbf{v}_1 \bullet \mathbf{v}_1}$$

dando um valor arbitrário para r_2 , tem-se:

$$r_1 = -\frac{\mathbf{u}_2 \bullet \mathbf{v}_1}{\mathbf{v}_1 \bullet \mathbf{v}_1}$$

logo

$$\mathbf{v}_2 = r_1 \mathbf{v}_1 + r_2 \mathbf{u}_2 = \mathbf{u}_2 - \left(\frac{\mathbf{u}_2 \bullet \mathbf{v}_1}{\mathbf{v}_1 \bullet \mathbf{v}_1} \right) \mathbf{v}_1$$

tem-se, então, um conjunto ortogonal $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2\}$ do subespaço W (Figura 2.1).

A seguir será determinado um vetor \mathbf{v}_3 no subespaço W_2 gerado por $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3\}$ que é ortogonal a \mathbf{v}_1 e a \mathbf{v}_2 . É claro que W_2 também é gerado por $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{u}_3\}$ (isso se deve ao fato que $\mathbf{v}_1 = \mathbf{u}_1$, e que \mathbf{u}_2 pode ser escrito como função de \mathbf{v}_2 e \mathbf{v}_1). Então:

$$\mathbf{v}_3 = s_1 \mathbf{v}_1 + s_2 \mathbf{v}_2 + s_3 \mathbf{u}_3$$

Determina-se, então, os valores de s_1 e s_2 tais que:

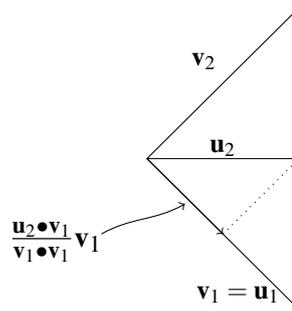


Figura 2.1: ortogonalização de dois vetores

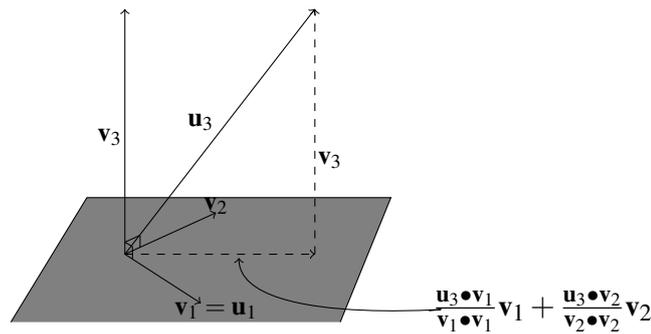


Figura 2.2: ortogonalização de tres vetores

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_3 \bullet \mathbf{v}_1 &= 0 \\ \mathbf{v}_3 \bullet \mathbf{v}_2 &= 0 \end{aligned}$$

tem-se que:

$$\begin{aligned} 0 &= \mathbf{v}_3 \bullet \mathbf{v}_1 = (s_1 \mathbf{v}_1 + s_2 \mathbf{v}_2 + s_3 \mathbf{u}_3) \bullet \mathbf{v}_1 = s_1 (\mathbf{v}_1 \bullet \mathbf{v}_1) + s_3 (\mathbf{u}_3 \bullet \mathbf{v}_1) \\ 0 &= \mathbf{v}_3 \bullet \mathbf{v}_2 = (s_1 \mathbf{v}_1 + s_2 \mathbf{v}_2 + s_3 \mathbf{u}_3) \bullet \mathbf{v}_2 = s_2 (\mathbf{v}_2 \bullet \mathbf{v}_2) + s_3 (\mathbf{u}_3 \bullet \mathbf{v}_2) \end{aligned}$$

usando a propriedade de que o produto interno entre vetores ortogonais é nulo. Lembrando que $\mathbf{v}_2 \neq 0$

$$s_1 = -s_3 \frac{\mathbf{u}_3 \bullet \mathbf{v}_1}{\mathbf{v}_1 \bullet \mathbf{v}_1} \quad \text{e} \quad s_2 = -s_3 \frac{\mathbf{u}_3 \bullet \mathbf{v}_2}{\mathbf{v}_2 \bullet \mathbf{v}_2}$$

fazendo $s_3 = 1$

$$s_1 = -\frac{\mathbf{u}_3 \bullet \mathbf{v}_1}{\mathbf{v}_1 \bullet \mathbf{v}_1} \quad \text{e} \quad s_2 = -\frac{\mathbf{u}_3 \bullet \mathbf{v}_2}{\mathbf{v}_2 \bullet \mathbf{v}_2}$$

tem-se, então, um conjunto $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3\}$ de W (Figura 2.3)

Se for necessário um vetor, \mathbf{v}_4 , no subespaço W_3 de W , gerado por $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3, \mathbf{u}_4\}$, ortogonal a $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3$, pode-se escrever:

$$\mathbf{v}_4 = \mathbf{u}_4 - \left(\frac{\mathbf{u}_4 \bullet \mathbf{v}_1}{\mathbf{v}_1 \bullet \mathbf{v}_1} \right) \mathbf{v}_1 - \left(\frac{\mathbf{u}_4 \bullet \mathbf{v}_2}{\mathbf{v}_2 \bullet \mathbf{v}_2} \right) \mathbf{v}_2 - \left(\frac{\mathbf{u}_4 \bullet \mathbf{v}_3}{\mathbf{v}_3 \bullet \mathbf{v}_3} \right) \mathbf{v}_3$$

esse processo continua até obter um conjunto ortogonal $T = \{v_1, v_2, \dots, v_m\}$ de m vetores. Então, T é uma base para W . Se normalizarmos v_i , ou seja:

$$w_i = \frac{1}{\|v_i\|} v_i$$

a base será ortonormal. O processo de construção das bases ortogonalizadas por Gram-Schmidt pode ser descrito, iterativamente:

1. Escolha um vetor v_1 , de uma determinada base, e o atribua ao primeiro vetor da base ortogonalizada u_1 .
2. Determine os vetores v_2, v_3, \dots, v_n , sucessivamente, um de cada vez, pela fórmula:

$$v_i = u_i - \left(\frac{u_i \bullet v_1}{v_1 \bullet v_1} \right) v_1 - \left(\frac{u_i \bullet v_2}{v_2 \bullet v_2} \right) v_2 - \dots - \left(\frac{u_i \bullet v_{i-1}}{v_{i-1} \bullet v_{i-1}} \right) v_{i-1}$$

o conjunto de vetores $T = \{v_1, v_2, \dots, v_m\}$ é um conjunto ortogonal.

3. seja

$$w_i = \frac{1}{\|v_i\|} v_i$$

a normalização dos vetores obtidos no passo anterior, então $T = \{w_1, w_2, \dots, w_m\}$ é uma base ortonormal para W .

2.5 Mínimos Quadrados

Um sistema linear $m \times n$, $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, é dito inconsistente se não tiver solução. Sistemas de equações lineares inconsistentes aparecem em muitas situações e é importante determinar uma aproximação de solução para tais sistemas. A principal abordagem consiste em mudar o problema, de modo que a equação $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ não precise ser refeita. Esse mesmo tratamento será dado ao problema enfrentado no presente trabalho. Um sistema linear $m \times n$, $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, é consistente se e somente se \mathbf{b} pertence ao subespaço gerado pelas colunas de A .

Teorema 2.4. (solução sistema linear(KOLMAN (2006))) Representando o posto de uma matriz A por $r(A)$, o sistema linear $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ tem solução se e somente se $r(A) = r([\mathbf{A}:\mathbf{b}])$, isto é, se, e somente se, os postos da matriz de coeficientes A e da matriz aumentada $[\mathbf{A}:\mathbf{b}]$ são iguais.

Demonstração. A é uma matriz $m \times n$, então o sistema linear pode ser escrito como:

$$x_1 \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{bmatrix} + x_2 \begin{bmatrix} a_{12} \\ a_{22} \\ \vdots \\ a_{m2} \end{bmatrix} + \dots + x_n \begin{bmatrix} a_{1n} \\ a_{2n} \\ \vdots \\ a_{mn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix} \quad (2.34)$$

supondo que $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ tem solução, existem valores de x_1, x_2, \dots, x_n que satisfazem a equação (2.34). Logo, \mathbf{b} é uma combinação linear das colunas de \mathbf{A} , e pertence ao espaço coluna de \mathbf{A} . Então, posto de $\mathbf{A} =$ posto de $[\mathbf{A} : \mathbf{b}]$. \square

A fim de enunciar o teorema que possibilitará determinar uma aproximação para sistemas de equações lineares inconsistentes, será introduzido o teorema da projeção:

Teorema 2.5. (Teorema da projeção)(ANTON; RORRES (2001)) *Seja W um subespaço de dimensão finita de um espaço V com produto interno, então cada vetor \mathbf{u} de V pode ser expresso precisamente de uma única maneira como:*

$$\mathbf{u} = \mathbf{w}_1 + \mathbf{w}_2 \quad (2.35)$$

onde \mathbf{w}_1 está em W e \mathbf{w}_2 está em W^\perp

Demonstração. O vetor \mathbf{w}_1 do Teorema 2.5 é chamado *projeção ortogonal de \mathbf{u} em W* e é denotado por $\text{proj}_W \mathbf{u}$. O vetor \mathbf{w}_2 é chamado *componente de \mathbf{u} ortogonal a W* e é denotada por $\text{proj}_{W^\perp} \mathbf{u}$. Assim, a equação (2.35) no teorema da projeção pode ser reformulada como:

$$\mathbf{u} = \text{proj}_W \mathbf{u} + \text{proj}_{W^\perp} \mathbf{u} \quad (2.36)$$

$$\text{proj}_{W^\perp} \mathbf{u} = \mathbf{u} - \text{proj}_W \mathbf{u} \quad (2.37)$$

e a equação (2.36) pode ser escrita como:

$$\mathbf{u} = \text{proj}_W \mathbf{u} + (\mathbf{u} - \text{proj}_W \mathbf{u}) \quad (2.38)$$

\square

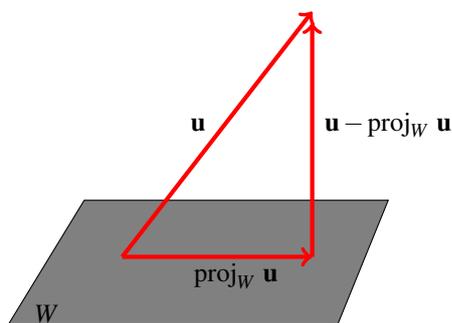


Figura 2.3: Projeção de um vetor no subespaço W

Procura-se um vetor $\hat{\mathbf{x}}$ em \mathbb{R}^n tal que $\mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}$ esteja mais próximo possível da solução \mathbf{b} . Sendo o espaço coluna de \mathbf{A} dado por W , então:

Teorema 2.6. (Vetor mais próximo de um subespaço)(ANTON; RORRES (2001))

Sejam W e \mathbf{v} , respectivamente, um subespaço e um vetor de \mathbb{R}^n . O vetor $\mathbf{w} \in W$ tal que $\|\mathbf{v} - \mathbf{w}\|$ é mínimo é a projeção de \mathbf{v} sobre W :

$$\mathbf{w} = \text{proj}_W \mathbf{v} \quad (2.39)$$

Diz-se que \mathbf{w} , neste caso, é o “vetor de W mais próximo de \mathbf{v} ”.

Demonstração. seja \mathbf{w} um vetor qualquer em W . Então:

$$\mathbf{v} - \mathbf{w} = ((\mathbf{v} - \text{proj}_W \mathbf{v}) + (\text{proj}_W (\mathbf{v} - \mathbf{w}))) \quad (2.40)$$

estando \mathbf{w} e $\text{proj}_W \mathbf{v}$ em W , $\text{proj}_W (\mathbf{v} - \mathbf{w})$ está em W . Antes de dar continuidade a equação (2.40), será provado que $\mathbf{v} - \text{proj}_W \mathbf{v}$ é ortogonal a todos os vetores em W (A prova está na equação (2.41), considerando que o vetor \mathbf{w} pode ser gerado por uma base $S = \{\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \dots, \mathbf{w}_m\}$ e que $\mathbf{w}_i \bullet \mathbf{w}_j = 0$, $i \neq j$, e $\mathbf{w}_i \bullet \mathbf{w}_i = 1$, $1 \leq i \leq m$. Considera-se também que: $\mathbf{w} = (\mathbf{v} \bullet \mathbf{w}_1)\mathbf{w}_1 + (\mathbf{v} \bullet \mathbf{w}_2)\mathbf{w}_2 + \dots + (\mathbf{v} \bullet \mathbf{w}_m)\mathbf{w}_m$, tem-se, para um vetor $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$):

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= \mathbf{v} - \mathbf{w} \\ \mathbf{u} \bullet \mathbf{w}_i &= (\mathbf{v} - \mathbf{w}) \bullet \mathbf{w}_i \\ \mathbf{u} \bullet \mathbf{w}_i &= \mathbf{v} \bullet \mathbf{w}_i - \mathbf{w} \bullet \mathbf{w}_i \\ \mathbf{u} \bullet \mathbf{w}_i &= \mathbf{v} \bullet \mathbf{w}_i - [(\mathbf{v} \bullet \mathbf{w}_1)\mathbf{w}_1 + (\mathbf{v} \bullet \mathbf{w}_2)\mathbf{w}_2 + \dots + (\mathbf{v} \bullet \mathbf{w}_m)\mathbf{w}_m] \bullet \mathbf{w}_i \\ \mathbf{u} \bullet \mathbf{w}_i &= \mathbf{v} \bullet \mathbf{w}_i - (\mathbf{v} \bullet \mathbf{w}_i)(\mathbf{w}_i \bullet \mathbf{w}_i) \\ \mathbf{u} \bullet \mathbf{w}_i &= 0. \end{aligned} \quad (2.41)$$

comprovando que qualquer vetor $\mathbf{v} - \text{proj}_W \mathbf{v}$, $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$, é ortogonal a todos os vetores em W . Lembrando que os vetores $[(\mathbf{v} - \text{proj}_W \mathbf{v}) \bullet (\text{proj}_W \mathbf{v} - \mathbf{w})]$ são ortogonais, é possível retorna à equação (2.40)

$$\begin{aligned} \|\mathbf{v} - \mathbf{w}\|^2 &= (\mathbf{v} - \mathbf{w}) \bullet (\mathbf{v} - \mathbf{w}) \\ &= ((\mathbf{v} - \text{proj}_W \mathbf{v}) + (\text{proj}_W \mathbf{v} - \mathbf{w})) \bullet ((\mathbf{v} - \text{proj}_W \mathbf{v}) + (\text{proj}_W \mathbf{v} - \mathbf{w})) \\ &= \|\mathbf{v} - \text{proj}_W \mathbf{v}\|^2 + \|\text{proj}_W \mathbf{v} - \mathbf{w}\|^2 \end{aligned} \quad (2.42)$$

Se $\mathbf{w} \neq \text{proj}_W \mathbf{v}$, então $\|\text{proj}_W \mathbf{v} - \mathbf{w}\|^2$ é positivo e :

$$\|\mathbf{v} - \mathbf{w}\|^2 > \|\mathbf{v} - \text{proj}_W \mathbf{v}\|^2 \quad (2.43)$$

tem-se, então, que $\text{proj}_W \mathbf{v}$ é o vetor em W que minimiza $\|\mathbf{v} - \mathbf{w}\|^2$. Logo, minimiza $\|\mathbf{v} - \mathbf{w}\|$ \square

Demonstração. Uma outra maneira de se pensar o Teorema 2.6 é pressupor, para cada vetor \mathbf{w} de W ;

$$\mathbf{u} - \mathbf{w} = \{\mathbf{u} - \text{proj}_W \mathbf{u}\} + \{\text{proj}_W \mathbf{u} - \mathbf{w}\} \quad (2.44)$$

Sendo uma diferença de vetores de W , $\text{proj}_W (\mathbf{u} - \mathbf{w})$ está em W e $\mathbf{u} - \text{proj}_W \mathbf{u}$ é ortogonal a W , de modo que dois termos à direita da equação (2.44) são ortogonais. Pelo teorema de Pitágoras:

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{w}\|^2 = \|\mathbf{u} - \text{proj}_W \mathbf{u}\|^2 + \|\text{proj}_W \mathbf{u} - \mathbf{w}\|^2 \quad (2.45)$$

se $\mathbf{w} \neq \text{proj}_W \mathbf{u}$, então o segundo termo nesta soma é positivo, e, portanto:

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{w}\|^2 > \|\mathbf{u} - \text{proj}_W \mathbf{u}\|^2 \quad (2.46)$$

ou, equivalentemente:

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{w}\| > \|\mathbf{u} - \text{proj}_W \mathbf{u}\| \quad (2.47)$$

□

O vetor em W mais próximo de \mathbf{b} é $\text{proj}_W \mathbf{b}$, isto é, $\|\mathbf{b} - \mathbf{w}\|$, para \mathbf{w} em W , é mínimo quando $\mathbf{w} = \text{proj}_W \mathbf{b}$. Então, ao encontrar um vetor $\hat{\mathbf{x}}$ tal que $\mathbf{A}\hat{\mathbf{x}} = \text{proj}_W \mathbf{b}$, tem-se a certeza que $\|\mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}\|$ é o menor possível. Sabendo que $\mathbf{b} - \text{proj}_W \mathbf{b} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}$ é ortogonal a todos os vetores em W (equação (2.41)), tem-se, então, que $\mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}$ é ortogonal a cada coluna de \mathbf{A} . Em termos de equação matricial, tem-se:

$$\mathbf{A}^T (\mathbf{A}\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b}) = \mathbf{0} \quad (2.48)$$

ou, equivalentemente:

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{A}^T \mathbf{b} \quad (2.49)$$

Qualquer solução de 2.49 é chamada de **aproximação por mínimos quadrados** para o sistema linear $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$. Se \mathbf{A} for invertível, uma aproximação por mínimos quadrados para $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ é simplesmente a solução usual $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$, já que $\hat{\mathbf{x}} = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{b} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{A}^{-T} \mathbf{A}^T \mathbf{b} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}$.

Teorema 2.7. (posto e solução por mínimos quadrados) (KOLMAN (2006)) Se $\mathbf{A}_{m \times n}$ é uma matriz $r(\mathbf{A}) = n$, então $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ é invertível e o sistema linear $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ tem uma única aproximação por mínimos quadrados dada por $\hat{\mathbf{x}} = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{b}$, isto é, o sistema normal de equações tem uma única solução.

Demonstração. Considerando $r(\mathbf{A})$ o posto da matriz \mathbf{A} . Se $r(\mathbf{A}) = n$, então as colunas de \mathbf{A} são linearmente independentes. A matriz $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ é invertível desde que o sistema linear $\mathbf{A}^T \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{0}$ tenha apenas a solução trivial. Multiplicando ambos lados de $\mathbf{A}^T \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{0}$ por \mathbf{x}^T à esquerda, obtém-se:

$$\mathbf{0} = \mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{A}\mathbf{x} = (\mathbf{A}\mathbf{x})^T (\mathbf{A}\mathbf{x}) = (\mathbf{A}\mathbf{x}) \bullet (\mathbf{A}\mathbf{x}) \quad (2.50)$$

sabendo, a partir das propriedades do produto interno, que $\mathbf{u} \bullet \mathbf{u} > 0$ para $\mathbf{u} \neq \mathbf{0}$; $\mathbf{u} \bullet \mathbf{u} = 0$ se e somente se $\mathbf{u} = \mathbf{0}$, tem-se que $\mathbf{Ax} = \mathbf{0}$. Isso implica que há uma combinação linear nula das colunas linearmente independentes de \mathbf{A} , logo $\mathbf{x} = \mathbf{0}$, solução trivial. Portanto, $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ é invertível e a aproximação por mínimos quadrados tem solução única dada por $\hat{\mathbf{x}} = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{b}$ \square

2.6 Independencia linear dos dados usados

Nesta seção, irá ser abordada uma particularidade dos dados utilizados no trabalho. Na Figura 2.4, um gráfico traz informações de contagem espectral como função da frequência. Os

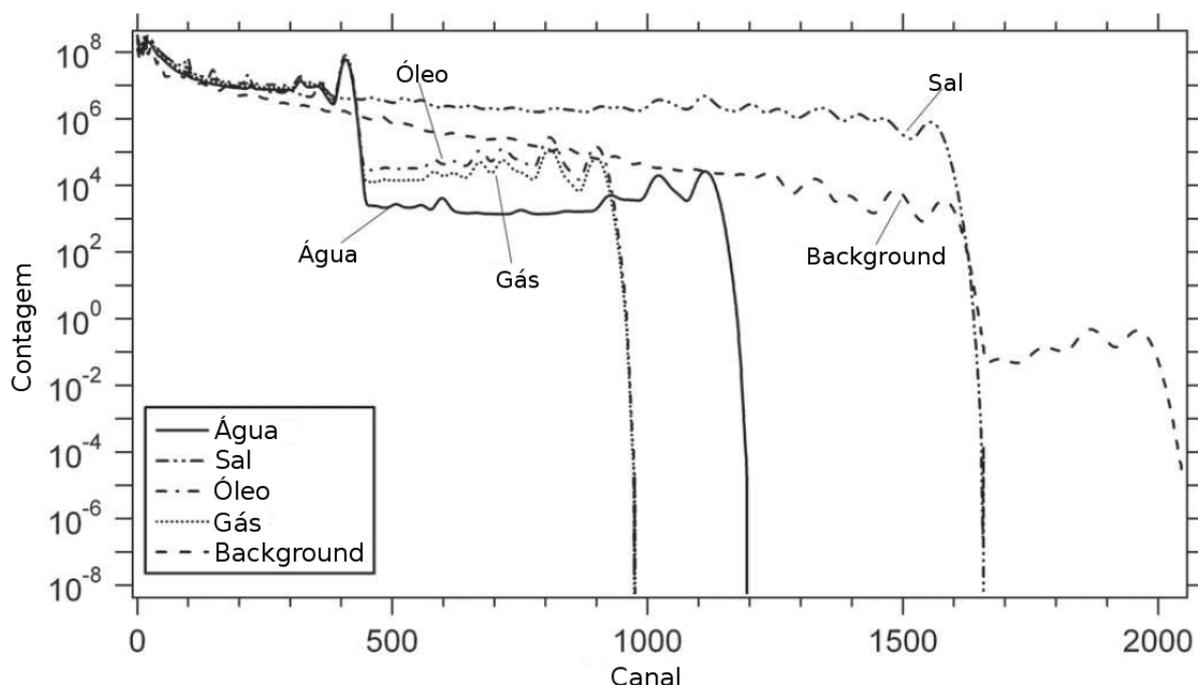


Figura 2.4: Contagem espectral em função dos canais de frequência para água, óleo, sal, gás e background . [MERIC \(2012\)](#)

compostos básicos descritos geram um determinado subespaço de funções. Se uma determinada função, que descreve a contagem espectral da amostra, pertence ao subespaço gerado pelos compostos básicos da Figura 2.4, então ela pode ser escrita como uma combinação desses compostos, isso para qualquer intervalo de frequências (ou canais). Assume-se, então, que os espectros são linearmente independentes. Um outro motivo que pode vir a justificar esse argumento de independência linear dos compostos básicos são valores de frequência em que os diferentes compostos se anulam, como pode se perceber na Figura 2.4.

2.7 Monte Carlo Library Least Squares-MCLLS

A amostra de interesse é exposta a nêutrons térmicos ou rápidos e o resultado do espectro dos raios gama é examinado. A análise dos raios gama implica identificar os fotopicos presentes

no espectro (MOLNAR (2004)). As energias desses fotopicos irão revelar que elementos estão presentes na amostra. A identificação dos fotopicos e dos correspondentes elementos é feita comparando o espectro adquirido com dados padrões de raios gama. Dentre as desvantagens da análise dos fotopicos, pode-se enumerar: o espectro adquirido pode ter alto nível de complexidade (Um constituinte de uma amostra pode ter uma elevada captura de nêutrons térmicos, causando distorção no espectro adquirido, além de que um espectro de raios gama pode ter várias linhas, aumentando a probabilidade de erro na análise); o espectrômetro usado pode contribuir para distorções no espectro.

Um método alternativo, *library least squares* (LLS), é utilizado para análise quantitativa, com grande sucesso de aplicabilidade no estudo de PGNA (WANG; LI; GARDNER (2008), SHYU; GARDNER; VERGHESE (1993)). A principal suposição da técnica LLS é que a taxa total de contagem do espectro desconhecido, para n compostos, pode ser dada como uma combinação linear das taxas de contagem dos espectros individuais presentes na amostra.

$$R_i = \sum_{j=1}^n \alpha_j R_{j,i} + e_i \quad (2.51)$$

onde R_i é a taxa de contagem no i -ésimo canal do espectro da amostra desconhecida, $R_{j,i}$ é a taxa de contagem no i -ésimo canal do j -ésimo componente, α_j é o multiplicador do j -ésimo componente e e_i é o erro no i -ésimo canal.

O LLS tem as seguintes vantagens comparativamente à análise simples dos fotopicos:

1. picos que se sobrepõem ao se sobreporem podem ser utilizados.
2. O espectro inteiro do prompt gama é usado
3. Resíduos podem revelar se estão faltando bibliotecas.
4. O desvio padrão das frações em massa são estimados diretamente.

A desvantagem é que o LLS exige que as bibliotecas de raios gama estejam disponíveis para executar a procura. O LLS também assume linearidade entre as taxas de contagem no espectro desconhecido e nas bibliotecas individuais. O LLS não pode, então, ser aplicada diretamente para análise quantitativa, já que o PGNA é inerentemente não linear, ou seja, a contribuição de um espectro de biblioteca de cada constituinte irá depender não apenas da quantidade presente de um único constituinte mas também das quantidades de cada outro constituinte que compõe a amostra de interesse. A utilização do MCLLS trata essas questões não lineares através da geração de espectros de biblioteca proposto por SHYU; GARDNER; VERGHESE (1993). A abordagem do MCLLS pode ser resumido da seguinte maneira:

1. Considere uma composição inicial da amostra.
2. Execute simulações Monte Carlo para obter os espectros de biblioteca de cada constituinte.

3. Calcule pelo LLS os coeficientes de ajuste, mediante normalização. Retornar as frações em peso dos elementos na amostra.
4. No caso dos coeficientes de ajuste estarem distantes da estimativa inicial da composição da amostra, a suposição de linearidade não pode ser feita. Retornar ao passo 2 e iterar novamente simulações Monte Carlo usando os valores LLS calculados como nova composição inicial da amostra.

Uma descrição matemática deste método, que pode ser conferido em [WONG \(1992\)](#). Considerando uma expressão da forma:

$$y(x) = \sum_{k=1}^m a_k f_k(x) \quad (2.52)$$

que é uma relação linear entre $y(x)$, representando a contagem espectral y da amostra desconhecida em algum canal (x), e as variáveis independentes $f_k(x)$, que representam as contagens espectrais dos k constituintes da amostra em diferentes canais x .

A aproximação por mínimos quadrados corresponde à minimização da seguinte grandeza:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} \left\{ y_i - \sum_{k=1}^m a_k f_k(x_i) \right\}^2 \quad (2.53)$$

O mínimo de χ^2 é encontrado igualando a derivada parcial de χ^2 a zero, com respeito aos parâmetros que indicam a fração em peso, chegando-se às seguintes equações:

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_l} = -2 \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} f_l(x_i) \left\{ y_i - \sum_{k=1}^m a_k f_k(x_i) \right\} \quad (2.54)$$

Igualando a zero e realizando algumas manipulações algébricas:

$$\sum_{k=1}^m a_k \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} f_k(x_i) f_l(x_i) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} f_l(x_i) y_i. \quad (2.55)$$

Equação (2.55) representa um conjunto de equações lineares que podem ser dados em notação matricial, resultando em:

$$\sum_{k=1}^m F_{l,k} a_k = H_l. \quad (2.56)$$

De maneira mais abreviada, escreve-se:

$$\mathbf{FA} = \mathbf{H} \quad (2.57)$$

Onde os elementos de \mathbf{F} e \mathbf{H} são dados a seguir:

$$F_{l,k} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} f_k(x_i) f_l(x_i). \quad (2.58)$$

$$H_l = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} f_l(x_i) y_i \quad (2.59)$$

A solução para o sistema equação (2.59) pode ser determinada por:

$$\mathbf{A} = \mathbf{F}^{-1}\mathbf{H}. \quad (2.60)$$

2.8 GRASP

O GRASP é uma metaheurística onde, em cada iteração, uma solução gulosa e aleatória é construída. Aplicações repetidas de busca local em torno da solução corrente tenta instituir uma solução melhor do que a que a repassada pelo processo construtivo. Se nenhuma solução melhor é encontrada nas vizinhanças, a solução corrente é declarada um mínimo local e as buscas cessam. O melhor mínimo local encontrado em todas as iterações do GRASP é a solução indicada como resultado (MATEUS; RESENDE; SILVA (2011)).

As iterações do GRASP são independentes, ou seja, soluções encontradas em iterações anteriores não influenciam a iteração corrente. Ao se fazer uso de soluções encontradas previamente à iteração corrente, pode-se pensar assim em um mecanismo de memória. Um caminho para incorporar memória dentro do GRASP é o *path-relinking* (GLOVER (1997), GLOVER; LAGUNA; MARTÍ (2000)). No GRASP com *path-relinking*, um conjunto com várias soluções de boa qualidade é mantido para ser usado durante cada iteração do GRASP. Após construir uma solução e sujeitá-la a uma busca local, o resultado é submetido a uma combinação com uma solução selecionada aleatoriamente a partir do conjunto elite do GRASP, na tentativa de se encontrar uma solução melhor do que essas duas em todo o espaço compreendido entre elas.

Os conceitos iniciais que deram impulso à pesquisa e desenvolvimento do GRASP encontra-se em FEO; RESENDE (1989), onde foi introduzida uma heurística probabilística.

Definição 2.7. Dados n conjuntos finitos P_1, P_2, \dots, P_n , denota-se os conjuntos I tal que: $I = \cup (P_j : 1 \leq j \leq n) = \{1, \dots, m\}$ e $J = \{1, \dots, n\}$. Um subconjunto J^* de J é chamada uma *cobertura* se $\cup (P_j : j \in J^*) = I$. O problema de conjunto de cobertura é encontrar uma cobertura de cardinalidade mínima. Definindo a matriz $\mathbf{A}_{m \times n}$ constituída de valores 0 ou 1 tal que $a_{ij} = 1$ se e apenas se o elemento $i \in P_j$.

A formulação da programação para o problema de cobertura é:

$$\begin{cases} \text{minimizar } \mathbf{e}_k \cdot \mathbf{x} \\ \text{sujeito a } \mathbf{A}\mathbf{x} \geq \mathbf{e}_m \\ x = \{0, 1\} \end{cases}$$

onde \mathbf{e}_k é um vetor contendo 1, de comprimento k , e \mathbf{x} é um vetor contendo $(0,1)$ de comprimento n com $x_j = 1$ se e apenas se $j \in J^*$. Esse é um problema NP-completo.

em [FEO; RESENDE \(1995\)](#), uma descrição sobre o GRASP o classifica como uma metodologia intuitiva, com forte apelo empírico e de trivial implementação. Técnica de amostragem aleatória, iterativa, e que fornece uma solução para o problema em questão a cada nova repetição. A solução mais adequada ao problema após todas as iterações possíveis é mantida como solução final. Duas fases podem ser identificadas dentro do GRASP: Uma construção inicial, seguida de um procedimento de busca local para a construção de uma melhoria da solução construída inicialmente.

Trabalhos que desenvolvem métodos que não necessitem analisar todas as alternativas possíveis de solução deram origem ao campo de otimização combinatória e tem aumentado a capacidade de resolver cada vez mais problemas do mundo real.

Grande parte dos problemas encontrados nos exemplos acima são computacionalmente intratável devido a sua natureza, por ser demasiadamente grande, de modo a impedir o uso de algoritmos exatos. Métodos heurísticos são usualmente empregados para encontrar boa, mas não necessariamente a solução ótima. A eficácia desses métodos depende de sua capacidade de evitar aprisionamento em mínimos locais e explorar a estrutura básica do problema, como a ordenação natural entre seus componentes. Com base nessas noções, várias técnicas de busca heurística ([KIRKPATRICK \(1984\)](#), [GLOVER \(1989\)](#), [GLOVER; LAGUNA; MARTÍ \(2000\)](#), [GOLBERG \(1989\)](#), [HANSEN; MLADENOVIC \(1999\)](#)) tem sido desenvolvido que comprovadamente melhoram a capacidade de obter boas soluções para problemas de otimização. Uma das técnicas mais promissoras inclui o GRASP ([FEO; RESENDE \(1995\)](#)).

É possível adotar como critério de parada no GRASP um número máximo de iterações ou alguma boa solução encontrada que atenda alguma restrição do problema.

O viés probabilístico de um GRASP é caracterizado por escolher aleatoriamente um dos melhores candidatos na lista (Restricted List Candidates (RCL)), mas não necessariamente o melhor candidato. Esta técnica permite a escolha de diferentes soluções a serem obtidas em cada iteração, ocorrendo, por exemplo, durante a execução da busca local e do *path-relinking*. Nessas duas últimas subrotinas, sempre a continuidade delas se dá por meio da seleção aleatória de elementos presentes em suas respectivas listas.

A justificativa para a busca local é que não se têm garantias que as soluções construídas sejam ótimas em relação às suas vizinhanças. Uma busca local tende a determinar uma solução que seja ótima localmente. A estrutura de vizinhança relaciona uma solução s do problema a um

subconjunto de soluções vizinhas $N(s)$. O sucesso da busca local consiste de uma escolha para a estrutura de vizinhança, técnicas eficientes de busca e da solução a partir da qual a busca se iniciará.

A eficiência da busca local pode vir a melhorar significativamente à medida que a solução inicial melhora, embora o procedimento pode exigir um tempo exponencial a partir de um ponto de partida arbitrário. Uma maneira de contornar esse problema seria na fase de construção produzir boas soluções para a busca local.

Um das desvantagens é analisar formalmente a qualidade dos valores das soluções encontradas usando o GRASP.

Técnica de amostragem repetitiva, cada iteração produz uma provável solução a partir de uma amostra de todas as possíveis soluções que podem surgir a partir de um espaço de soluções. A média e a variância da distribuição são funções da RCL. Se a lista de candidatos é limitado a um único valor, apenas uma solução é produzida e a variância da distribuição será zero. O valor médio das soluções deve atender aos requisitos de qualidade pretendidos, mas abaixo do valor ideal. Quanto maior o número de soluções produzidas, maior são as chances do melhor valor encontrado ser de melhor qualidade que o valor médio.

Em [AIEX; RESENDE; RIBEIRO \(2002\)](#), é feita uma análise de distribuições de probabilidade de tempo para encontrar uma solução alvo em cinco problemas da literatura bem determinados e cujo código fonte é conhecido. Para isso, estimam-se as distribuições de probabilidade, e 12000 iterações independentes da heurística são utilizadas. A implementação do GRASP é em paralelo, dividindo o número de iterações em diversos processadores. Um valor alvo é fornecido para a função objetivo e o algoritmo é executado até o primeiro processador encontrar a solução com um valor tão bom quanto a solução passada como parâmetro no início do algoritmo, tomando-se o cuidado para que duas iterações não iniciem com soluções muito próximas.

Proposição 2.1. ([AIEX; RESENDE; RIBEIRO \(2002\)](#)) *Seja $P_\rho(t)$ a probabilidade de não ter atingido uma determinada solução alvo em t unidades de tempo com ρ processos independentes. Se $P_1(t) = e^{-t/\lambda}$ com $\lambda \in \mathbb{R}^+$, corresponde a uma distribuição exponencial, então $P_\rho(t) = e^{-\rho t/\lambda}$*

A proposição acima segue a partir da definição de uma distribuição exponencial. Implica que a probabilidade de encontrar uma solução de um valor no tempo ρt com ρ processos sequenciais é igual à probabilidade de encontrar uma solução tão boa no tempo t com ρ processos paralelos independentes.

Uma proposição semelhantes pode ser declarada para dois parâmetros de um distribuição exponencial:

Proposição 2.2. ([AIEX; RESENDE; RIBEIRO \(2002\)](#)) *Seja $P_\rho(t)$ ser a probabilidades de não encontrar uma solução em um tempo t com ρ processos independentes. Se $P_1 = e^{-(t-\mu)/\lambda}$*

com $\lambda \in \mathbb{R}^+$ e $\mu \in \mathbb{R}$, isto é, P_1 é uma distribuição exponencial de dois parâmetros, então $P_\rho = e^{-\rho(t-\mu)/\lambda}$.

A mesma observação pode ser feita a partir do enunciado da proposição 1: A probabilidade de encontrar uma solução de um determinado valor no tempo ρt com um processo sequencial é igual a $(1 - e^{-(\rho t - \mu)/\lambda})$, enquanto que a probabilidade de encontrar uma solução, pelo menos tão boa, no tempo t com processos paralelos ρ independentes é $1 - e^{-\rho(t-\mu)/\lambda}$. Se $\mu = 0$, então ambas probabilidades são iguais e correspondem a uma distribuição exponencial não deslocada. Se $\rho\mu \ll \lambda$, então as duas probabilidades são aproximadamente iguais e é possível atingir a solução em um tempo menor pelos processos independentes.

Este comportamento foi observado em uma série de metaheurísticas: [DODD \(1990\)](#), [TEN EIKELDER et al. \(1996\)](#), [BATTITI; TECCHIOLLI \(1992\)](#), [SELMAN; KAUTZ; COHEN \(1994\)](#), [HOOS; STÜTZLE \(1999\)](#).

Uma das principais referências para esse trabalho foram as implementações computacionais contidas em [MATEUS; RESENDE; SILVA \(2011\)](#). Para n instalações fornecidas e m localidades possíveis de serem alocadas, o problema é atribuir cada instalação para um local. Cada instalação demanda uma determinada capacidade da localização, e cada localização tem uma capacidade (fixa) para escoar a produção das unidades fabris. Uma atribuição é viável se cada local tem capacidade suficiente para acomodar as demandas de todas as instalações que lhe são atribuídas. Fluxos não negativos entre os pares de instalações e distâncias não negativas entre os pares de locais, a atribuição sempre será viável sempre que a capacidade local for suficiente para acomodar as demandas de todas as fábricas que lhes são atribuídas.

Denote $N = \{1, \dots, n\}$, o conjunto de unidades a serem atribuídas, e $M = \{1, \dots, m\}$ o conjunto de localizações. Represente por $A_{n \times n} = (a_{ji})$ o fluxo entre as unidades $j \in N$ e $i \in N$, tal que $a_{ji} \in \mathbb{R}^+$ se $j \neq i$ e $a_{ji} = 0$ se for de outro modo. Seja $B_{m \times m} = (b_{kl})$ a distância entre localizações $k \in M$ e $l \in M$, tal que $b_{kl} \in \mathbb{R}^+$ se $k \neq l$, e $b_{kl} = 0$ de outro modo. Sendo $C_{n \times m} = (c_{ij})$, o custo de atribuir a instalação $i \in N$ para a localização $j \in M$, tal que $c_{ij} \in \mathbb{R}^+$. Nomeando algumas variáveis:

- $z, z \in \mathbb{R}^+$, o custo de transporte unitário.
- $q_i, q \in \mathbb{R}^+$, a capacidade demandada pela instalação $i \in N$.
- $Q_j, Q_j \in \mathbb{R}^+$, a capacidade da localização $j \in M$.

as restrições do referido problema, ao tentar encontrar $X_{n \times m} = (x_{ij})$, com $x_{jk} = (0, 1)$, onde a instalação $j \in N$ é atribuída para a localização $k \in M$ se e apenas se $x_{ij} = 1$, são:

$$\begin{aligned}
\sum_{j \in M} x_{ij} &= 1, \forall i \in N, \\
\sum_{i \in N} q_i x_{ij} &\leq Q_j, \forall j \in M, \\
x_{ij} &\in (0, 1) \forall i \in N, \forall j \in M
\end{aligned} \tag{2.61}$$

e a função objetivo pode ser descrita por:

$$\sum_{i \in N} \sum_{j \in M} c_{ij} x_{ij} + z \sum_{j \in N} \sum_{k \in M} \sum_{i \in N, j \neq i} \sum_{l \in M} a_{ji} b_{kl} x_{jk} x_{il}. \tag{2.62}$$

No próximo capítulo, serão apresentadas boas práticas de efetivamente colaboraram para os resultados atingidos no presente trabalho.

3

Condicionamento e o Monte Carlo

3.1 Estado da Arte

No presente trabalho, os dados referentes às bibliotecas espectrais de cada um dos compostos presentes em amostras de água provenientes de poços de produção de petróleo, foram simulados experimentalmente pelo método de Monte Carlo ([GARDNER \(2000\)](#)) e cedidos por um dos autores de [MERIC \(2012\)](#). Esse método foi proposto para analisar os conteúdos de uma amostra de material em PGNAA. A vantagem desse método em gerar os dados necessários para uma amostra de interesse, em oposição ao método experimental, está em poupar uma grande quantidade de trabalho experimental oneroso. A simulação envolve uma combinação do método de Monte Carlo e técnica de interpolação linear para rastrear os raios gama emitidos através de interações de nêutrons com a amostra.

A implementação do algoritmo de Monte Carlo (*Monte Carlo Library Least Squares - MCLLS*) se utiliza de um código específico para a geração das bibliotecas dos compostos presentes na amostra, o CEARPGA ([ZHANG; GARDNER \(2004\)](#)). Esse código incorpora uma variedade de técnicas, tal como forçar todos raios gama serem emitidos depois de uma interação de nêutrons, usando técnicas de valor esperado para aumentar a probabilidade de rastreamento dos raios gama; técnicas de amostragem correlacionada para lidar com pequenas variações de composição da amostra e função de resposta do detector para converter o espectro de raios gama incidente em altura de pulsos.

Em [GARDNER \(2000\)](#), foi utilizada a interpolação linear (Linear Interpolation Approach (ALI)), demonstrando que a abordagem, implementada pelo CEARPGA, é eficaz.

Um conjunto de pseudo raios gama, que representam raios gama reais, são traçados por analogia pelo método de Monte Carlo para estabelecer as tabelas de energia. A incidência de raios gama são tratadas por interpolação linear, seguindo essencialmente as seguintes etapas:

- Escolha do número e da energia dos pseudo raios gama. Nem todos os raios gama emitidos serão seguidos na amostra de interesse, apenas um conjunto de pseudo raios gama são selecionados e controlados para serem representativos de toda a faixa de energia dos raios.

- Acompanhamento dos pseudo raios gama. Cada raio gama é monitorado da partida, até a captura pela amostra, pela abordagem de Monte Carlo. A absorção por efeito fotoelétrico é amostrado implicitamente.
- registrar a pontuação dos pseudo raios gama. A pontuação que um pseudo raio gama tem é o produto do seu peso, acumulado ao longo de seu caminho para o detector, e a eficiência desse detector. A pontuação dos raios gama incidentes são recuperados como um conjunto de tabelas de energias baseadas em energia do pseudo raio gama e a energia incidente. As tabelas contém a energia dos raios gama incidentes em função do escore total.
- Calcular a seção transversal média de captura de nêutrons. Para cada elemento, a seção transversal média de captura de nêutrons precisa ser calculada durante o processo de simulação e será usado posteriormente para ajustar a interpolação do espectro de raios gama incidente. Para o elemento de ordem i na região da amostra, a seção transversal média, $\mu_{n,r}^i$, é calculado da seguinte forma:

$$\mu_{n,r}^i = \frac{\sum_j w_j^i \mu_j^i}{\sum_j w_j^i}$$

onde μ_j^i é a seção transversal de captura de nêutrons do elemento i para o nêutron de ordem j na amostra, w_j^i é o fator de ponderação do nêutron no j -ésimo nêutron capturado.

- interpolação dos espectros de todos os raios gama de interesse. Espectros de raios gama resultante da captura de nêutrons e decaimento de isótopos na amostra são obtidos por meio de interpolação linear ao final da completa simulação de Monte Carlo, após o estabelecimento de um conjunto de tabelas de energia.

Simulação de Monte Carlo determina o rastreamento do transporte de nêutrons e dos raios gama associados. Esquemas de amostragem de nêutrons são bem documentados em [CARTER; CASHWELL \(1975\)](#). Cada nêutron inicia com amostragem de energia e direção de emissão a partir da fonte, sendo então rastreado no sistema analisador. No intuito de reduzir a variação de espectros espalhados inelasticamente, a primeira interação de um nêutron é forçada para espalhamento inelástico se a seção transversal do elemento escolhido é maior que zero. A captura da interação radioativa é sempre registrada se o nêutron amostrado tem até 10 interações na região da amostra. Não é permitido ao nêutron de interesse abandonar o sistema, a fim de aumentar a eficiência do rastreio. Ao se aproximar dos limites do sistema, a função densidade de probabilidade é amostrada de modo a garantir que próxima posição de interação mantenha-se dentro dos limites do sistema. O nêutron é encerrado apenas se o seu peso está abaixo de um valor de corte especificado (pela abordagem roleta russa).

Cinco tipos de fontes de raios gama são considerados na simulação do PGNA. Pode-se destacar: Raios gama emitidos pela captura de nêutrons; pela interação inelástica com a amostra considerada; por fissão da fonte de nêutrons; decaimentos de isótopos e radiação de fundo (*background*). Já na simulação do código CEARPGA, os raios gama são divididos em 12 categorias:

1. raios gama a partir de nêutron capturado por interação com regiões da amostra.
2. Decaimento de isótopos da amostra.
3. raios gama a partir de espalhamento inelástico na amostra.
4. raios gama a partir de interações de capturas em outras regiões que não necessariamente a amostra.
5. raios gama a partir de espalhamento inelástico em regiões que não a da amostra.
6. Raios gama a partir de reações de fissão na fonte.
7. Raios gama a partir da radiação de fundo devido ao decaimento do ^{40}K
8. Raios gama, a partir da radiação de fundo, provenientes do decaimento do Th.
9. Raios gama, a partir da radiação de fundo, provenientes do decaimento do U.
10. Raios gama a partir do I e Na do detector de NaI.
11. Raios gama a partir do ^{24}Na resultantes da ativação do detector NaI.
12. Raios gama a partir do ^{128}I resultante da ativação do detector de NaI.

Os raios gama citados acima podem ser tratados de diferentes maneiras. Raios gama da categoria j não são modelados diretamente no código de Monte Carlo ([HAKIMABAD; PANJEH; VEJDANI-NOGHREIYAN \(2007\)](#)). Para as categorias k e l , código específicos na simulação de Monte Carlo são usados ([E.SAYYED \(2000\)](#)). O efeito de decaimento beta coincidentemente ao decaimento dos raios gama de ^{24}Na e ^{128}I são também contabilizados na simulação de Monte Carlo. A radiação gama das categorias $a, b, g, h, e i$, enumeradas acima, a aproximação ALI é empregada. O restante dos raios gama são controlados independentemente.

Algumas questões podem ser enumeradas em [ZHANG; GARDNER \(2004\)](#) que contribuíram sensivelmente para melhorias no código de simulação de Monte Carlo:

1. Aprimorando a função resposta dos detectores. Novas funções de resposta dos detectores foram geradas a partir do código de Monte Carlo modificado que leva em conta : (1) Não linearidade de detectores de NaI ; (2) A variabilidade devido à perda de elétrons que escapam da superfície do detector sem depositar sua energia.

2. Introdução de bibliotecas de background a partir da ativação neutrônica do detector de cristal NaI, incluindo o espectro de raios gama do I e Na, o espectro de decaimento do ^{24}Na e ^{128}I .
3. Introdução das bibliotecas de background naturais. Os espectros naturais de background a partir do decaimento do K-40, urânio e tório são gerados usando o ALI partindo do pressuposto de equilíbrio e que seu impacto sobre todo o processo de amostragem na simulação é negligenciável.
4. Rastreamento de aniquilação a partir de pares de fótons. Pares de fótons aniquilados devem ser tratados explicitamente.

Em [WANG; LI; GARDNER \(2008\)](#), uma ligeira modificação para o Monte Carlo - library least-squares (MCLLS) permite mais precisão nos cálculos do PGNA. Essa modificação consiste em utilizar a biblioteca de um dos componentes (óleo) contra a soma das bibliotecas de todos os outros componentes (gás, água e sal). A resposta do medidor de densidade de raios gama, a partir da fonte, é usada para obter a quantidade de um dos componentes. O arranjo usado é de uma fonte de nêutrons (Cf-252) e uma fonte de raios gama (Cs-137), com um detector (NaI) colocado do lado oposto a um suporte circular cilíndrico contendo uma amostra de uma mistura heterogênea de petróleo, gás e água do mar. No mesmo trabalho, é possível identificar que as bibliotecas dos compostos acima citados são obtidas pela soma das bibliotecas dos elementos que constituem esses compostos, obedecendo-se a certas proporções presentes em cada um dos compostos. A soma de algumas bibliotecas, usada pelo autor de [MERIC \(2012\)](#), deve-se, essencialmente, ao fato que muitos compostos são dominados pelo hidrogênio, ou por carbono. Os passos usados no Monte Carlo são:

- Assumir ou obter uma estimativa inicial para a composição amostral e usar o Monte Carlo para estimar o total amostral e o espectro de cada elemento presente na amostra.
- calcular pelo método do mínimos quadrados as quantidades elementares de cada elemento na amostra.
- Se as estimativas calculadas pelo método dos mínimos quadrados não são próximas o suficiente da estimativa inicial, recalcule as bibliotecas e assuma uma nova estimativa da composição amostral com as estimativas calculadas nesse passo. Itere até que os mínimos quadrados e estimativas iniciais converjam.

Esta abordagem tem sido mais prática com o uso de operadores diferenciais dentro do código CEARPGA ([HAN; GARDNER; METWALLY \(2007\)](#))).

Caracterização detalhada das amostras de água implica a determinação de salinidade e da composição dos objetos em estudo ([MERIC \(2012\)](#)). A composição da água pode variar dependendo da localização e do tempo de vida de um campo de produção, assim como de

mudanças bruscas na salinidade e sua composição, como acontece quando a água do mar rompe o poço de produção.

O PGNAA (*Prompt gama Neutron Analysis Ativation*) encontra aplicações dentro da indústria, como a análise de alimentos, carvão e petróleo [GARDNER et al. \(2006\)](#), [MOLNAR \(2004\)](#), [LIM \(2004\)](#), [BORSARU; JECNY \(2001\)](#), [LIM; ABERNETHY \(2005\)](#). PGNAA expõe uma amostra a uma fonte de nêutrons, e monitora as radiações gama originadas dessas amostras, usando um espectrômetro em conjunto com um analisador multi-canal (MCA). A radiação gama é característica de cada elemento. Adicionalmente, os raios gama de nêutrons podem penetrar em grandes profundidades nas amostras, já que têm energias que variam de algumas centenas de Kev até 12 Mev. Isso permite sua utilização em casos em que é necessário a análise quantitativa em amostras.

Como citado anteriormente [WANG; LI; GARDNER \(2008\)](#) demonstraram a viabilidade de se utilizar o PGNAA para determinação das quantidades de compostos de uma mistura multifásica heterogênea. O MCLLS, como uma parte integrante do PGNAA, foi usado para análises quantitativas subsequentes. O MCLLS é utilizado para tirar proveito da informação contida em todo o espectro de raios gama da amostra, assumindo que a taxa de contagem amostral pode ser determinada como a soma dos produtos entre a fração em peso dos elementos presentes no objeto em estudo e a contagem espectral dos raios gama. As quantidades de cada constituinte são calculadas pelos mínimos quadrados por meio da biblioteca espectral da amostra e das bibliotecas espectrais de cada um dos seus constituintes. Presume-se, então, que o espectro de cada constituinte esteja disponível antes de se realizar a solução do problema pelos mínimos quadrados.

As simulações de Monte Carlo oferecem uma flexibilidade que pode ser difícil ou impossível de se alcançar em experimentos de laboratórios [MERIC \(2012\)](#). Simulações Monte Carlo são mais rápidas e exigem menos recursos do que experimentos laboratoriais reais, podendo fornecer uma visão melhor sobre parâmetros críticos relacionados com a estimativa das quantidades de interesse.

O algoritmo de Monte Carlo é uma ferramenta computacional que pode ser usada para fornecer um valor médio de uma quantidade de interesse por amostragem aleatória, iterativamente, a partir de distribuições apropriadas que descrevem o comportamento médio dessa quantidade [MERIC \(2012\)](#). Simulações Monte Carlo são usadas para problemas de natureza estocástica, que não podem ser resolvidas analiticamente, ou nas quais a solução não é viável. O transporte de radiação através da matéria se encaixa nessa descrição. O caminho de uma partícula através de um absorvedor é decidido com base nos resultados de um número de eventos estocásticos.

O PGNAA é baseado no bombardeamento de uma amostra de interesse por meio de dois mecanismos, nêutrons térmicos (thermal neutrons) ou rápidos (fast neutrons). Nêutrons, com carga elétrica neutra, assim como os fótons, não são afetados devido ao efeito Coulomb dos núcleos, interagindo diretamente com os núcleos dos átomos do que com a nuvem eletrônica de suas vizinhanças. Os nêutrons, então, penetram em grandes profundidades no absorvedor.

Nucleo	Limiar de Energia
O-16	6049.4
Na-23	440.4
Cl-35	1219.4
Cl-37	1726.6
Sr-86	1080.0
Sr-87	388.0
Sr-88	1840.0

Tabela 3.1: estados excitados de alguns elementos e isótopos. [MERIC \(2012\)](#)

Dois importantes mecanismos de interação nêutron-matéria contribuem para as respostas do PGNA. Um deles é o espalhamento inelástico (reação $(n, n'\gamma)$). Em um evento de espalhamento inelástico, o nêutron incidente irá perder parte de sua energia inicial e mudar sua direção de propagação. A energia cinética perdida pelo nêutron incidente é transferida para o núcleo alvo, que é colocado em um estado excitado. A média da energia perdida, em um evento de espalhamento, depende dos níveis de energia permitidas dentro do núcleo [RINARD \(1991\)](#). Se os níveis de energia dos estados excitados são muito altos em comparação com a energia do nêutron incidente, espalhamento inelástico não ocorrerá. A dispersão inelástica de nêutrons a partir de núcleos alvos é uma reação com um determinado limiar.

O núcleo do átomo de hidrogênio, muito presente em amostra, não tem nenhum estado excitado. A probabilidade de um evento de espalhamento inelástico nesse caso é zero.

Ao sofrer um espalhamento inelástico, o retorno ao estado fundamental do núcleo excitado é acompanhada da emissão de raios gama. O excesso de energia é transferido a uma partícula extra-nuclear, que é então ejetada do mesmo. Esse processo pode se acompanhado pela emissão de Raios-X ([MOLNAR \(2004\)](#)). A energia perdida devido a um espalhamento inelástico de um nêutron incidente sobre um núcleo alvo pode ser dado por:

$$E_{out} = \left(\frac{A}{A+1}\right)^2 \left[E_{in} - \frac{Q(A+1)}{A}\right] \quad (3.1)$$

E_{out} é a energia do nêutron emergente, E_{in} é a energia do nêutron incidente ao núcleo, A é o peso atômico do núcleo alvo e Q é o valor que deve ser igual ao nível de energia excitado do núcleo.

O segundo mecanismo de interação entre nêutron e matéria que contribui para produção de raios gama é a absorção de nêutrons pelos núcleos, denominado captura de nêutrons térmicos, evento (n, γ) .

Esse mecanismo de interação irá ter maior probabilidade entre nêutron-matéria quando os nêutrons rápidos (com energia de poucos mais de alguns Mev) na amostra são desacelerados a energias da ordem de 0,025 eV, depois de sofrer um número suficiente de eventos de espalhamento elástico e inelástico. Um núcleo instável é formado quando o nêutron incidente é absorvido pelo

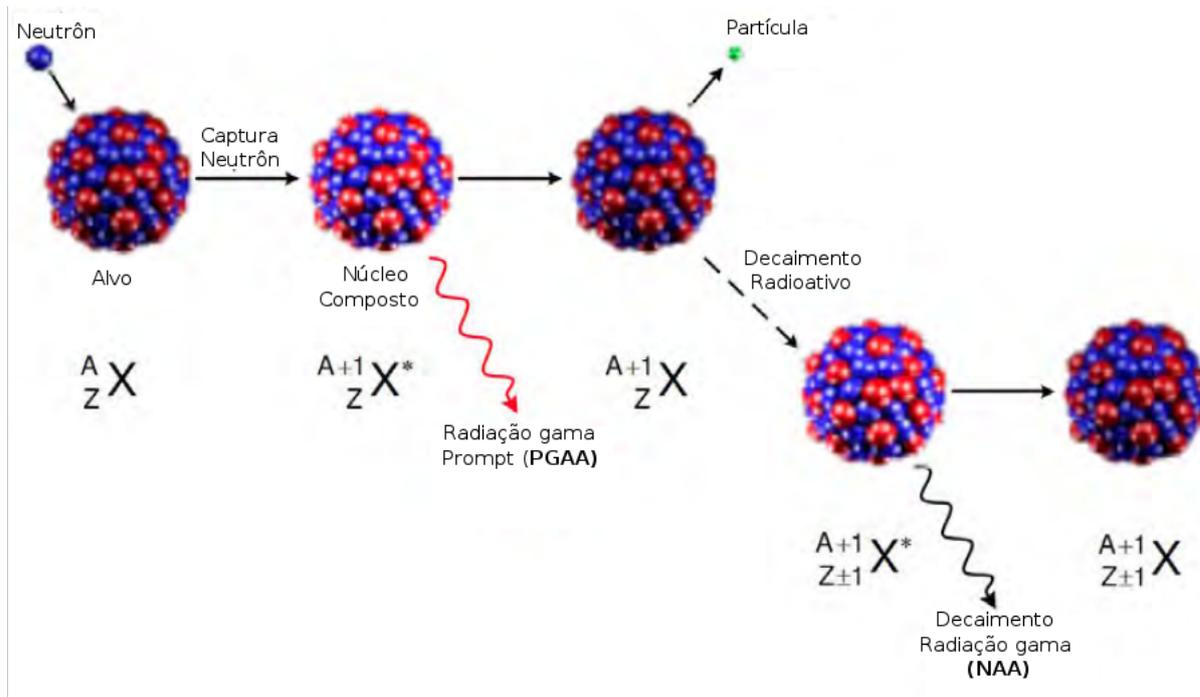


Figura 3.1: interação nêutron-núcleo. [SOLLRADL \(2014\)](#)

núcleo alvo. O núcleo irá, então, voltar ao seu estado de mais baixa energia (estado fundamental) através da emissão de raios gama.

Em alguns casos (de acordo com a Figura 3.1), os núcleos instáveis podem, após emissão dos primeiros raios gama, formar núcleos filhos que permanecem em um estado excitado. O núcleo filho pode voltar ao seu estado fundamental a fim de formar um núcleo estável, emitindo raios gama retardados. Mas a caracterização de amostras de água por meio desses raios gama retardado irá ser menos eficiente do que os primeiros raios gama emitidos pelo núcleo devido a sua intensidade, além de que a captação desses raios gama retardados exigiram alguns pré-requisitos para o seu estudo, como a retirada da fonte de nêutrons.

Uma característica comum a ambos os mecanismos de interação descritos acima (espalhamento inelástico de nêutrons e captura de nêutrons térmicos) reside no fato de que gráficos espectrais são característicos de um determinado elemento.

Devido ao fato dos nêutrons reagirem pouco com o núcleo, penetrarem em grandes profundidades na amostra e que nenhuma preparação prévia na amostra precisa ser realizada, o PGNAA é tido como uma técnica rápida, on-line de não invasiva do material em estudo.

Em [MERIC \(2012\)](#), são citadas as condições para que o sistema linear de equações, na ausência de uma solução exata, tenha uma solução a mais aproximada possível. Essa solução pode ser dada por:

$$\mathbf{x} = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{b}. \quad (3.2)$$

Onde \mathbf{x} é um vetor contendo as variáveis a serem determinadas no problema, \mathbf{A} é a matriz de

coeficientes das variáveis e \mathbf{b} é um vetor com a contagem espectral da amostra cuja constituição é desconhecida.

O determinante da matriz quadrada \mathbf{A} deve ser não nulo, ou seja, a matriz deve ser não singular. Nos cálculos dos mínimos quadrados, a matriz de covariância $(\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1}$ deve ser invertida, e a não singularidade da matriz de covariância garante solução pelos mínimos quadrados. Sempre que a matriz de covariância for mal condicionada, os resultados dos mínimos quadrados serão pouco confiáveis [ASTER; BORCHERS; THURBER \(2013\)](#). Dentre os motivos que podem vir a contribuir para que isso ocorra, pode-se citar:

- O espectro de uma das bibliotecas é semelhante em forma a outra biblioteca de algum dos constituintes, ou o espectro de uma biblioteca é uma combinação linear de algumas outras bibliotecas.
- Existe alguma biblioteca com contribuição muito pequena para o espectro da amostra desconhecida ou com diferença de várias ordens de magnitude na contagem espectral, em certos canais, para alguns constituintes .

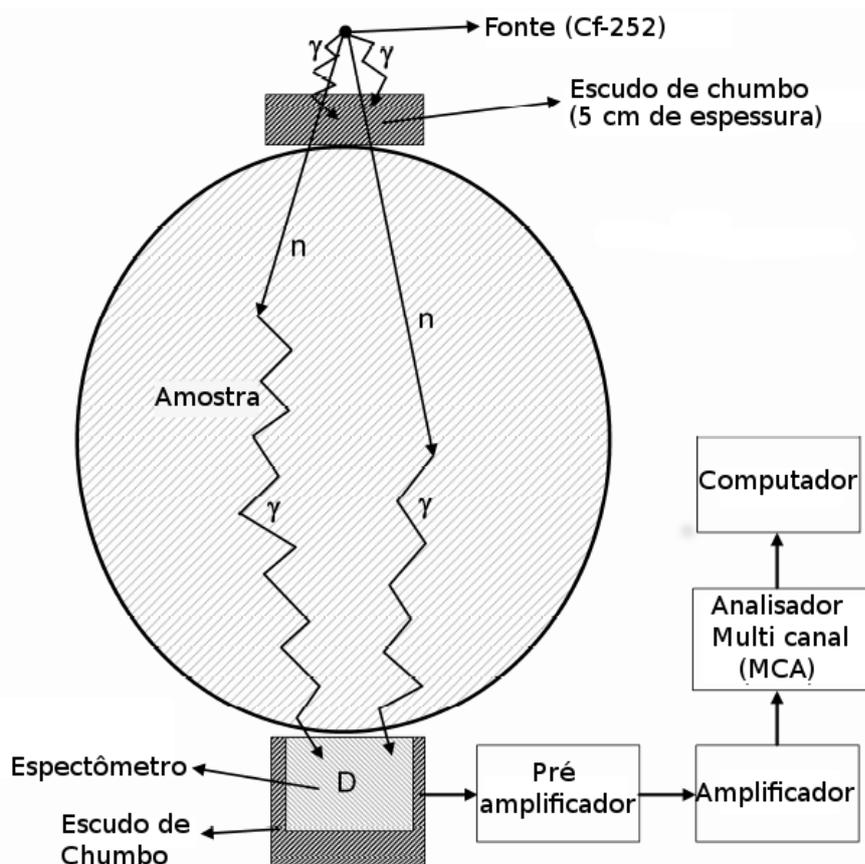


Figura 3.2: Esboço constando uma visão geral do PGNAA, bem como um diagrama de blocos do sistema eletrônico de leitura. Quando as fontes de nêutrons Cf-252 são utilizadas, um escudo de chumbo espesso é colocado entre a fonte e a amostra, para atenuar os raios gama emitidos a partir da fonte por fissão. Os escudos em torno dos detectores são utilizados para aumentar a eficiência global da medição. [MERIC \(2012\)](#)

O mau condicionamento da matriz de covariância leva a soluções instáveis na solução pelo Lybrary Least Square (LLS). Os dois pontos enunciados acima, contribuintes para o mau condicionamento da matriz de covariância, serão dependentes da resolução de energia do aparelho usado nas medições [PROCTOR et al. \(1999\)](#). O uso de espectrômetros com boas energias de resolução irá contribuir para reduzir o mau condicionamento da matriz de covariância, apesar de detectores de cintilação, que contribuem significativamente para o mau condicionamento devido à resolução de energia pobre, serem preferidos nesse tipo de aplicação. Um estudo sobre a influência de matrizes mau condicionadas na avaliação da integridade e qualidade estrutural existentes na massa branca cerebral pode ser encontrado em [LE BIHAN et al. \(2001\)](#) e [SKARE et al. \(2000\)](#).

Um tratamento que tem sido utilizado para tais casos na abordagem MCLLS tem sido a de deixar de fora bibliotecas de espectro problemáticas e realizar o cálculo dos coeficientes que compõem a amostra para os demais constituintes [GARDNER et al. \(2006\)](#). Também é sugerida a utilização de detectores em conjunto com outros princípios de medição para superar a questão do mau condicionamento [WANG; LI; GARDNER \(2008\)](#).

Em [MERIC \(2012\)](#), o mau condicionamento no MCLLS é tratado por um método indireto baseado na formação de novas bibliotecas de espectro, combinando as bibliotecas existentes, formando novas matrizes de covariância com menor número de condicionamento. Será exatamente este o tratamento a ser dado às bibliotecas de espectro neste trabalho. Sabendo que o condicionamento é um indicador de quão bem posto é o problema, [CLINE et al. \(1979\)](#), [ASTER; BORCHERS; THURBER \(2013\)](#), ele será calculado como a razão entre o maior e o menor autovalor da matriz de covariância. Se o número de condicionamento da matriz de covariância for próximo a 1.0, determina que os sistema linear é bem posto e que uma solução por mínimos quadrados possa fornecer valores que estejam bem próximos de uma suposta solução do sistema de equações lineares.

4

Metodologia e Resultados

4.1 metodologia

4.1.1 Bibliotecas de Energia

A abordagem que será utilizada para as bibliotecas de espectro, cedidas pelo autor de [MERIC \(2012\)](#), pode ser descrita da seguinte maneira:

- Novas bibliotecas são formadas pela junção da biblioteca de um composto individual, como um vetor, com a soma de todas as outras bibliotecas dos compostos, como outro vetor. Isso é feito para todas as combinações de compostos, com exceção da biblioteca de background como composto único.
- Entre as combinações mencionadas no passo anterior, é checado qual delas possui matriz de covariância com o menor número de condicionamento. Para esse composto, é calculada sua fração no espectro total.
- A biblioteca mencionada no item anterior, quando multiplicada pelo seu coeficiente que determina sua participação no espectro total, é extraída da biblioteca da amostra. O processo retorna para o primeiro passo, mas sem a biblioteca cuja matriz de covariância atingiu menor condicionamento.

Uma convenção a ser utilizada no restante do capítulo: Sempre que uma variável estiver em **negrito**, ela indicará uma matriz, vetor ou uma estrutura de dado contendo diversas informações inseridas, como: matriz de covariância construída a partir de uma escolha de canais, vetor contendo os canais contidos em uma determinada matriz de covariância construída, valores de número de condicionamento, e diversas outras informações. A variável nomeada em *itálico* será tratada como um escalar, como número máximo de iterações do algoritmo, número de canais a ser inserido em uma solução a ser construída, entre outros.

4.1.2 GRASP

De posse das tabelas em que constam energias (ou frequências) em função de contagens do detector, a tarefa consistirá em determinar um subconjunto do espaço constituído por todos esses dados, de modo que a matriz de covariância associada a esse subconjunto apresente o menor valor possível de número de condicionamento.

O problema em questão, consistindo de 2048 conjuntos de valores de energia, para resolver um sistema de equações com um número bem menor de variáveis, permite executar heurísticas para selecionar algumas dessas energias e encontrar uma matriz que tenha o menor número de condicionamento possível.

No Algoritmo 1, as entradas são: **M**, a matriz consistindo dos canais (valores de energia) e contagem espectral dos compostos; **T**, o tamanho da lista construída que será usada ao longo do GRASP; **Max**, número máximo de iterações executado pelo Grasp; **Num**, número de canais a ser utilizado na construção das soluções; **Obj**, limiar abaixo do qual uma nova matriz construída terá bom condicionamento e, por fim, **Tot**, é um vetor contendo a contagem espectral da amostra desconhecida.

Nas linhas 2 e 3, o Algoritmo 1 inicializa as variáveis que irão monitorar os valores de condicionamento obtidos ao longo da execução, mais especificamente os menores e maiores valores de condicionamento. Nas linhas 4, 5 e 6 são chamadas, respectivamente, as funções *intervalos* (Algoritmo 2, Seção 4.1.3), *proporção* (Algoritmo 3, Seção 4.1.4) e *numCanInt* (Algoritmo 4, Seção 4.1.5) retornando as estruturas *estInt*, *estPro* e *numCan*. Essas saídas serão usadas nos passos seguintes do GRASP. A variável **estInt** determinará quantos conjuntos existem no dados globais, sendo que um conjunto será definido a partir do canal seguinte ao canal em que uma das contagens de algum dos compostos da amostra vai a zero, até a próxima contagem nula de algum dos compostos (Figura 2.4, Seção 2.6). Já a variável **estPro** determinará a fração percentual dos canais que farão parte dos conjuntos determinados por **estInt**. A estrutura **numCan** será utilizado para calcular quantos canais serão utilizados de cada um dos conjuntos determinados por **estInt**, dados **estPro** e um número aleatório *Num* fornecido como parâmetro na chamada do GRASP.

A partir da linha 7 até a linha 9 é construída uma solução a partir de um subconjunto dos canais disponíveis, desde que essa solução seja suficientemente diferente de todas as outras até então construídas. Da linha 11 à linha 19, essa solução construída é atribuída a uma lista, configurada vazia inicialmente. É feita a verificação se essa solução construída possui o menor valor de condicionamento até então, e se a condição for verdadeira, é atribuído ao valor de *menorCond*. Senão, é verificado se possui o maior valor de condicionamento até então. Se a condição for verdadeira, atribuído à variável *maxCond*.

Algoritmo 1: Algoritmo GRASP

Entrada: M, T, Max, Num, Obj, Tot
Saída: $resulGrasp$

- 1 inicialize a lista do algoritmo como vazia;
- 2 $menorCond = inf$;
- 3 $maxCond = 0$;
- 4 $estInt = intervalos(M)$;
- 5 $estPro = proporcao(M)$;
- 6 $numCan = numCanInt(M)$;
- 7 **enquanto** *Obj não é atingido ou o Max número de iterações não é executado* **faça**
- 8 **enquanto** *Solução construída não é suficientemente diferente das soluções até então construídas* **faça**
- 9 Construa uma nova solução d com Num canais (construtivo);
- 10 **fim**
- 11 **se** *iteração corrente* $< T$ **então**
- 12 Atribua nova solução d a uma posição na lista;
- 13 condicionamento da solução construída = x ;
- 14 **se** $x < menorCond$ **então**
- 15 $resulGrasp = d$;
- 16 $menorCond = x$;
- 17 **fim**
- 18 **se** $x > maxCond$ **então**
- 19 $maxCond = x$;
- 20 **fim**
- 21 **fim**
- 22 **senão**
- 23 Conduza uma busca nas vizinhanças de d (*busca local*);
- 24 Execute uma *linkagem* entre d e qualquer solução presente na lista, para obter e , de melhor condicionamento, se houver (*path-relinking*);
- 25 Execute uma busca nas vizinhanças de e ;
- 26 **se** *condicionamento de e* $< maxCond$ **então**
- 27 Substitua na lista o elemento mais similar a e que tem maior número de condicionamento que e .
- 28 **se** *condicionamento de e* $< menorCond$ **então**
- 29 $resulGrasp = e$;
- 30 **fim**
- 31 **se** *condicionamento de e* $> maxCond$ **então**
- 32 $maxCond = \text{condicionamento de } e$;
- 33 **fim**
- 34 **fim**
- 35 **fim**
- 36 **fim**

Das linhas 22 à 31, se a solução construída na linha 8 atende aos requisitos de ser diferente o suficiente de todas as soluções até então construídas, o algoritmo irá realizar uma busca nas vizinhanças dessa solução construída (linha 23), proceder a uma linkagem entre o

resultado dessa busca e alguma solução presente na lista do GRASP escolhida aleatoriamente (linha 24), e realizar uma nova busca com o resultado dessa linkagem (linha 25). Se o resultados da linha 25 é melhor do que algumas das soluções presentes na lista, essa será inserida na mesma, removendo dela a solução que tenha maior número de condicionamento e que tenha mais similaridades com o resultado da segunda busca realizada. Verifica-se, então, nas linhas 28 a 30 se o condicionamento do resultado da linkagem é o menor valor até então encontrado. Das linhas 31 a 33 verifica-se se esse resultado é o maior até então encontrado, para que esse valor dê prosseguimento ao algoritmo nas iterações seguintes.

O resultado do Algoritmo 1 é uma estrutura de dados contendo várias informações importantes, tais como a matriz de covariância necessária para aproximar a solução do sistema de equações lineares, e o vetor contendo todos os canais selecionados para serem inseridos na matriz de covariância. As subrotinas *intervalos*, *proporção*, *busca local* e *path-relinking* irão ser detalhadas mais à frente.

4.1.3 Intervalos

Para construir a estrutura de dados contendo os diferentes conjuntos presentes nos dados globais de entrada, é utilizado o Algoritmo 2.

Algoritmo 2: estrutura Intervalos

```

Entrada:  $M$ 
Saída:  $estInt$ 
1 initialization;
2 repita
3   repita
4     se o valor da linha  $i$  e coluna  $j$  dos dados de entrada  $M$  for zero e se já não
       foi encontrada nenhuma contagem espectral nula na coluna  $j$  corrente então
5       |   Atribua para a estrutura de saída  $estInt$  o valor de  $i$ , linha (canal) onde a
       |   contagem espectral vai a zero;
6       |   fim
7     até percorrer todas as colunas de  $M$ ;
8 até percorrer todas as linhas de  $M$ ;

```

No Algoritmo 2, o dado de entrada é a matriz M contendo os valores de energia (ou frequência) em função dos valores de contagem. A saída consistirá de uma estrutura de dado contendo os canais inseridos em cada um dos conjuntos determinados por Algoritmo 2. Das linhas 2 até a linha 8, o código percorre a matriz em busca do valor de alguma contagem nula. Se encontrar, ele inicia um novo intervalo, que se encerrará até uma nova contagem nula, desde que não seja em alguma coluna em que já tenha se encontrado contagem nula (as colunas indexam os compostos). Esse novo intervalo será inserido em $estInt$.

4.1.4 Proporção

Uma vez obtida a estrutura de conjuntos, o próximo passo consiste em determinar a proporção do número de canais em cada conjunto. Essa proporção é importante, porque existe a pretensão que ela seja obedecida na construção de novas soluções com uma quantidade de *Num* canais, passado como parâmetro na chamada do Algoritmo 1 (*GRASP*). O seguinte algoritmo (Algoritmo 3) demonstra como foi realizada a construção da estrutura de dados contendo a proporção de cada intervalo:

Algoritmo 3: proporcao

Entrada: *estInt*
Saída: *estPro*

- 1 **repita**
- 2 Divida o número de canais de cada intervalo pelo número total de canais para determinar a proporção de canais de cada intervalo, e atribua o valor para a estrutura de saída *estPro*;
- 3 **até a última coluna *i* em *estInt*;**

A saída será uma estrutura de dados (uma matriz) contendo a proporção de canais em cada um dos conjuntos. Ao se construir uma solução com um determinado número de canais, essa solução terá um percentual de canais do primeiro conjunto que é o mesmo percentual de canais do primeiro conjunto dos dados globais. Isso é válido para todos os *n* conjuntos advindos do Algoritmo 2. A essência do Algoritmo 3 consiste apenas em dividir o número de canais em cada conjunto pelo número de canais globais, na linha 2, se utilizando para isso de *estInt*.

4.1.5 Número de canais por intervalo

O Algoritmo 4 irá determinar a quantidade de canais pertencente a cada um dos conjuntos, tomando por base uma nova solução com *num* canais. Essa nova solução precisa obedecer as proporções dos dados globais, contidas em *estPro*, para cada um dos conjuntos.

Os parâmetros de entrada são *estPro*, resultado do Algoritmo 3, e o número de canais *Num*, passado como parâmetro na entrada do Algoritmo 1. Na linha 4 de Algoritmo 4, multiplica-se o primeiro valor de *estPro* pelo número de canais *Num*. O conjunto considerado (linha5) se iniciará a partir do valor da variável *início* até o número de canais determinado pela linha 4. O valor da variável *início* será atualizado na linha 6, para coincidir com o início do conjunto seguinte, e o conjunto construído das linhas 4 a 6 é atribuído à estrutura de saída *numCanInt* na linha 7.

Algoritmo 4: numCanInt

Entrada: *estPro*, Num
Saída: numCanInt

- 1 initialization;
- 2 inicio = 1;
- 3 **repita**
- 4 qtdCan = multiplicar i por Num;
- 5 range = [inicio (inicio+qtdCan-1)];
- 6 inicio = inicio + qtdCan;
- 7 atribua range a **numCanInt**;
- 8 **até** visitar todo i em *estPro*;

4.1.6 Construtivo

4.1.6.1 Construção de matrizes de covariância de dimensão 2

O Algoritmo 5 irá fornecer uma solução, a partir da qual todo o processo do GRASP terá início. Nesse primeiro processo construtivo, as escolhas de 100 canais que formarão as matrizes de covariância. Lembrando que um composto, nesses 100 canais, será tratado como um vetor e trabalhado conjuntamente com a soma das bibliotecas de todos os outros compostos como outro vetor, formando matrizes com dimensão 100×2 . Esse procedimento é realizado para todas as combinações de compostos tomados isoladamente (água, sal, óleo, gás) com exceção da biblioteca de background.

Algoritmo 5: construtivo

Entrada: $M, estInt, Num, numCanInt, estPro$
Saída: $estConst$

- 1 **canais** = inicialização da estrutura de dados que irá receber quantidade Num de canais;
- 2 **repita**
- 3 Verifique, em $numCanInt$, indexado por i , a partir de que posição se iniciará o preenchimento de **canais**;
- 4 **enquanto** o intervalo i de **canais** não for preenchido **faça**
- 5 Escolha aleatoriamente um canal q do intervalo i de $estInt$;
- 6 **se** q não existe em **canais** **então**
- 7 insira q no conjunto de canais;
- 8 **fim**
- 9 **fim**
- 10 determine a matriz de covariância, matriz ortogonalizada e o condicionamento delas ;
- 11 $estConst$ = estrutura contendo matriz de covariância, matriz de covariância ortogonalizada e condicionamento das duas matrizes citadas;
- 12 **até** até percorrer todo valor i em $estPro$;

Os dados de entrada no Algoritmo 5 são: M , a tabela espectral contendo os valores de energia e contagem para os compostos da amostra; $estInt$, estrutura de dado contendo os conjuntos dos dados globais; Num , o número de canais que se deseja na construção da solução; $numCanInt$, o número de canais em cada conjunto, para um quantidade Num passado como parâmetro em Algoritmo 1; $estPro$, estrutura contendo a proporção de cada um dos conjuntos dos dados globais e da solução construída.

Na linha 1, é realizada a inicialização da estrutura de dados que receberá a atribuição de canais. A partir da linha 2, o preenchimento da estrutura **canais**, para cada posição i em $estPro$. Escolhido um canal, faz-se a verificação se não esta já presente, e o mesmo é inserido no seu devido conjunto. Por fim, escolhido um determinado conjunto de canais, calcula-se a matriz de covariância, a matriz de covariância ortogonalizada (chamada ao algoritmo 9) e seus respectivos números de condicionamento (linhas 10 e 11), e atribue-se esses dados à estrutura de saída **estConst**.

As linhas descritas no Algoritmo 5 irão construir uma particular solução. Essa solução, para que seja dado prosseguimento ao algoritmo GRASP, precisa ser suficientemente diferente de todas as soluções até então construídas (linha 8 do Algoritmo 1). Essa diferença pode ser determinada por um valor inteiro que indique quantos canais da solução construída são diferentes de todas as outras soluções já estudadas. Neste trabalho, foi tomado por base um nível de diferença de pelo menos 10% em relação a todas as outras. Essa condição se faz necessária para que a lista não seja preenchida por soluções muito semelhantes.

4.1.6.2 Construção das matrizes de covariância de dimensão 5

Variantes do Algoritmo 5 foram criadas, para que novas opções de soluções fossem testadas, cujos resultados estarão apresentados na Seção 4.2.7. Uma dessas variantes realiza a construção de uma matriz com dimensões iguais ao número de compostos presente na tabela espectral. A idéia é construir vetores de compostos, cada elemento desse vetor sendo constituído pela soma de canais consecutivos de um específico composto, em um determinado conjunto. Exemplo: Se a amostra for constituída por cinco compostos, serão constituídos cinco vetores, dispostos em colunas, em uma matriz. O elemento (1,1) da matriz será formado pela soma de cinco contagens consecutivas para o composto 1, no primeiro conjunto. O elemento (1,2) da matriz será determinado pela soma de cinco contagens consecutivas para o composto 1, no segundo conjunto. O elemento (2,1) da matriz será constituído por cinco contagens consecutivas para o composto 2, no primeiro conjunto, e assim sucessivamente.

Algoritmo 6: construtivo, matrizes de dimensão 5

Entrada: \mathbf{M} , $estInt$, Num, numCanInt, $estPro$,
Saída: $estConst$

- 1 canais = inicialização da estrutura de dados que irá receber os canais a serem inseridos;
- 2 **repita**
- 3 | T = Escolha aleatoriamente um canal compreendido no intervalo i de $estInt$;
- 4 | preencha todas as linhas da coluna i de $canais$ com valores consecutivos a T ;
- 5 **até** percorrer todo intervalo i inserido em $estInt$;
- 6 \mathbf{D} = inicialização da matriz que receberá as contagens;
- 7 soma = 0;
- 8 **repita**
- 9 | **repita**
- 10 | | **repita**
- 11 | | | $R = R +$ valores contidos em \mathbf{M} , indexados nas linhas pelos valores de canais em z e q , e na coluna pelo valor de u ;
- 12 | | **até** até percorrer todas as linhas z de $canais$;
- 13 | | Atribua R à posição (u,q) de \mathbf{D}
- 14 | **até** até percorrer todas as colunas q de $canais$;
- 15 **até** Percorrer todas as colunas u de \mathbf{M} ;
- 16 Dado \mathbf{D} , calcule a matriz de covariância \mathbf{C} e a matriz de covariância ortogonalizada \mathbf{Cort} ;
- 17 Insira em $estConst$ a matriz \mathbf{C} , a matriz de covariância ortogonalizada \mathbf{Cort} e a matriz $canais$;

4.1.7 Busca Local

O procedimento de busca local realizará uma pesquisa nas vizinhanças do resultado do algoritmo anterior. Essa busca prosseguirá até não encontrar nenhuma solução melhor que o

valor corrente. Construída a solução, ela será inserida na lista do GRASP, caso ela não esteja totalmente preenchida. Caso contrário, será dado início ao procedimento do Algoritmo 7.

Os dados de entrada em busca local, são: **estConst**: solução construída na execução dos Algoritmos 5 e 6; T : Tamanho da lista utilizada na busca; $Iter$: Número máximo de iterações; **estInt**: Estrutura de dados que determina que canais estão inseridos em cada um dos conjuntos dos 2048 canais originais, resultado do Algoritmo 2; **M**: Matriz contendo os dados globais de entrada, 5 compostos e 2048 canais; **numCanInt**: Estrutura de dados contendo os canais, em cada um dos conjuntos, contidos em um número Num de canais.

Na linha 1 do Algoritmo 7, a solução corrente, que irá ter diversos valores durante as iterações da busca local, é inicializada com o valor da estrutura construída no Algoritmos 5 ou 6. Na linha 2 é inicializado $cond$, e na linha 3 é inicializada a lista dessa subrotina. Um dos requisitos para o término da busca local é que a lista esteja vazia, indicando que não há nenhuma solução melhor encontrada do que a solução da iteração atual. Essa condição está escrita na linha 4. Quando isso ocorre, um mínimo local é encontrado, não sendo provável que exista uma melhor solução nas suas vizinhanças. Das linhas 5 a 22, o código tratará de preencher a lista apenas com soluções melhores do que a solução corrente. Na linha 9, é feita uma cópia **cop** dos canais presentes na solução corrente; na linha 10, é escolhido um canal c , a partir dos dados globais, que não esteja presente no conjunto de canais da solução corrente, e verifica-se a que conjunto k esse canal pertence, utilizando-se para isso da estrutura **estInt**; na linha 11, um valor aleatório de canal e , pertencente ao conjunto k de **numCanInt**, é escolhido para que se faça a inserção de c em **cop**; na linha 12 constrói-se a matriz selecionada **Mespec**, a partir da matriz global de dados **M**, e dos dados em **cop**; na linha 13, finalmente, calcula-se a matriz de covariância e seu respectivo número de condicionamento o . Se o número de condicionamento o for menor que $cond$ (condicionamento da solução corrente), é inserida na lista a solução constituída por **Mespec** e o . Chegando à linha 21, se a lista não estiver vazia, escolhe-se um valor aleatório para ser a nova solução corrente; senão, a solução corrente é um mínimo global e a busca dá-se por encerrada.

A saída consiste de uma estrutura de dados que contém a matriz com os valores de contagem espectral em alguns canais selecionados, a respectiva matriz de covariância e seu número de condicionamento.

Algoritmo 7: busca local

Entrada: *estConst*, *T*, *Iter*, *estInt*, *M*, *numCanInt*
Saída: *resulBusca*

```

1 solução-corrente = estConst;
2 cond = condicionamento da solução corrente;
3 inicializar a lista com tamanho T;
4 enquanto lista não estiver vazia faça
5     contador = 0;
6     inicialize a lista;
7     posição-na-lista = 1;
8     enquanto posição-na-lista ≤ T e contador ≤ Iter faça
9         cop = solução de canais corrente;
10        c = Escolha aleatoriamente um canal que não esteja inserido na solução
        corrente e cheque, em estInt, a que intervalo k o canal c pertence;
11        Escolha um valor aleatório e, do intervalo k de numCanInt, onde c será
        inserido em cop;
12        Construa a matriz de contagem espectral (Mespec), uma submatriz da matriz
        M de entrada, a partir da escolha de canais em cop;
13        Calcule a matriz de covariância de Mespec e seu correspondente número de
        condicionamento o;
14        se o < cond então
15            insira na lista a solução constituída por Mespec e o ;
16            posição-na-lista = posição-na-lista + 1;
17        fim
18        contador = contador + 1;
19    fim
20    se a lista não estiver vazia então
21        Escolha aleatoriamente uma solução e a atribua à solução corrente;
22    fim
23 fim

```

4.1.8 Path-Relinking

Seguindo a sequência do Algoritmo 1, a solução passada pela busca local será submetida a uma linkagem (*path-relinking*) com alguma solução contida na lista do GRASP. O algoritmo do path-relinking encontra-se no Algoritmo 8.

Algoritmo 8: path-relinking

```

Entrada:  $s_1, s_2, M$ 
Saída: resulPath
1  qtdDif = Número de diferenças entre  $s_1$  e  $s_2$ ;
2  menorCond = inf;
3  maxCond = 0;
4  enquanto  $qtdDif > 0$  faça
5      inicialize a lista;
6      dif = matriz determinando os canais presentes em  $s_2$  e ausentes em  $s_1$ ;
7      repita
8          se o valor em dif indica que o canal de  $s_2$  não está presente em  $s_1$  então
9              copS1 = Cópia dos canais em  $s_1$ ;
10             dif2 = matriz determinando os canais presentes em  $s_1$  e ausentes em  $s_2$ .;
11             enquanto não encontrar um canal presente em  $s_1$  e ausente em  $s_2$ 
12                 usando dif2 faça
13                     Recoloque em copS1 um dos valores de  $s_2$  não presente em  $s_1$ ,
14                     usando dif2;
15                     construa a matriz de covariância determinada por copS1 e seu
16                     respectivo número de condicionamento  $c$ ;
17                     se lista não está preenchida então
18                         insira na lista a solução recém-construída;
19                         if  $c \leq menorCond$  then
20                             | resulPath =  $e$ ;
21                             end
22                             se  $c > maxCond$  então
23                                 | maxCond =  $c$ ;
24                                 fim
25                             fim
26                         se não
27                             Substitua da lista o elemento mais semelhante e que tenha maior
28                             número de condicionamento;
29                             fim
30                         fim
31                     fim
32             até percorrer todos os elementos de dif;
33             Selecione aleatoriamente um elemento da lista para ser a nova solução inicial;
34             qtdDif = quantidade de diferenças entre  $s_1$  e  $s_2$ ;
35         fim
36     fim

```

As entrada para o Algoritmo 8 são duas soluções construídas durante o Algoritmo 1. Uma delas, s_1 , iremos considerar como escolhida da lista inerente ao GRASP. A outra, s_2 , será o resultado advindo da busca local. O resultado do path-relinking será aquele que tiver menor número de condicionamento em todo o espaço de soluções compreendido entre s_1 e s_2 . Na linha 1, calcula-se a quantidade de diferenças iniciais entre s_1 e s_2 . Nas linhas 2 e 3 configuram-se os valores iniciais, respectivamente, do menor e do maior condicionamento encontrado durante a execução do algoritmo, com ∞ e 0. A linha 4 executará enquanto a diferença entre as soluções

for maior que zero; na linha 5, inicializa-se a lista pertinente ao *path-relinking*, enquanto que na linha 6 é construída a matriz **dif**, determinando em que posições estão os canais presente em s_2 e ausentes em s_1 . Todos os elementos da estrutura de dados **dif** serão verificados (linha 8), e se o mesmo indicar que há uma diferença entre s_1 e s_2 , é possível encontrar uma solução melhor que a solução alvo. Após se verificar essa diferença entre s_1 e s_2 , os canais de s_1 são copiados (linha 9). Na linha 10, é construída uma matriz para indicar quais os canais presente em s_1 e ausente em s_2 . Isso é feito para que a substituição de algum canal, de s_2 em s_1 , não seja feita em um valor de canal que esteja presente em s_2 . Se isso acontecer, não será possível fazer com que as soluções se assemelhem no que diz respeito aos valores de canais inseridos. Tomada essa medida, as diferenças entre eles diminuirão ao longo das iterações do *path-relinking*. Nas linhas 12 e 13, respectivamente, é feita a substituição de um canal de s_2 em s_1 ; calculada a matriz de covariância e condicionamento determinado por **copS1**. Na linha 14, a nova solução é inserida na lista do *path-relinking*. Nas linhas 16 à 22, é verificado se essa solução está enquadrada como a menor ou maior solução até então encontrada, ou nenhuma das duas coisas. Se o algoritmo, a partir da linha 17, encontrar a lista do *path-relinking* preenchida, então ele seguirá para linha 24, onde substituirá o elemento da lista mais semelhante à solução construída, e que tenha maior número de condicionamento. Na linha 30, será escolhida uma solução da lista para ocupar o valor da solução s_1 , e será calculado o novo valor de quantidade de diferenças entre s_1 e s_2 na linha 31.

4.1.9 Ortogonalização

A matriz de mudança de base canônica para base ortogonalizadas é obtida no Algoritmo 9. Lembrando que \mathbf{v}_n pertence à base de vetores $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\}$ original (que formam uma base linearmente independente, mas que não são necessariamente ortogonais), e \mathbf{w}_n é o vetor ortogonalizado em um passo anterior.

No Algoritmo 9, a matriz **M** de entrada é a matriz de covariância calculada nos diversos passos anteriores (*construtivo, busca-loca e path-relinking*). Sempre que é calculada a matriz de covariância, toma-se o cuidado de se calcular, paralelamente, a matriz de covariância na base ortogonalizada. A saída será a matriz **M** ortogonalizada (**O**), e a matriz **Mud**, que realiza a ortogonalização das matrizes de covariância. Ela será usada, posteriormente, para transformar os valores dos índices de fração em peso descritos na base ortogonalizada para a base canônica.

Nas linhas 4 e 5, a primeira coluna da matriz ortogonalizada coincidirá com a primeira coluna da matriz de covariância, enquanto que a matriz de mudança de base receberá o valor 1 no elemento de posição (1,1) da matriz. Nas linhas 9 a 11, o algoritmo realiza o acúmulo da razão $\frac{\mathbf{u}_j \bullet \mathbf{v}_k}{\mathbf{v}_k \bullet \mathbf{v}_k}$, onde a variável j indexa a coluna na matriz de covariância original, e a variável k indexa a coluna da matriz de covariância ortogonalizada, podendo assumir até o valor $j - 1$.

A suposição inicial será que a amostra possa ser descrita como uma combinação linear dos compostos, ou seja:

Algoritmo 9: ortogonalização

Entrada: \mathbf{M}
Saída: \mathbf{O}, \mathbf{Mud}

```

1 C = inf;
2 repita
3   se j for a primeira coluna de  $\mathbf{M}$  então
4     Coluna 1 de  $\mathbf{O}$  = Coluna 1 de  $\mathbf{M}$ ;
5     elemento(1,1) de  $\mathbf{Mud}$  = 1;
6   fim
7   senão
8     repita
9       fator = (produto interno entre coluna j de  $\mathbf{M}$  e coluna k de  $\mathbf{O}$ ) / (produto
10      interno entre coluna k de  $\mathbf{O}$  e coluna k de  $\mathbf{O}$ );
11      temp1 = temp1 + fator * (coluna k de  $\mathbf{O}$ );
12      temp2 = temp2 + fator * (coluna K de  $\mathbf{Mud}$ );
13      até todas as colunas k de  $\mathbf{O}$  anteriores à coluna determinada por j;
14      Coluna j de  $\mathbf{M}$  = -temp1 + (coluna j de  $\mathbf{M}$ );
15      Coluna j de  $\mathbf{Mud}$  = -temp2 + (coluna j de  $\mathbf{Mud}$ );
16      posicao (j,j) de  $\mathbf{Mud}$  = 1;
17     fim
18   até para todas as colunas j de  $\mathbf{M}$ ;

```

$$R_i = \sum_{j=1}^n \alpha_j R_{j,i} + e_i \quad (4.1)$$

onde R_i é a taxa de contagem no i -ésimo canal do espectro da amostra desconhecida, $R_{j,i}$ é a taxa de contagem no i -ésimo canal do j -ésimo componente da amostra, α_j é a fração em peso do j -ésimo componente e e_i é o erro no i -ésimo canal. cuja solução poderá ser dada por

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad (4.2)$$

Devido ao mau condicionamento da matriz \mathbf{A} , a solução dada pela equação (4.2) é distante da verdadeira concentração dos compostos na amostra. A tentativa, então, é de obter uma solução mais próxima possível pelo método dos mínimos quadrados.

$$\mathbf{A}^T \mathbf{Ax} = \mathbf{A}^T \mathbf{b} \quad (4.3)$$

Enfatizando que o vetor de coordenadas $\hat{\mathbf{x}}$ de solução do problema encontra-se na base canônica.

Encontrada a matriz de covariância do problema, $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$, com o menor condicionamento possível por meio da heurística GRASP, a base formada por suas colunas será ortogonalizada pelo processo de Gram-Schmidt. Convencionando que os índices β , α e ε indicam, respectivamente, as bases de Gram-Schmidt, uma base indeterminada e a base canônica, e que a matriz de

covariância $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$, denotada por $[\mathbf{I}]_\varepsilon^\alpha$, pode ser encara como a transformação de uma determinada base para a base canônica, $[\mathbf{I}]_\beta^\alpha$ como a matriz de mudança de uma base indeterminada para a base de Gram-Schmidt, e $[\mathbf{I}]_\varepsilon^\beta$ é a matriz de mudança de base de Gram-Schmidt para base canônica, tem-se:

$$[\mathbf{I}]_\varepsilon^\beta = [\mathbf{I}]_\varepsilon^\alpha [\mathbf{I}]_\alpha^\beta \quad (4.4)$$

Simplificando um pouco a equação descrita acima:

$$\mathbf{M} = \mathbf{C} \bullet \mathbf{G} \quad (4.5)$$

$$\mathbf{M} = [\mathbf{I}]_\varepsilon^\beta, \mathbf{C} = [\mathbf{I}]_\varepsilon^\alpha \text{ e } \mathbf{G} = [\mathbf{I}]_\alpha^\beta.$$

A equação (4.5) pode ser desenvolvida para resultar em:

$$\mathbf{C} = \mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{M} \bullet \mathbf{G}^{-1} \quad (4.6)$$

\mathbf{G} é quadrada e invertível, já que é proveniente do processor de ortogonalização de Gram-Schmidt. Notar que, considerando que \mathbf{C} é invertível, então \mathbf{G} também será invertível.

Substituindo a equação (4.6) na equação (4.3), é possível obter:

$$\mathbf{M} \bullet \mathbf{G}^{-1} \bullet \hat{\mathbf{x}} = \mathbf{A}^T \bullet \mathbf{b} \quad (4.7)$$

Considerando que a matriz \mathbf{M} seja uma nova matriz de covariância para o problema, pode pressupor que a aplicação da inversa da matriz \mathbf{G} ao vetor $\hat{\mathbf{x}}$ (solução aproximada do problema) gere uma nova solução para o problema, na base de Gram-Schmidt. Para que a solução seja descrita na base canônica, basta para isso realizar a simples operação de mudança de base. Primeiro passo consiste em resolver:

$$\mathbf{M} \bullet \mathbf{y} = \mathbf{A}^T \mathbf{b} \quad (4.8)$$

Para resolver, posteriormente:

$$\mathbf{y} = \mathbf{G}^{-1} \bullet \mathbf{x} \implies \mathbf{x} = \mathbf{G} \bullet \mathbf{y} \quad (4.9)$$

Mais algumas coisas devem ser consideradas antes de se passar para os resultados:

1. Dos 2048 canais disponíveis, escolheu-se um número de 100 canais para compor as matrizes de covariância a serem construídas. Escolheu-se trabalhar com matrizes bem menores relativamente à quantidade de canais presentes nos dados originais devido ao fato do processamento ser mais rápido e os resultados não demandarem grande capacidade de processamento. Matrizes maiores que essa demandariam maior capacidade e tempo de processamento seria maior.

2. Dada uma matriz contendo uma seleção de 100 canais e duas colunas (um composto separado em uma coluna, e a outra consistindo da soma de todos os outros compostos), a construção do elemento $A_{i,j}$ da matriz de covariância será determinado por:

$$A_{i,j} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma^2} f_k(x_i) f_l(x_i) \quad (4.10)$$

o fator de normalização, σ , é dado por: $0.1 * T(i, 1)$, onde T é a contagem espectral total da amostra para o canal i . A expressão, que determina a normalização, foi repassada pelo autos de [MERIC \(2012\)](#). Tratam-se de boas práticas e que contribuem significativamente no trabalho do cálculo de matrizes de covariância de dimensão 2.

3. A expressão à direita da igualdade dos mínimos quadráticos será dada por:

$$H_l = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} f_k(x_i) y_i \quad (4.11)$$

A expressão de normalização ($\frac{1}{\sigma^2}$), onde σ , mais uma vez, obedecerá à expressão do item anterior.

4.2 Resultados

4.2.1 Resultados Gerais/Tabelas

A Tabela 4.1 fornecerá as instâncias trabalhadas e as respectivas numerações, a fim de facilitar futuras referências. O motivo para a escolha dessas instâncias é que elas estão presentes em [MERIC \(2012\)](#) e serão usadas posteriormente, para comparação.

Os resultados mais gerais podem ser encontrados na Tabela 4.2. É possível perceber que a simples seleção, dentro do universo de conjuntos de frequência que é apresentado, é capaz de oferecer melhores valores de condicionamento do que os objetivos listados na Tabela 4.2.

Como visto na Seção 4.1, foi utilizado como parâmetro de entrada o número de 100 canais. Para o GRASP, o algoritmo “intervalos” divide o conjunto de canais em duas partições, cujo índice de canal de corte depende do composto isolado. Para as instâncias 3, 5 e 8, o índice de corte é 1384, enquanto que para as instâncias 2, 4, 6, 7 e 9 o índice é 977. Já para a instância 1 o índice gerado foi de 1659. Esta partição do conjunto de 2048 canais acarreta também uma partição dos 100 canais escolhidos para o GRASP, ao se impor que a quantidade desses canais escolhidos, retirados de cada conjunto, obedeça à proporção que os tamanhos das partições obedecem. No caso da instância 3, 5 e 8, a proporção determinada pelo Algoritmo 3 para o 1º conjunto foi de 67% contra 33% do 2º conjunto. Para as instâncias 2, 4, 6, 7 e 9, essa proporção foi de 47% no 1º conjunto, e de 52% no segundo conjunto. A instância 1, esses valores compreendem 81% do conjunto 1 e 19% do conjunto 2.

Instância	Compostos	Soma
1	sal	óleo + gas + água + background
2	óleo	sal + gas + água + background
3	água	sal + óleo + gás + background
4	gás	sal + óleo + água + background
5	água	óleo + gás + background
6	gás	água + óleo + background
7	óleo	gás + água + background
8	água	gás + background
9	gás	água + background

Tabela 4.1: Tabela contendo a descrição de cada uma das instâncias utilizadas durante a experimentação. Na primeira coluna, encontra-se a referência que será utilizada ao longo do texto; Na segunda coluna, a biblioteca isolada e, na última coluna, a soma de bibliotecas que serão usadas a fim de compor os dados.

Instância	Objetivo	Atingido	Ortogonalização	Ganho percentual 1	Ganho percentual 2
1	3.09	3.08	2.91	0.3%	5.82%
2	21.82	29.11	1.12	-33.4%	94.8%
3	50.62	64.91	1.14	-28.2%	97.7%
4	34.58	30.57	3.79	11.5%	89%
5	47	14.07	1.35	70%	97%
6	35.1	11.99	1.16	65.8%	96.6%
7	21.6	10.90	1.0	49.5%	95.3%
8	18	13.55	1.42	24.7%	92.1%
9	12.5	8.30	3.17	33.6%	74.6%

Tabela 4.2: Primeira coluna encontra-se a referência da instância; a segunda coluna, encontra-se o valor do condicionamento a que se pretende chegar, presente em [MERIC \(2012\)](#); terceira e quartas colunas, respectivamente, estão os valores atingidos durante as experimentações para o condicionamento da matriz de covariância e o da matriz de covariância ortogonalizada. As colunas de erros percentuais 1 e 2 são, respectivamente, os erros percentuais dos valores atingidos e objetivados, e dos valores atingidos ortogonalizados e dos objetivados

Algumas instâncias atingiram o objetivo rapidamente ao construir uma solução aleatória de 100 canais, como as instâncias 1, 4, 6 e 9. Outras instâncias conseguiram atingir o objetivo na primeira iteração da *busca*, seguida pelo *path-relinking* e uma nova busca, como as instâncias 5, 7 e 8. Instâncias 2 e 3 completaram todas as possíveis iterações passadas como parâmetro na chamada do GRASP e não conseguiram atingir o objetivo, apesar do condicionamento da matriz de covariância ortogonalizada estar extremamente abaixo do objetivo. A matriz de covariância ortogonalizada pode ser usada para resolução do sistema de equações, desde que os coeficientes encontrados usando essa matriz sejam transformados para a base canônica, em que a contagem espectral dos compostos está descrita.

O foco será, então, as instâncias 2 e 3, que passaram por toda a execução do GRASP. Os gráficos seguintes demonstrarão os resultados para essas duas instâncias.

4.2.2 Resultados Algoritmo Construtivo

Da Figura 4.1 até a Figura 4.6, demonstram os resultados na construção de soluções, tanto para a instância 2 como para a instância 3. São gráficos que evidenciam os resultados para o número de condicionamento da matriz de covariância, a matriz de covariância ortogonalizada e para a matriz que realiza a mudança da base canônica para base ortogonalizada. É possível verificar a aleatoriedade na construção das soluções.

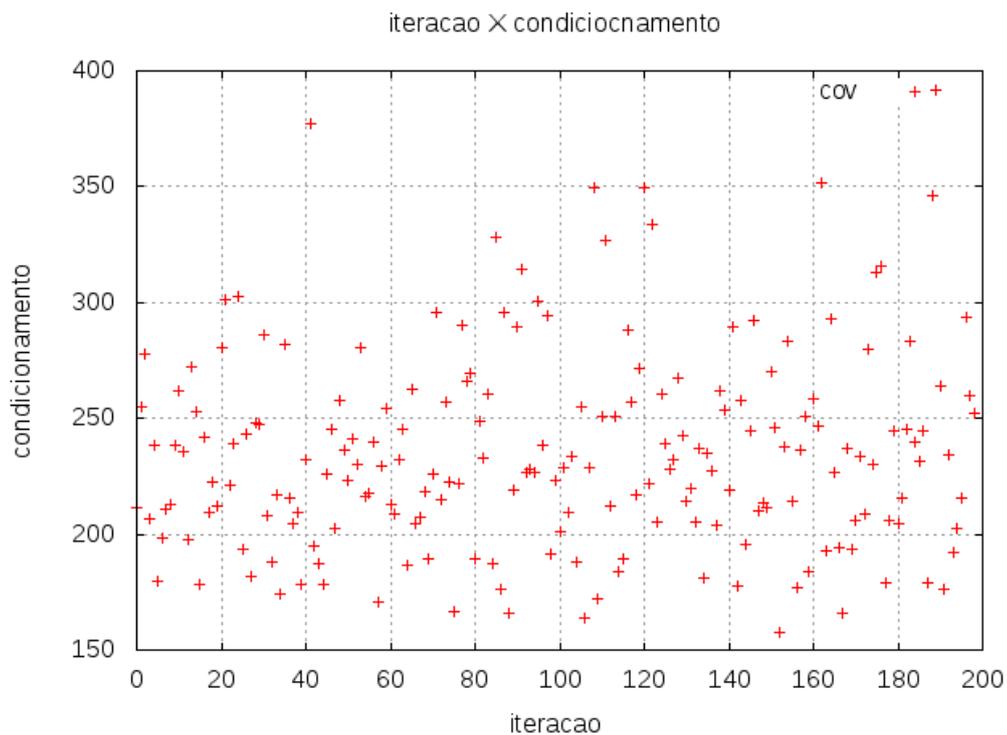


Figura 4.1: Valores de condicionamento para a matriz de covariância, fase construtiva, instância 3

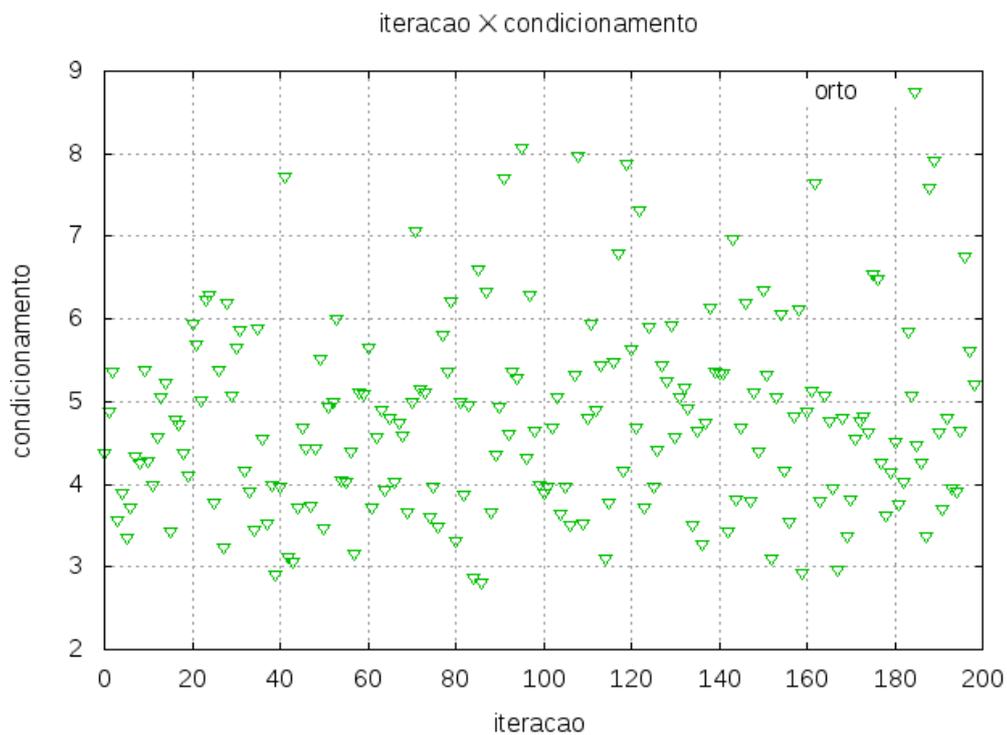


Figura 4.2: Valores de condicionamento para a matriz de covariância ortogonalizada, fase construtiva, instância 3

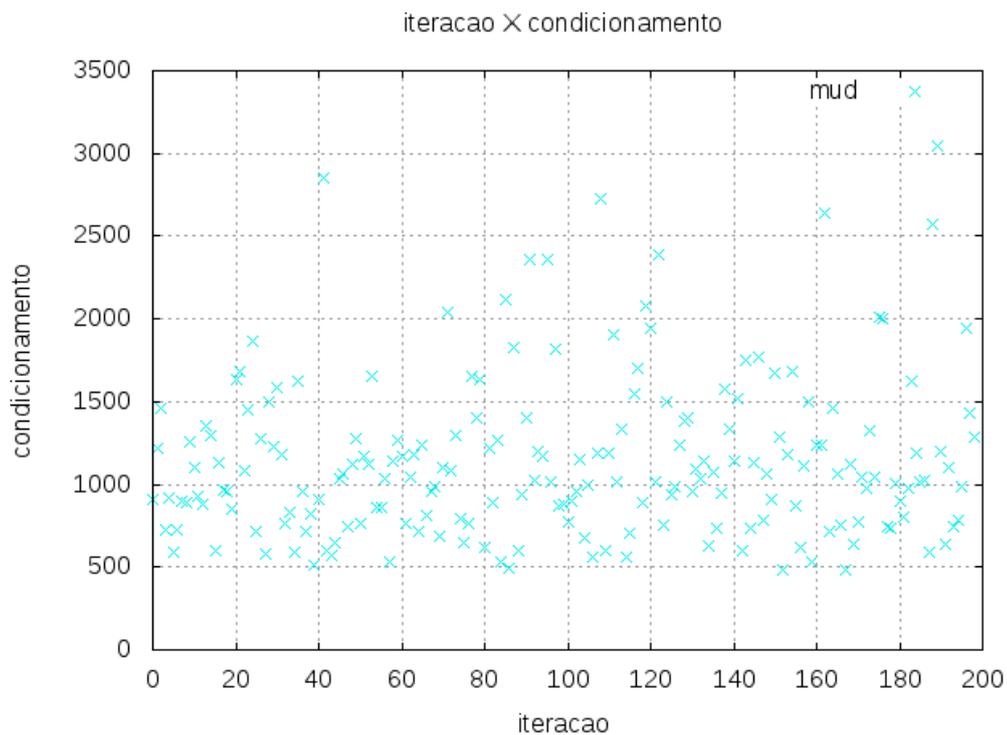


Figura 4.3: Valores de condicionamento para a matriz de mudança de base, fase construtiva, instância 3

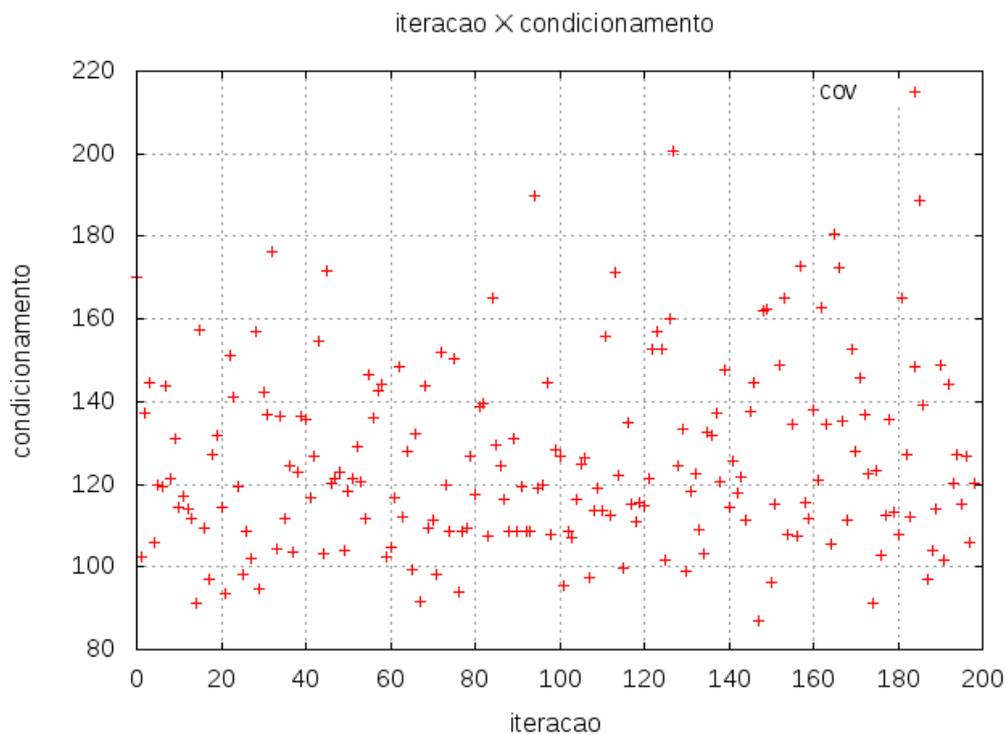


Figura 4.4: Valores de condicionamento para a matriz de covariância, fase construtiva, instância 2

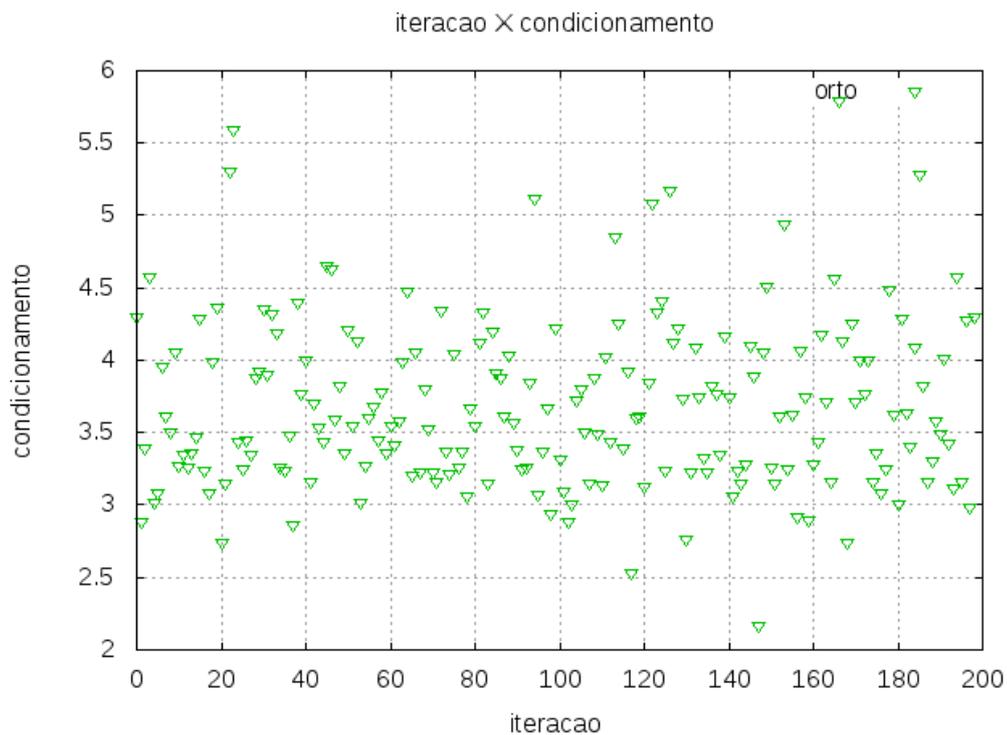


Figura 4.5: Valores de condicionamento para a matriz de covariância ortogonalizada, fase construtiva, instância 2

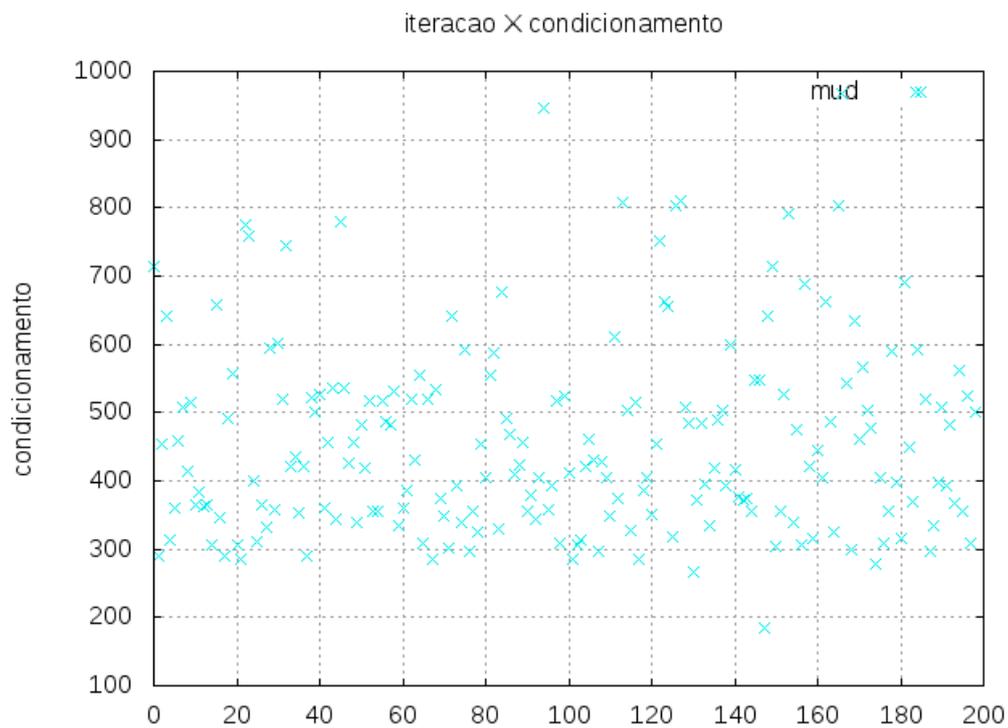


Figura 4.6: Valores de condicionamento para a matriz de mudança de base, fase construtiva, instância 2

Além da aleatoriedade na construção das soluções, pode-se perceber o extenso intervalo que o condicionamento das matrizes de covariância se encontra, evidenciado o grande espaço de soluções que existe. A justificativa para o uso de heurísticas no tratamento do problema pode residir nesse ponto. É relevante mencionar que, para matrizes de covariância de dimensão 2, como as presentes para a construção dos gráficos da Figura 4.1 à Figura 4.6, o processo de ortogonalização contribui bruscamente para a diminuição no número de condicionamento (Figura 4.2 e Figura 4.5). As matrizes de mudança de base (cujos condicionamentos estão explícitos na Figura 4.3 e Figura 4.6) apresentam valores de condicionamento que são maiores que os valores de condicionamento das matrizes de covariância.

4.2.3 Resultados 1° Busca Local

Comprovou-se, também, a efetividade da busca local, em torno da solução do passo construtivo do GRASP, na procura por matrizes de covariância que tenham melhor condicionamento. Os resultados estão descritos da Figura 4.7 a Figura 4.12. Os valores são para três iterações da busca local, já que, para uma única chamada da busca local, ela realiza um número indefinido de iterações. O critério de parada será que nenhuma solução melhor do que a solução corrente, em uma determinada iteração, seja encontrada. Importante destacar, mais uma vez, da mesma maneira como ocorreu no processo de construções de soluções, que as matrizes de covariância ortogonalizadas (Figura 4.8 e Figura 4.11) apresentaram um valor de condicionamento menor do que as matrizes de covariância comum (Figura 4.7 e Figura 4.10) e as matrizes de mudança de base (Figura 4.9 e Figura 4.12). A conversão para bases ortogonalizadas tendem a contribuir para que o condicionamento caia. A aproximação do sistema de equações lineares, por mínimo quadrados, pode ser realizada por meio de matrizes ortogonalizadas, com devidas correções posteriores.

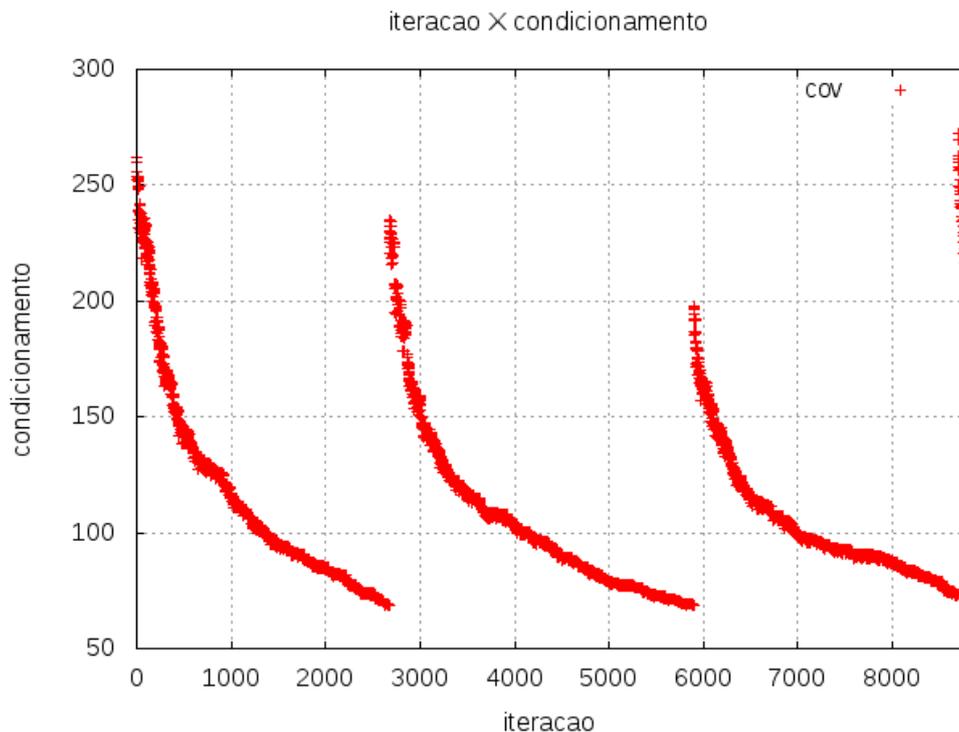


Figura 4.7: Valores de condicionamento para a matriz de covariância, 3 chamadas da primeira busca local realizada para a instância 3

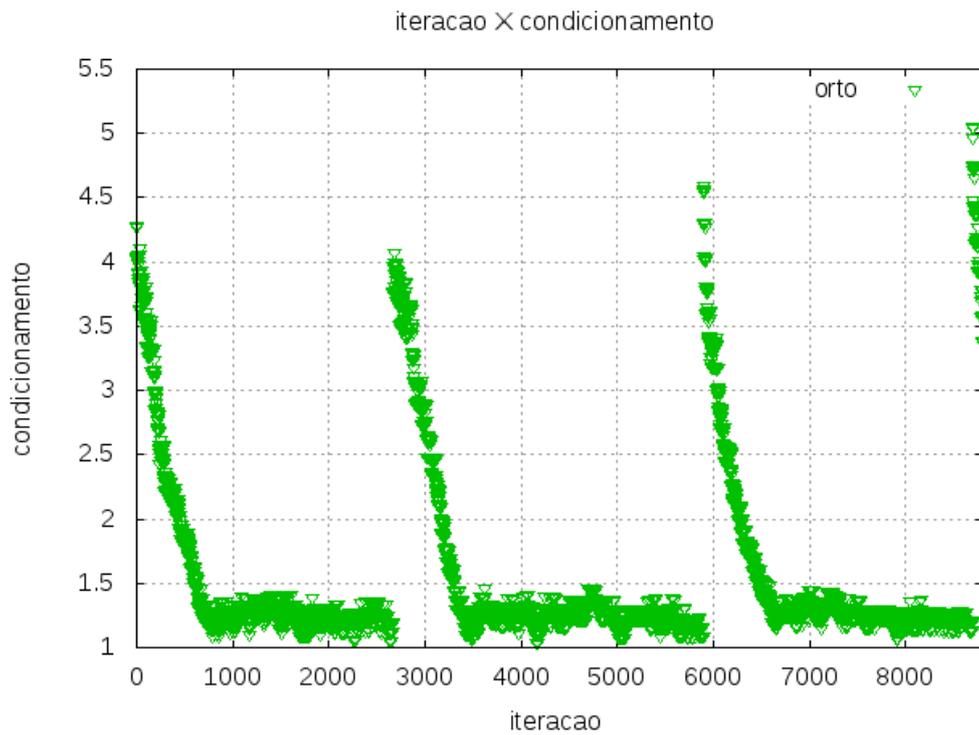


Figura 4.8: Valores de condicionamento para a matriz de covariância ortogonalizada, 3 chamadas da primeira busca local realizada para a instância 3

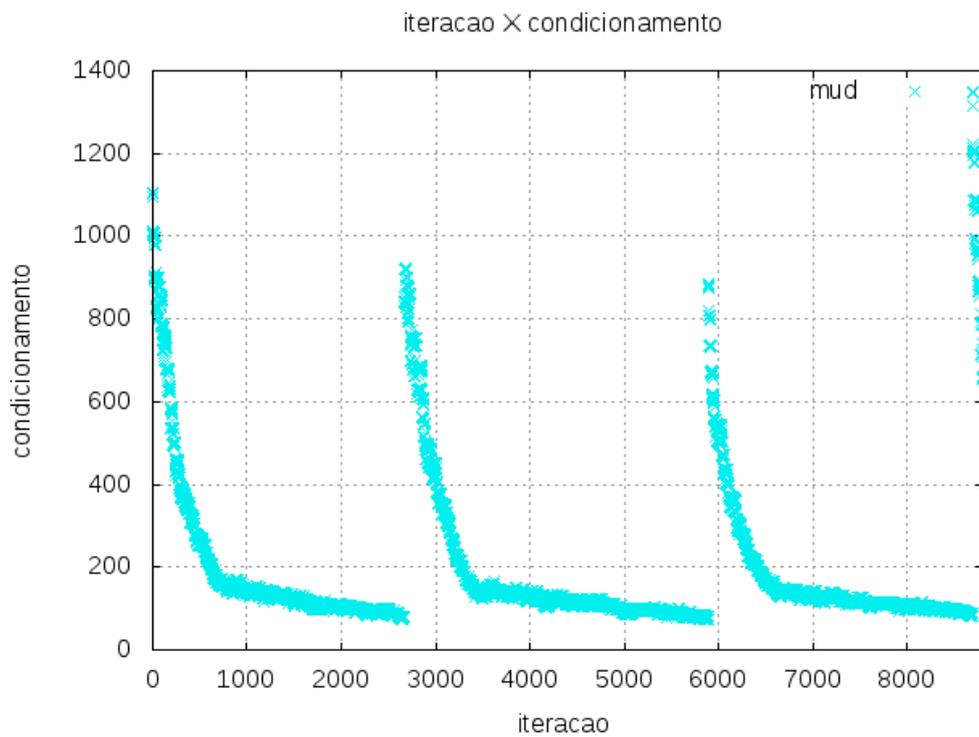


Figura 4.9: Valores de condicionamento para a matriz de mudança de base, 3 chamadas da primeira busca local realizada para a instância 3

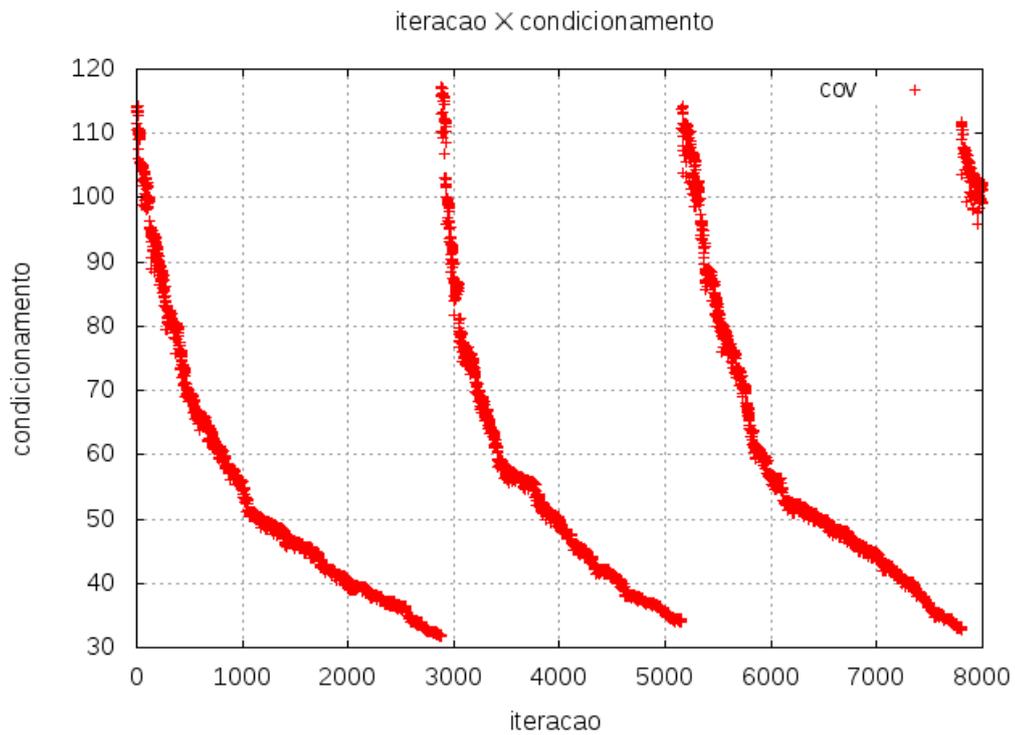


Figura 4.10: Valores de condicionamento para a matriz de covariância, 3 chamadas da primeira busca local realizada para a instância 2

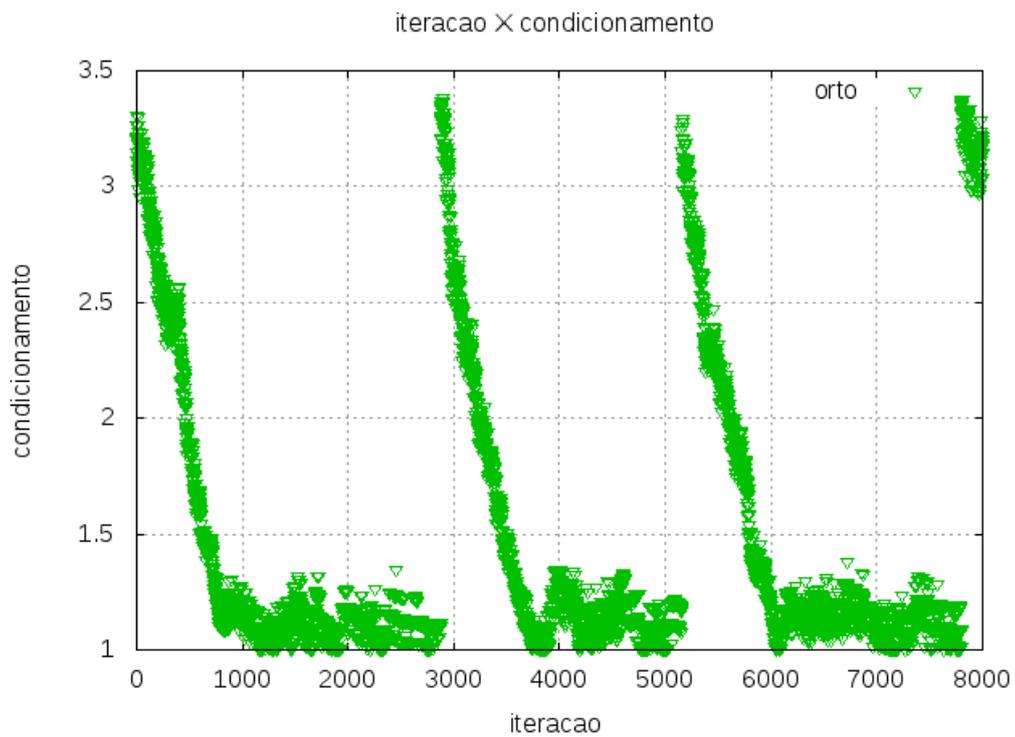


Figura 4.11: Valores de condicionamento para a matriz de covariância ortogonalizadas, 3 chamadas da primeira busca local realizada para a instância 2

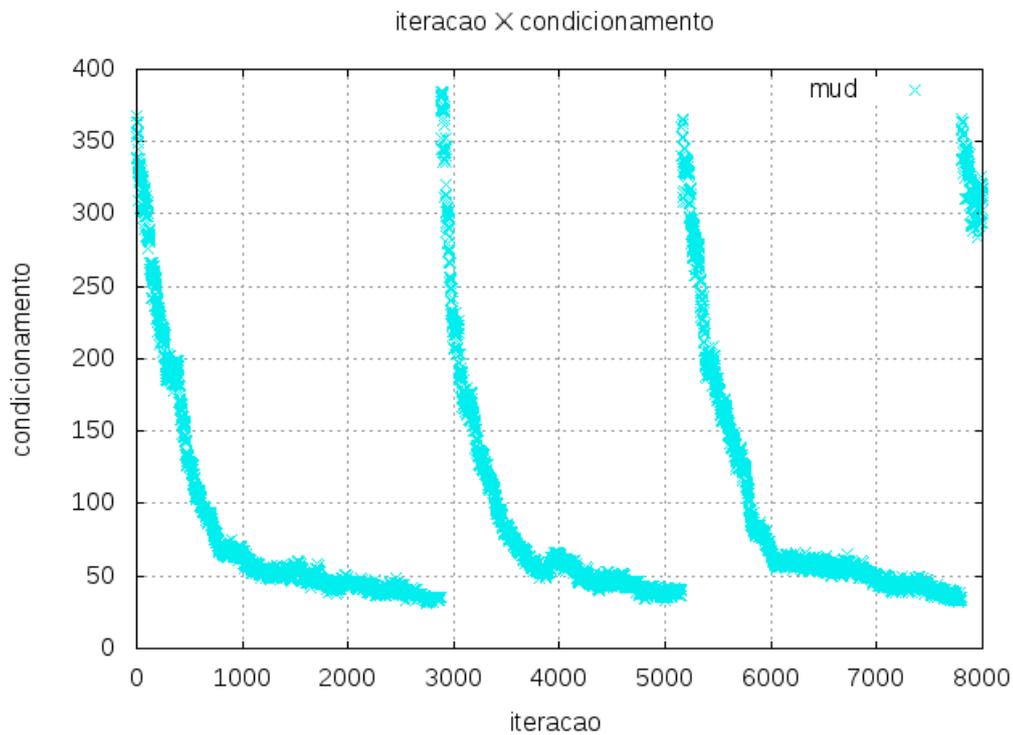


Figura 4.12: Valores de condicionamento para a matriz de mudança de base, 3 chamadas da primeira busca local realizada para a instância 2

4.2.4 Resultados Path-Relinking

Os resultados para o Path-Relinking, para três diferentes chamadas do algoritmo, a partir do GRASP (Algoritmo 1), para as instâncias 2 e 3 da Tabela 4.1, podem ser conferidos da Figura 4.13 à Figura 4.18.

A execução do Algoritmo 8 contribue significativamente para a diminuição do condicionamento, de acordo com as figuras compreendidas entre Figura 4.13 e Figura 4.18, a partir do dado de entrada que possui o pior valor de condicionamento (a solução início do path-relinking). Da mesma maneira que nos resultados apresentados em Seção 4.2.2 e em Seção 4.2.3, é possível comprovar que as soluções ortogonalizadas (Figura 4.14 e Figura 4.17) possuem melhores valores de condicionamento que as matrizes de covariância (Figura 4.13 e Figura 4.16) e as matrizes de mudança de base (Figura 4.15 e Figura 4.18).

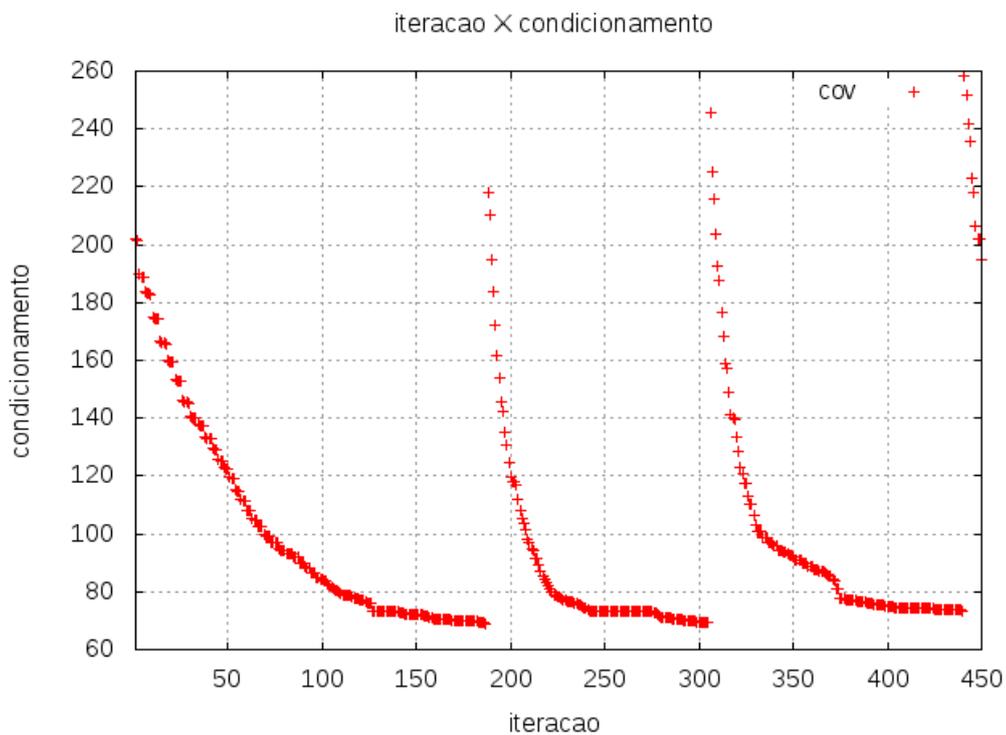


Figura 4.13: Valores de condicionamento para a matriz de covariância, 3 chamadas do path-relinking, realizada para a instância 3

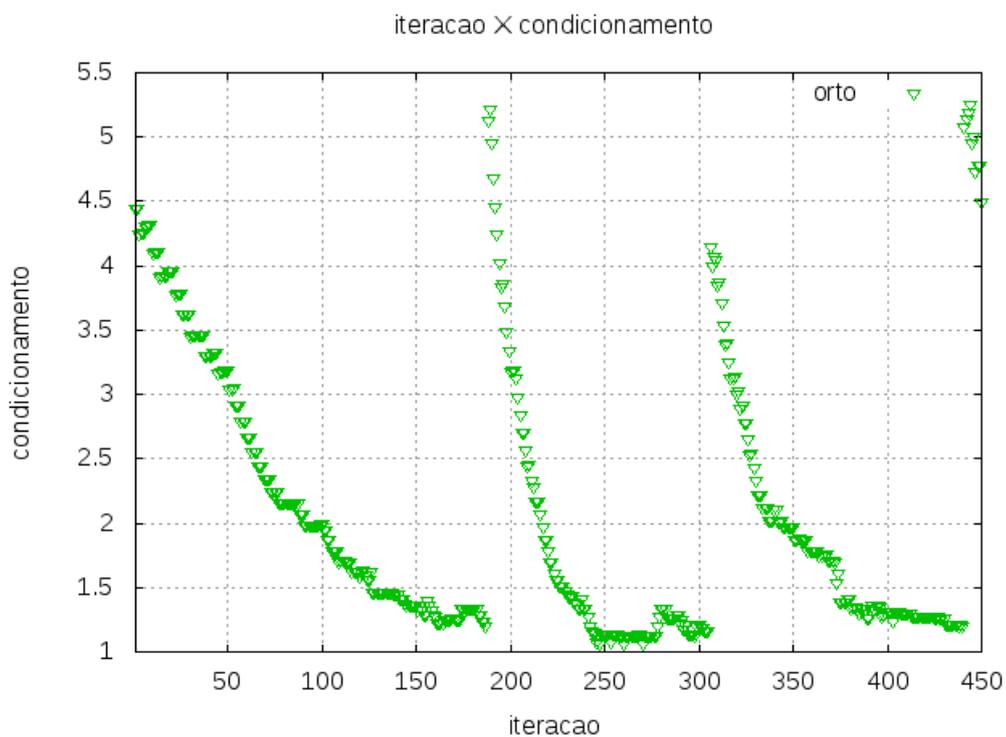


Figura 4.14: Valores de condicionamento para a matriz de covariância ortogonalizada, 3 chamadas do path-relinking, realizada para a instância 3

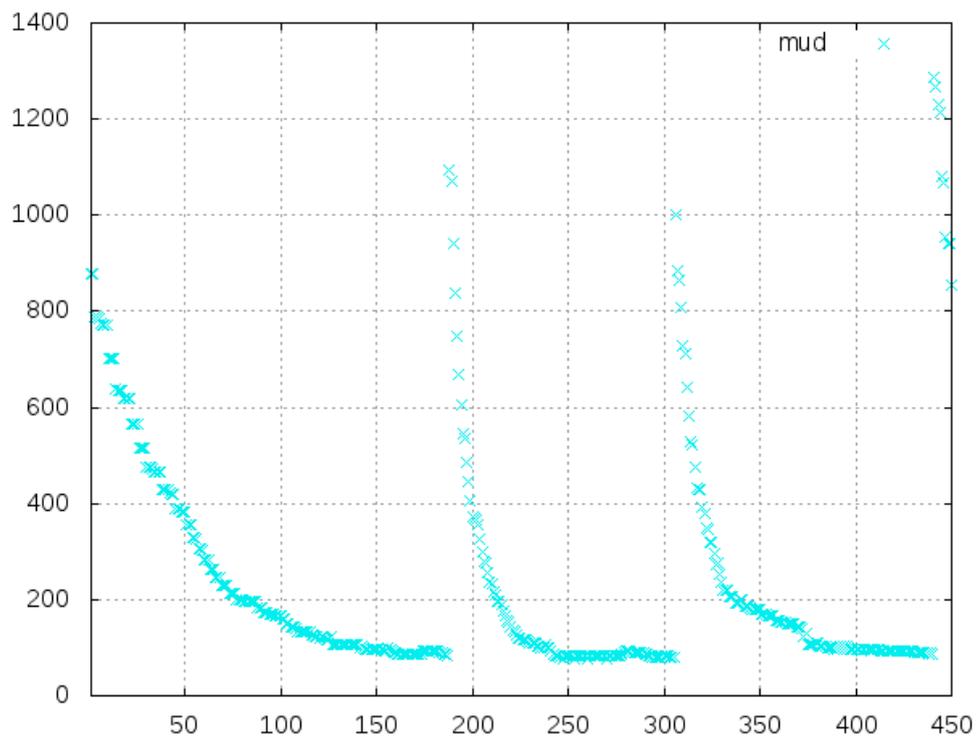


Figura 4.15: Valores de condicionamento para a matriz de mudança de base, 3 chamadas do path-relinking, realizada para a instância 3

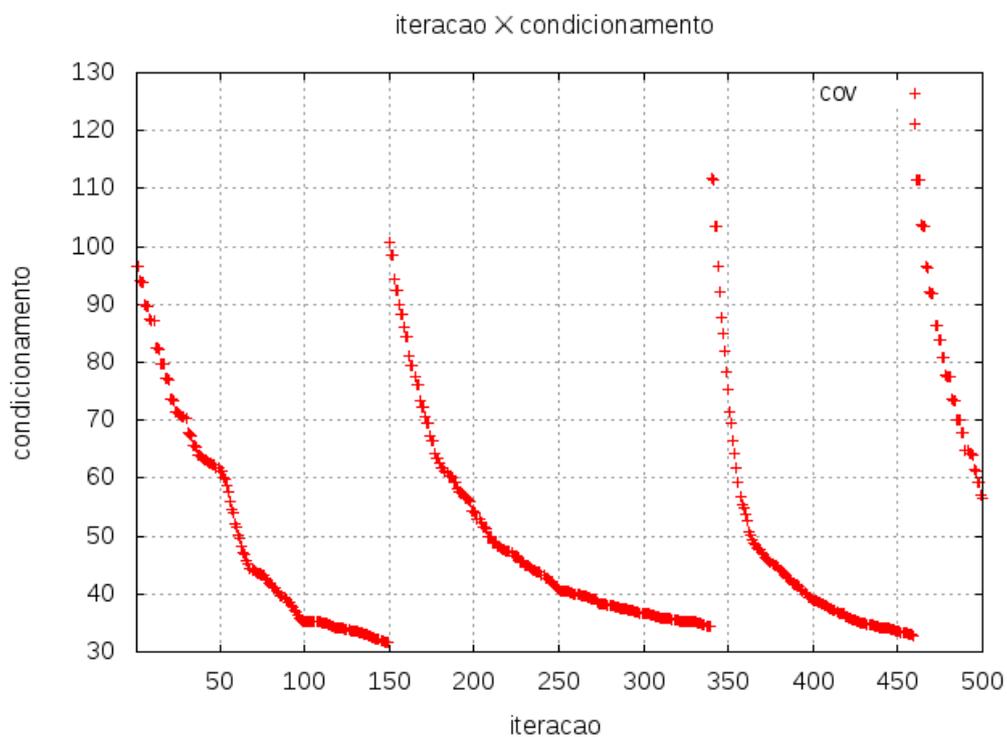


Figura 4.16: Valores de condicionamento para a matriz de covariância, 3 chamadas do path-relinking, realizada para a instância 2

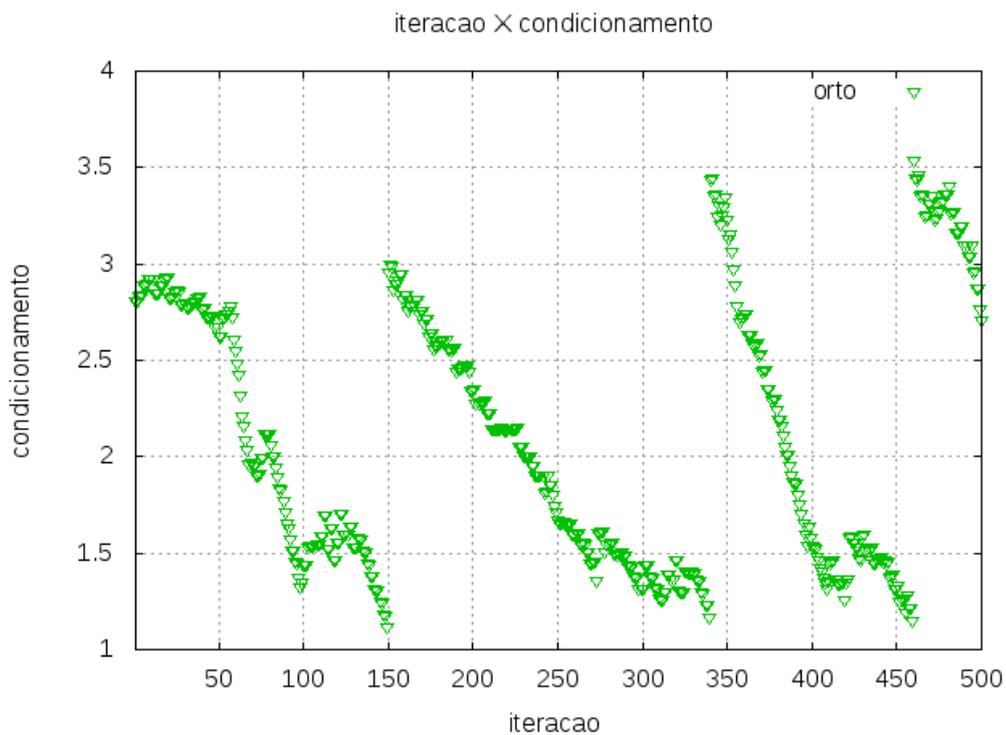


Figura 4.17: Valores de condicionamento para a matriz de covariância ortogonalizada, 3 chamadas do path-relinking, realizada para a instância 2

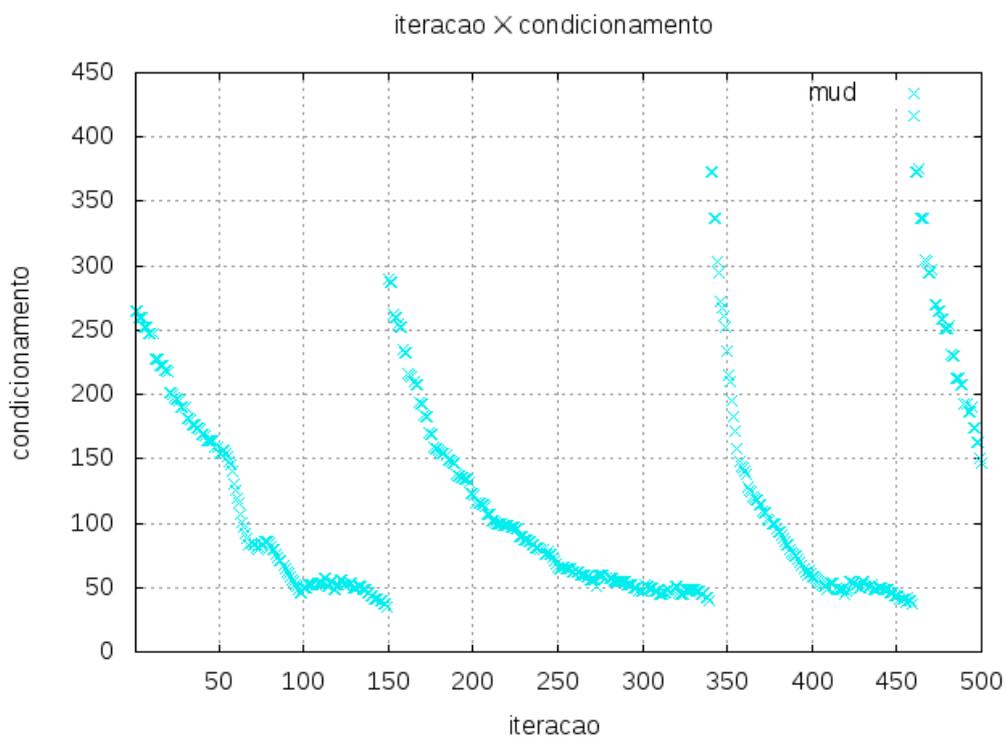


Figura 4.18: Valores de condicionamento para a matriz de mudança de base, 3 chamadas do path-relinking, realizada para a instância 2

4.2.5 Resultados 2° Busca Local

Da Figura 4.19 à Figura 4.24 contém os resultados para aproximadamente 3000 iterações e 3 chamadas da segunda execução da busca local. As iterações realizadas durante a primeira busca local e o *path-relinking* são tão significativas que a execução de uma segunda busca local não alcança êxito em melhorar soluções, como pode ser visto nos gráficos das Figura 4.19 até o gráfico da Figura 4.24. O que pode ser percebido é que as soluções apresentam uma tendência de convergência a intervalos cada vez menores à medida que as iterações são realizadas(Figura 4.19, Figura 4.22, Figura 4.21 e Figura 4.24), com exceção dos resultados na Figura 4.20 e na Figura 4.23, que tendem a um comportamento estocástico.

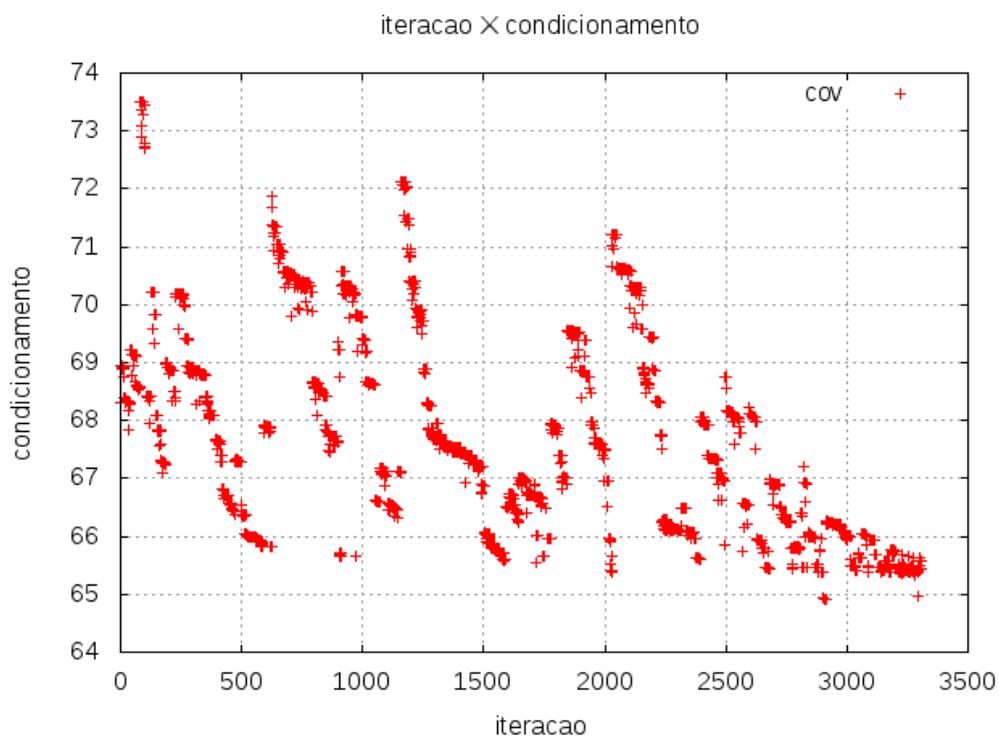


Figura 4.19: Valores de condicionamento para a matriz de covariância, 3 chamadas da busca local, realizada para a instância 3

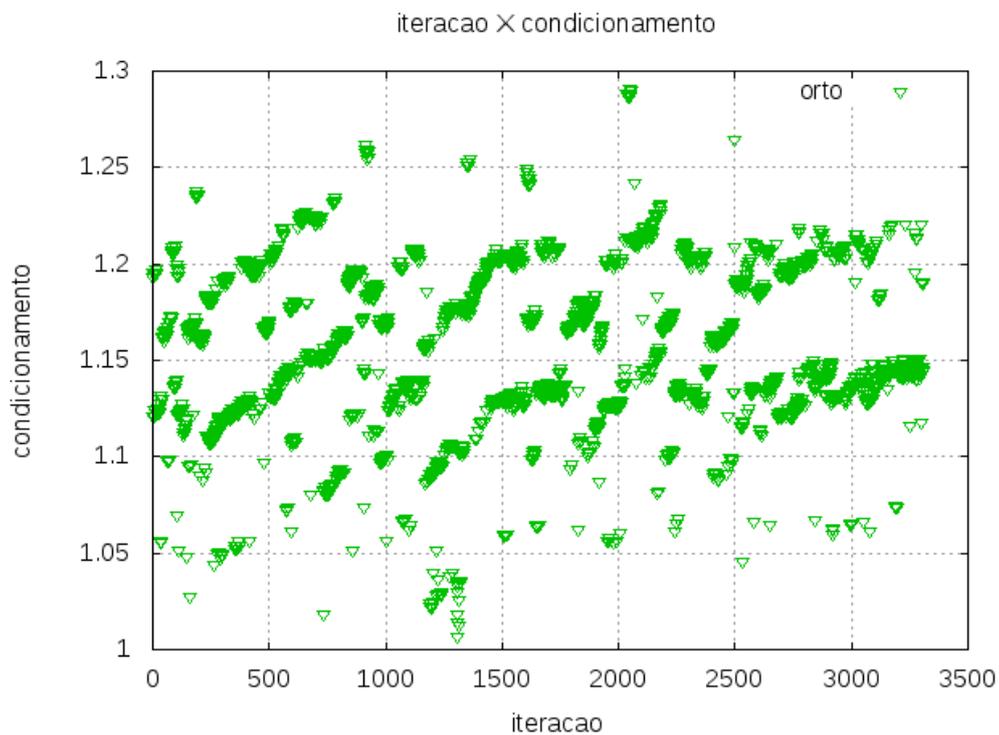


Figura 4.20: Valores de condicionamento para a matriz de covariância ortogonalizada, 3 chamadas da busca local, realizada para a instância 3

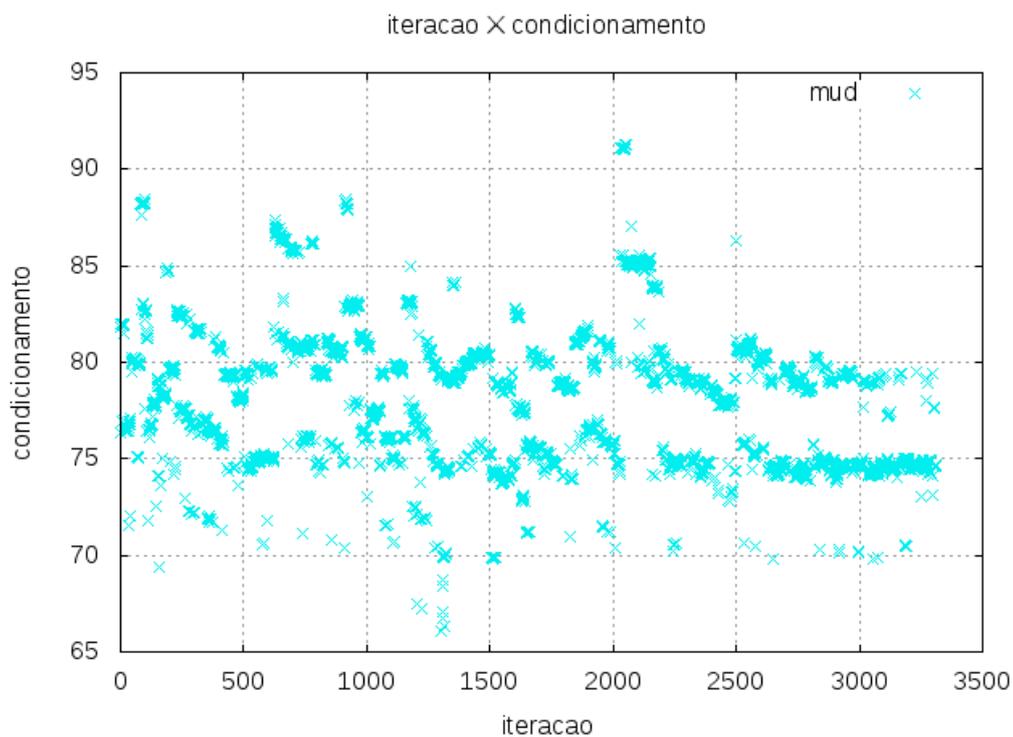


Figura 4.21: Valores de condicionamento para a matriz de mudança de base, 3 chamadas da busca local, realizada para a instância 3

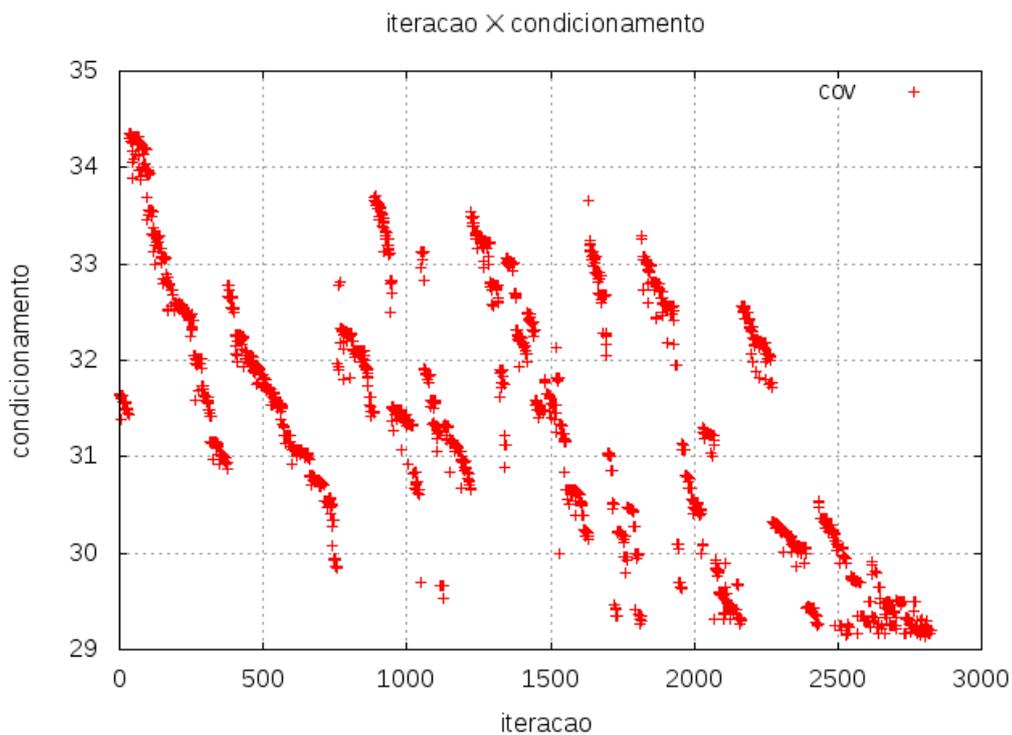


Figura 4.22: Valores de condicionamento para a matriz de covariância, 3 chamadas da busca local, realizada para a instância 2

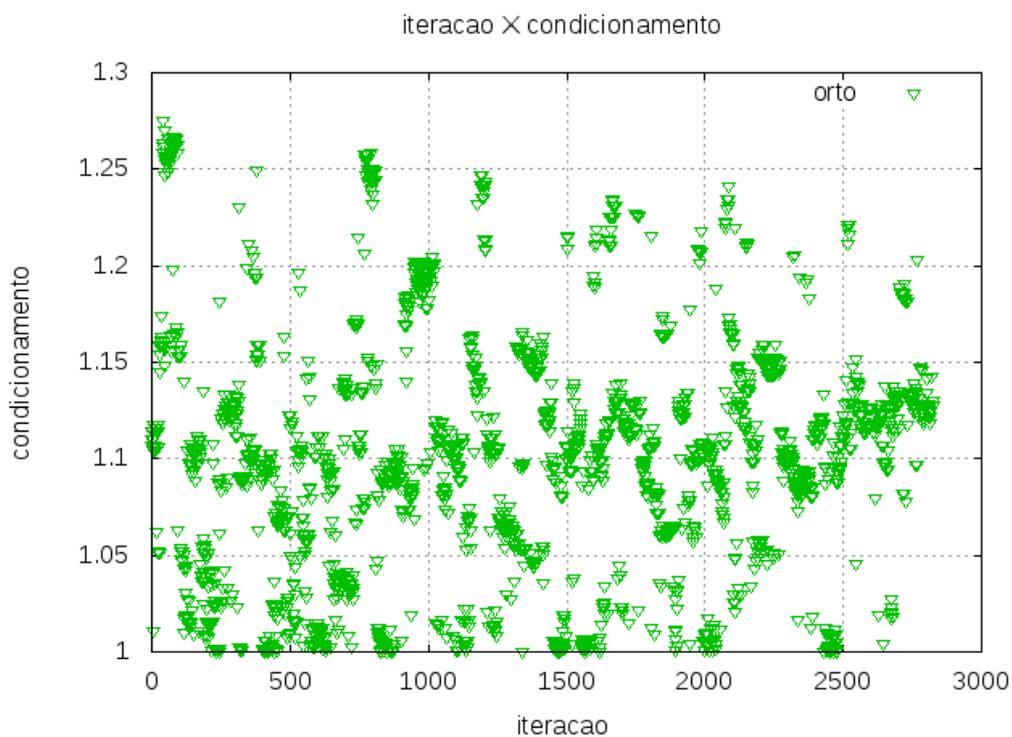


Figura 4.23: Valores de condicionamento para a matriz de covariância ortogonalizada, 3 chamadas da busca local, realizada para a instância 2

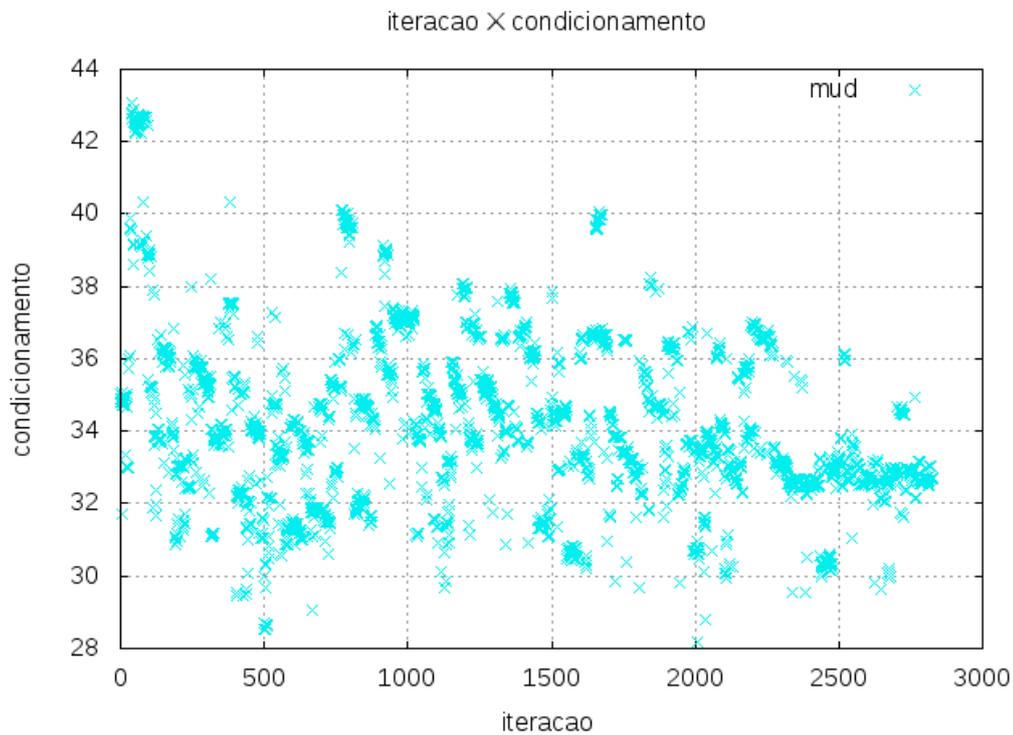
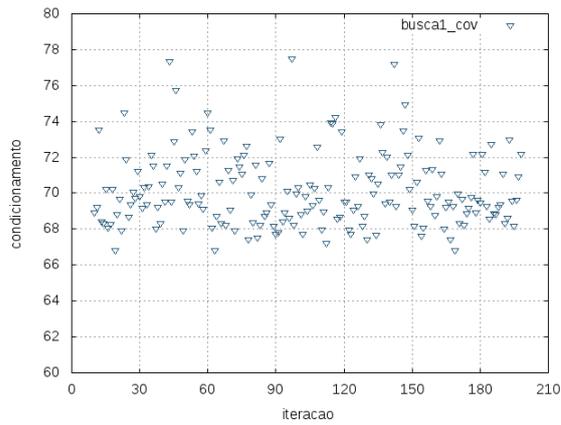


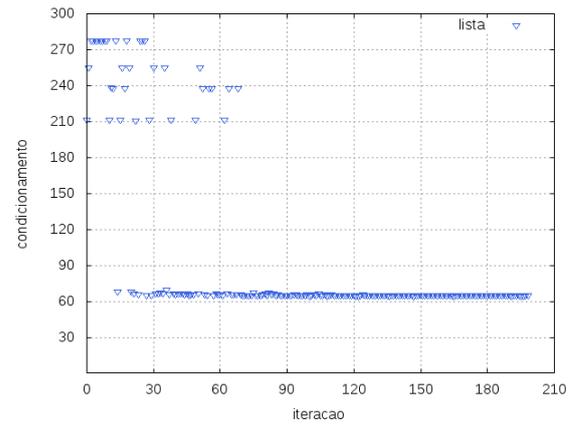
Figura 4.24: Valores de condicionamento para a matriz de mudança de base, 3 chamadas da busca local, realizada para a instância 2

4.2.6 Resultados do Grasp

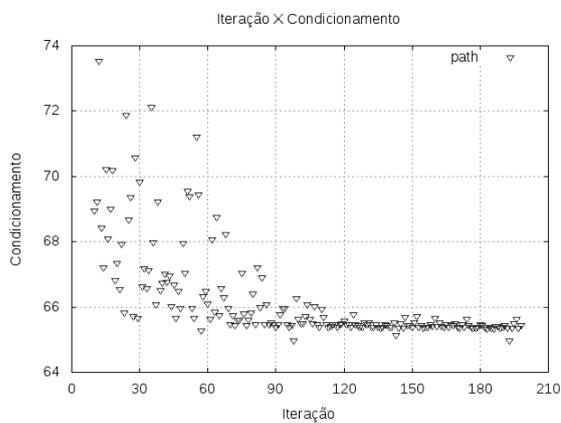
As saídas do GRASP, para cada uma das 200 iterações realizadas, podem ser conferidas na Figura 4.25 e na Figura 4.26, para as instâncias 2 e 3. Os valores de condicionamento tendem a convergir, de acordo com as figuras Figura 4.25(c), Figura 4.25(d), Figura 4.25(e), Figura 4.25(f), Figura 4.26(b), Figura 4.26(c), Figura 4.26(d), Figura 4.26(e) e Figura 4.26(f). Essa convergência ocorre rapidamente, na maior parte dos casos antes das 100 primeiras iterações. Atingido esse valor limite, dificilmente o número de condicionamento das matrizes de covariância irá diminuir.



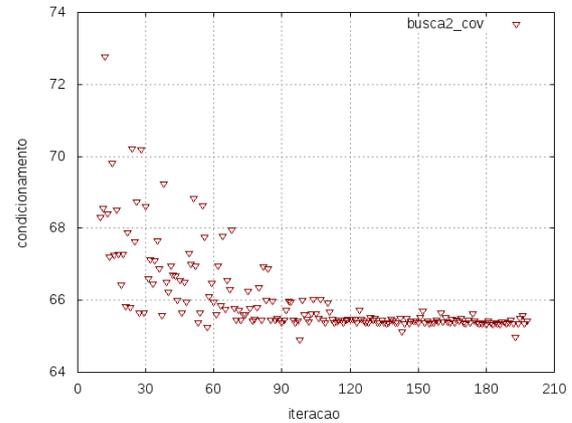
(a) saídas da 1ª busca. Matrizes de covariância



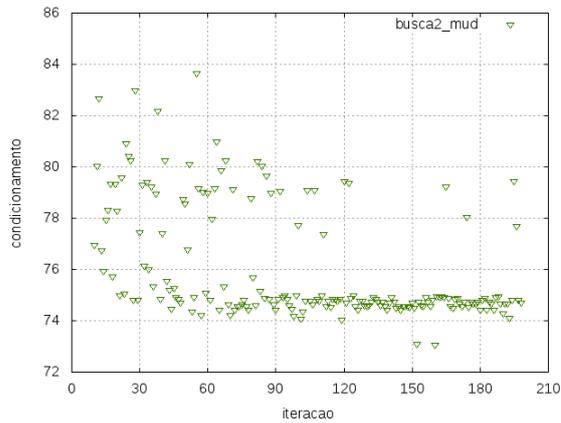
(b) saídas da lista do GRASP. Matrizes de covariância



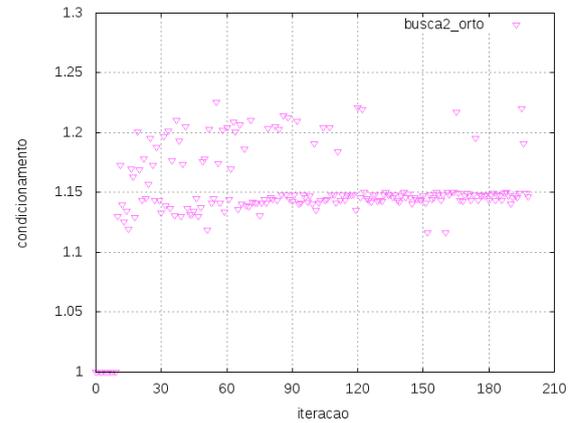
(c) saídas do path-relinking. Matrizes de covariância



(d) saídas 2ª busca. Matrizes de Covariância

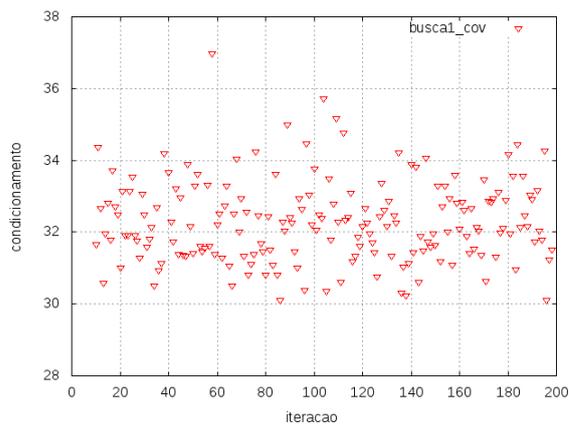


(e) saídas 2ª busca. Matrizes de Mudança de base

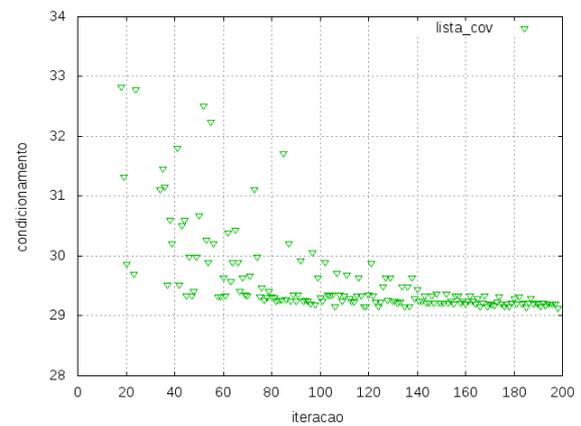


(f) saídas 2ª busca. Matrizes de Covariância ortogonalizadas

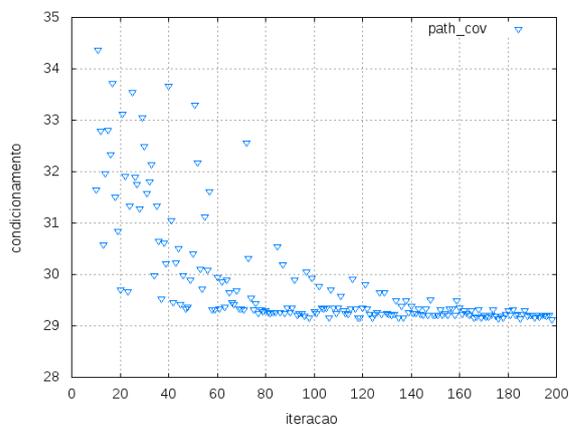
Figura 4.25: Resultados globais do GRASP, para cada uma das subrotinas que o compõe, Algoritmo 6, Algoritmo 7 e Algoritmo 8 (instância 3, água contra a soma de todos os outros componentes). (a) Condicionamento da matriz de covariância ao fim da primeira busca do GRASP. (b) Condicionamento da matrizes de covariância escolhidas a partir da lista do GRASP para serem inseridas na subrotina do *path-relinking*. (c) Valores de condicionamento das matrizes de covariância ao fim do *path-relinking* (d) valores de condicionamento das matrizes de covariância ao fim da segunda busca do GRASP. (e) valores de condicionamento das matrizes de mudança de base ao fim da segunda busca local do GRASP. (f) valores de condicionamento das matrizes de covariância ortogonalizadas ao fim da segunda busca local do GRASP. Foi dada uma atenção especial à segunda busca local do GRASP por ser o fim das principais subrotinas do GRASP.



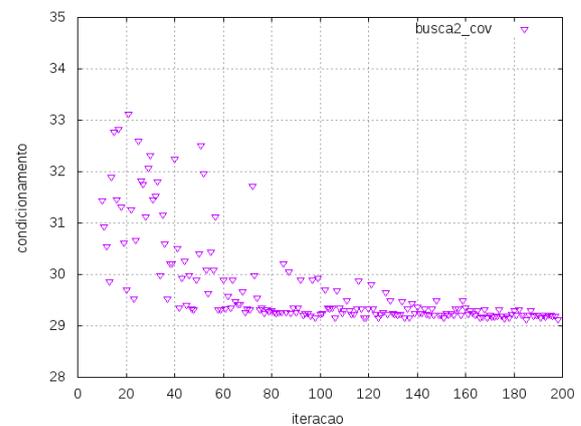
(a) saídas da 1ª busca. Matrizes de covariância



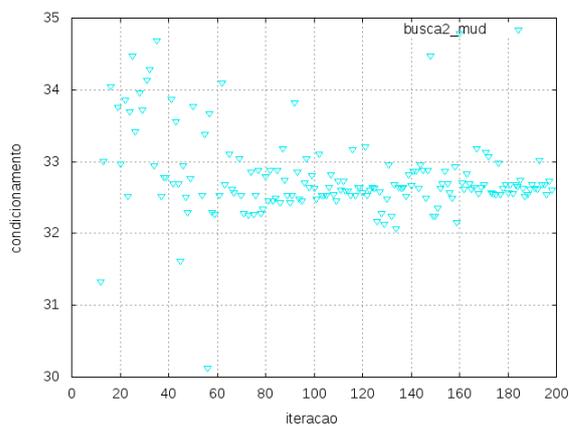
(b) saídas da lista do GRASP. Matrizes de covariância



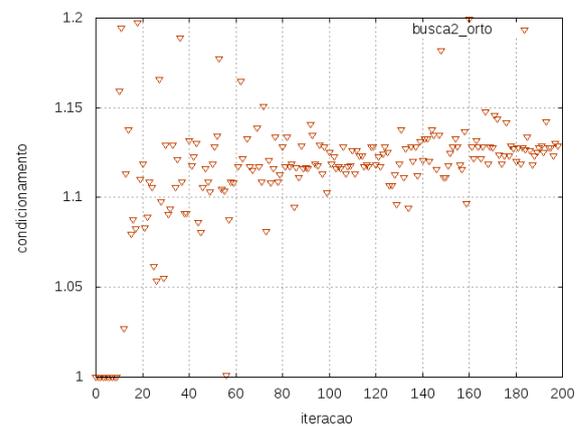
(c) saídas do path-relinking. Matrizes de covariância



(d) saídas 2ª busca. Matrizes de Covariância



(e) saídas 2ª busca. Matrizes de Mudança de base



(f) saídas 2ª busca. Matrizes de Covariância ortogonalizadas

Figura 4.26: resultados globais do GRASP, para cada uma das subrotinas que o compõe, Algoritmo 6, Algoritmo 7 e Algoritmo 8 (instância 2, óleo contra a soma de todos os outros componentes). (a) Condicionamento da matriz de covariância ao fim da primeira busca do GRASP. (b) Condicionamento da matrizes de covariância escolhidas a partir da lista do GRASP para serem inseridas na subrotina do *path-relinking*. (c) Valores de condicionamento das matrizes de covariância ao fim do *path-relinking* (d) valores de condicionamento das matrizes de covariância ao fim da segunda busca do GRASP. (e) valores de condicionamento das matrizes de mudança de base ao fim da segunda busca local do GRASP. (f) valores de condicionamento das matrizes de covariância ortogonalizadas ao fim da segunda busca local do GRASP. Foi dada uma atenção especial à segunda busca local do GRASP por ser o fim de um dos principais passos do GRASP.

4.2.7 Estudo do Condicionamento das Matrizes de Dimensão 5

Também são apresentados os resultados obtidos ao se trabalhar com matrizes de covariância maiores, como afirmado na Seção 4.1.6.2. Pode-se perceber que os resultados com matrizes de covariância de maior dimensão não atingem os mesmos valores que os resultados apresentados para as matrizes de covariância de dimensão 2.

Na Tabela 4.3, é apresentada a quantidade de conjuntos, e os respectivos limites dos dados globais. Apesar da amostra ser constituída de cinco compostos, o número de conjuntos sendo 4 significa que dois dos compostos anulam sua contagem espectral no mesmo canal.

No processo construtivo, como dito na Seção 4.1, os canais serão, para esse caso, escolhidos sucessivamente, podendo a diferença entre os canais sucessivos ser passado como parâmetro na chamado do GRASP. Os experimentos aqui realizados foram feitos com uma diferença de dois canais de um para o outro. Os resultados para esse caso estão descritos na Figura 4.27 à Figura 4.32. Como dois compostos anulam sua contagem espectral em um mesmo canal, fez-se a opção de construir essa matriz de dimensão 5 com uma coluna repetida de algum dos conjuntos dos dados.

Na apresentação dos resultados nessa seção, será dispensada uma visão mais detalhada das subrotinas que compõem o algoritmo GRASP. A efetividade desses algoritmos no cumprimento dos seus objetivos já foi comprovada da Seção 4.2.2 à Seção 4.2.5.

Pode-se perceber, pela Figura 4.27 à Figura 4.32, que é possível reduzir drasticamente os valores de condicionamento, por meio do GRASP. Na Figura 4.27, o valor de condicionamento inicial é da ordem de 10^{15} , chegando a valores da ordem de 10^7 . O processo de ortogonalização continua a melhorar o condicionamento das matrizes de covariância, mas essa melhora não é mais tão significativa quanto com matrizes de dimensão 2. Para Figura 4.29, é possível encontrar valores iniciando em 10^{14} e chegando a 10^7 . As matrizes de mudança de base é que apresentam uma variância menor no valor dos condicionamentos. Na Figura 4.31, os valores de condicionamento encontram-se no intervalo da ordem de 10 à ordem de 10^3 .

ordem	intervalo
1	[1 976]
2	[977 1384]
3	[1385 1658]
4	[1659 2048]

Tabela 4.3: Conjuntos discretos contidos nos dados globais.

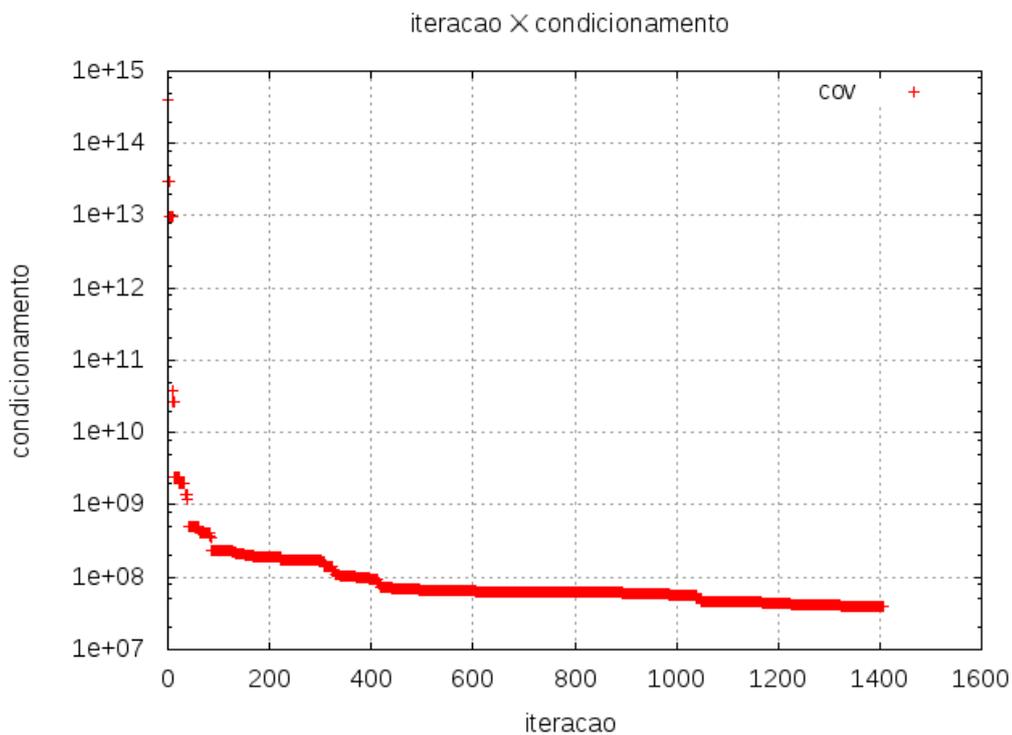


Figura 4.27: Valores de condicionamento para as matrizes de covariância de dimensão 5, canais escolhidos sucessivamente, com passo 2

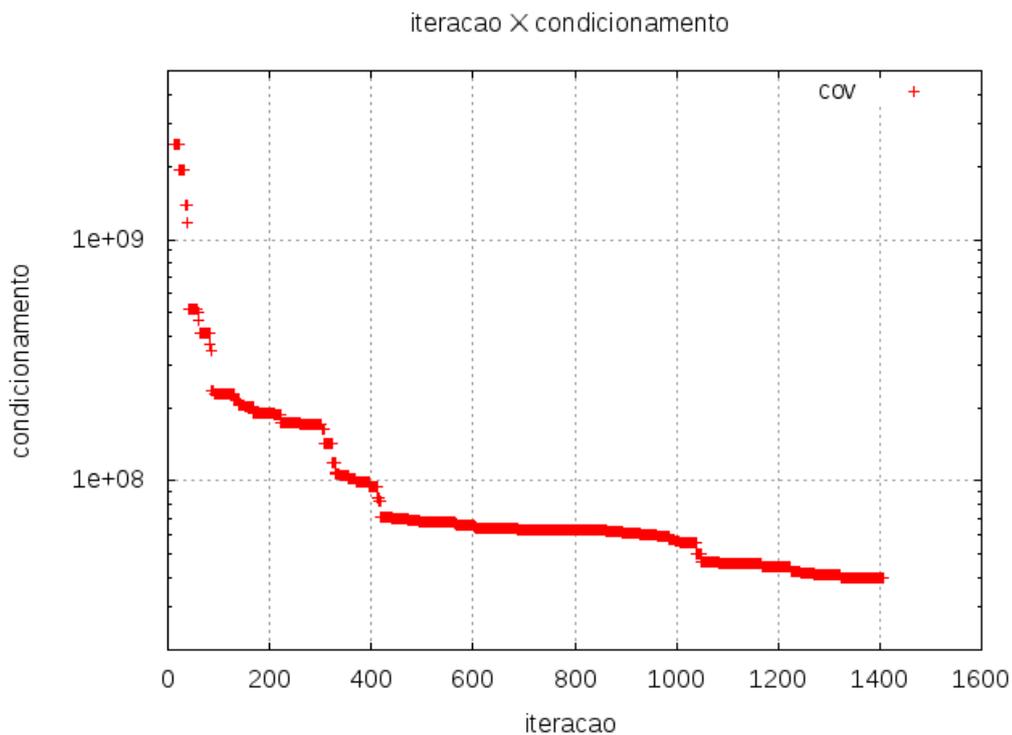


Figura 4.28: Delineação dos valores de condicionamento da Figura 4.27, nos intervalos compreendidos entre aproximadamente 0 e 10^{10}

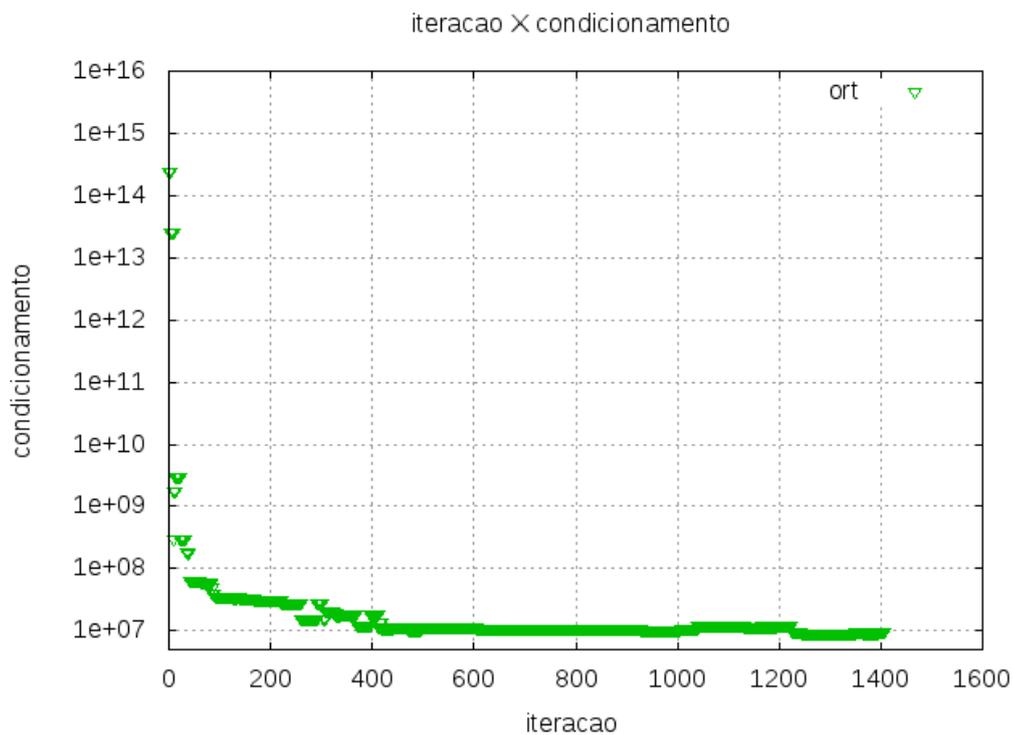


Figura 4.29: Valores de condicionamento para as matrizes de covariância ortogonalizada de dimensão 5, canais escolhidos sucessivamente, com passo 2.

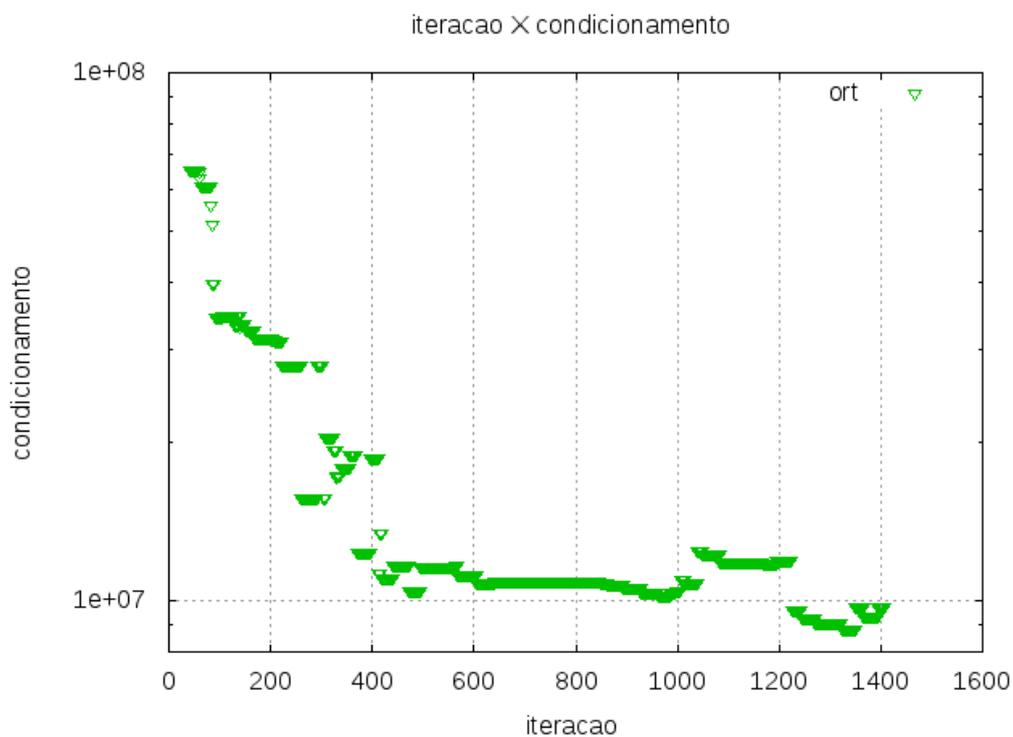


Figura 4.30: Delineação dos valores de condicionamento da Figura 4.29, nos intervalos compreendidos entre aproximadamente 10^6 e 10^8 .

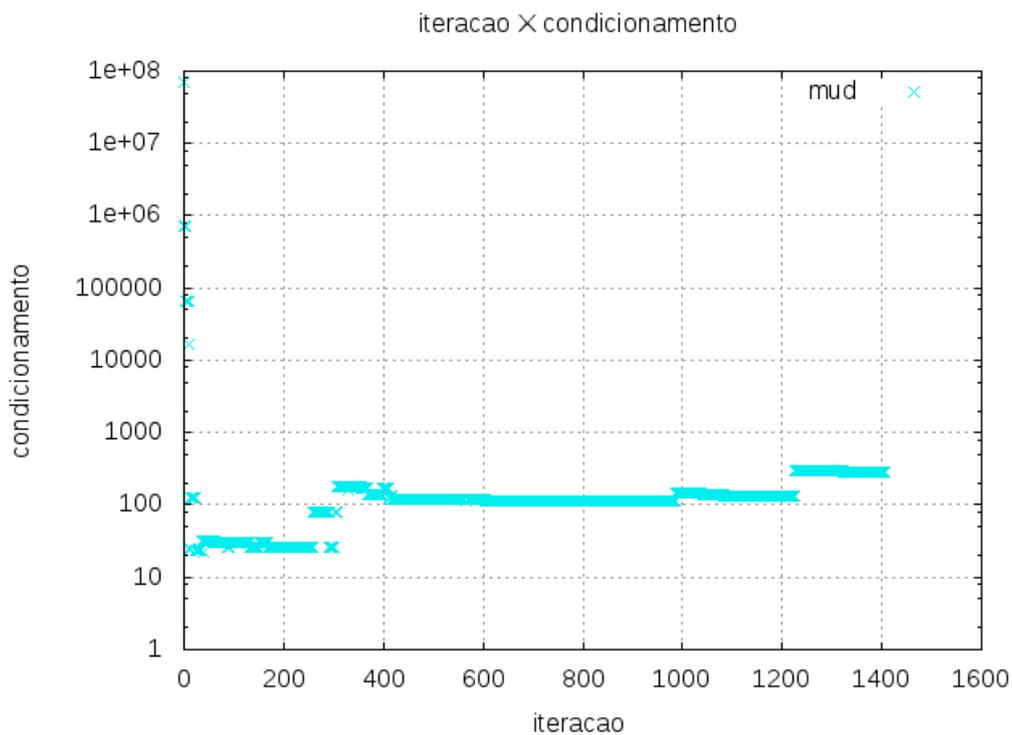


Figura 4.31: Valores de condicionamento para as matrizes de mudança de base de dimensão 5, canais escolhidos sucessivamente, com passo 2.

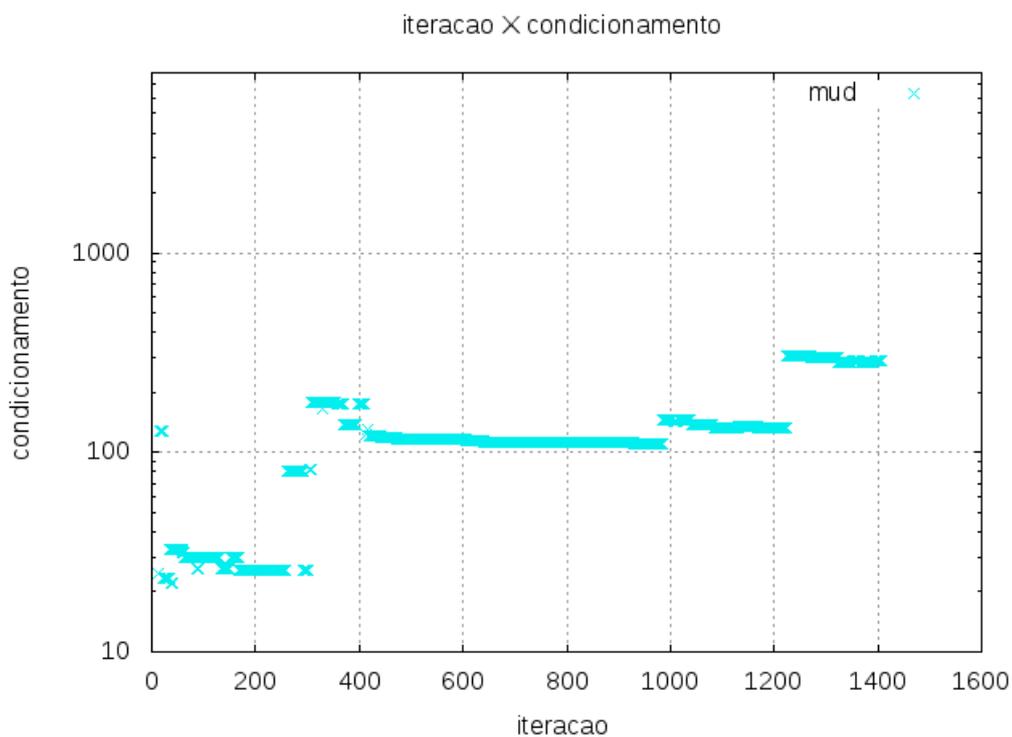


Figura 4.32: Delineação dos valores de condicionamento da Figura 4.31, nos intervalos compreendidos entre aproximadamente 10 e 10^3 .

5

Conclusões e Trabalhos Futuros

5.1 Conclusões

É possível notar a capacidade que a heurística GRASP apresenta ao lidar com o problema. Dentre as instâncias selecionadas para serem trabalhadas, ao total de 9, apenas duas delas apresentaram maior dificuldade em atingir os objetivos desejados, de acordo com a Tabela 4.2.

Outras instâncias atingiram seu objetivo com um número mínimo de iterações do GRASP, o que demonstra, mais uma vez, a capacidade da abordagem em dar um tratamento adequado na busca por soluções do problema.

Pode-se perceber, durante o processo de construção das soluções das instâncias 2 e 3, estudadas mais a fundo, que essas são totalmente aleatórias, não possuindo nenhum viés, ou vício, durante a construção das mesmas. Lembrando que na construção das soluções foram utilizados canais de seus respectivos intervalos, na mesma proporção presente nos dados originais. Isso inviabiliza o argumento de que a seleção de canais de algum determinado intervalo tenha sido privilegiada, ou que tenham sido utilizados valores de contagem espectral maiores ou menores, no intuito de se conseguir o objetivo descrito no trabalho.

O processo de busca mostrou-se ser um dos mais efetivos na melhora das soluções vindas do processo construtivo. A ordem de grandeza de diminuição do condicionamento nesse passo do algoritmo chegou a ser de 10, para as matrizes de dimensão 2.

As conclusões realizadas para os resultados da busca podem ser estendidas para o path-relinking. Nesse passo do algoritmo, também é visível a diminuição do número de condicionamento sendo da ordem de 10, para as matrizes de dimensão 2. Os gráficos presentes na Seção 4.2.4 denunciam essa evidência.

Observou-se que as matrizes de covariância de dimensão 2 apresentam valores de condicionamento mais aceitáveis que as matrizes de covariância de dimensão 5. A justificativa para esse fato não foi investigada a fundo sob à luz da definição de condicionamento, ficando, aí, uma proposta para trabalhos futuros. Então, até o momento, para o exemplo da análise de radiação gama, a determinação de fração em peso dos compostos que constituem a amostra tem que passar por diversas etapas intermediárias, uma para cada composto, fazendo as devidas separações entre

as bibliotecas, segundo descrito na metodologia, para uma aproximação mais real possível dos valores desejados. Isso não aconteceria se fosse possível trabalhar com matrizes de covariância, de baixo condicionamento, que possuíssem dimensão de igual valor ao número de compostos presentes nas amostras trabalhadas.

Obstantemente ao fato do GRASP não ter encontrado soluções que possuíssem condicionamento próximo à unidade para matrizes de dimensão 5, é possível perceber a grande contribuição da heurística em encontrar matrizes que tenham condicionamento bem menor do que as matrizes iniciais do algoritmo. No caso de matrizes de covariância, esse valor de condicionamento iniciou em valores da ordem de 10^{15} , e chegando a valores da ordem de 10^7 ao final do código. Para matrizes de covariância ortogonalizada, esse valores são de 10^{14} à 10^6 , enquanto que as matrizes de mudança de base apresentaram os menores valores de condicionamento, tendo sido apresentados valores no intervalo de 10^3 à 10

Para o caso de matrizes de dimensões maiores, construídas por vetores de compostos, como as matrizes de dimensão 5, é curioso observar um tendência contrária à observada em matrizes de dimensão menores no que diz respeito ao condicionamento das matrizes de covariância ortogonalizadas e matrizes de mudança de base. Para matrizes de dimensão 5, as matrizes de mudança de base apresentaram condicionamento que estavam no intervalo compreendido entre 10 a 10^3 e ordem de grandeza do condicionamento das matrizes de covariância ortogonalizadas não diferiu muita da ordem de grandeza das matrizes de covariância tradicional. No caso das matrizes de dimensão 2, as matrizes de mudança de base apresentaram maiores valores de condicionamento maiores relativamente ao casos das matrizes de covariância e das matrizes de covariância ortogonalizadas. Mas um fato que ambos os casos tem em comum é que atendem a propriedade multiplicativa de normas matriciais (equação (A.6)).

Observa-se, também, que as buscas por melhores soluções, após o path-relinking, não conseguem necessariamente uma diminuição nos valores de condicionamento das matrizes de dimensão 2, apesar de apresentar um leve tendência para que o condicionamento se enquadre em um intervalo de valores mais restrito que no início da busca (Seção 4.2.5)

As saídas do GRASP, descritas nas Figura 4.25 e Figura 4.26, apresentam valores iniciais de condicionamento elevados, tendendo a cair a cada iteração, mas é observada uma indicação de que os condicionamentos convirjam para um valor limite. Poderia se chegar a conclusão de que os dados trabalhados apresentam um limite para valores de condicionamento. Uma proposta de melhoria nos valores de condicionamento poderia, então, passar por começar a se trabalhar questões relativa à simulação de Monte Carlo, como, por exemplo, melhores técnicas de detecção de contagem espectral; melhor rastreabilidade do Background para um determinado conjunto de dados; amenização dos fatores que podem levar a uma grande quantidade de ruídos dos dados; fontes de nêutrons que emitam menos radiação gama; envoltórios de amostras e de fontes de neutrões que sejam menos emissoras de radiação, entre outros fatores que foram citados como grandes responsáveis pela emissão de radiação de fundo e que possa vir a estar interferindo profundamente nos resultados obtidos.

5.2 Trabalhos futuros

A proposta para trabalhos futuros encontra-se em se utilizar dos conhecimentos aprendidos neste trabalho no intuito de se calcular os valores de frações em peso. Para isso, seria utilizado o próprio GRASP. Apesar da simulação de Monte Carlo se utilizar de várias iterações para determinação da fração em peso dos compostos da amostra, sendo exitosa nesse objetivo, de acordo com [MERIC \(2012\)](#), durante a execução dos experimentos realizados pelo presente trabalho, foram encontrados valores próximos aos encontrados no trabalho citado acima, sendo, portanto, necessária uma análise mais profunda, no intuito de se conseguir, por meio do GRASP, encontrar valores de fração em peso que sejam condizentes com a realidade.

A segunda proposta para trabalhos futuros é uma melhor rastreabilidade da radiação de fundo, para um determinado conjunto de dados, utilizando-se, para isso, do conceito de coordenadas baricêntricas, de acordo com a figura Figura 5.1.

Uma outra proposta para trabalho futuros é lidar com a decomposição QR ([MACIEL \(2011\)](#)). Uma matriz definida positiva se:

- \mathbf{A} é simétrica ($\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$).
- $x \neq 0 \Rightarrow x^T \mathbf{A}x > 0$

Se $x \neq 0 \Rightarrow x^T \mathbf{A}x \geq 0$, então \mathbf{A} é *semi-definida positiva*. Se \mathbf{A} é definida positiva, então pode ser fatorada unicamente na forma $\mathbf{A} = \mathbf{G}^T \mathbf{G}$, onde \mathbf{G} é triangular superior com elementos positivos em sua diagonal. Prova pode ser encontrada em [STEWART \(1998\)](#). Esta é a decomposição de Cholesky.

Uma matriz \mathbf{A} pode ser fatorada na forma $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$ se a matriz \mathbf{A} possui posto completo. A decomposição é única devido à unicidade da decomposição de Cholesky.

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} = (\mathbf{Q}_1 \mathbf{R}_1)^T (\mathbf{Q}_1 \mathbf{R}_1) = \mathbf{R}_1^T \mathbf{R}_1 \quad (5.1)$$

sendo $\mathbf{G} = \mathbf{R}_1^T$ o fator de Cholesky de $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$. Considere, então, $\mathbf{Q}_1 = \mathbf{A} \mathbf{R}_1^{-1}$, \mathbf{Q}_1 é único devido à unicidade de do fator de Cholesky. Dentre as propriedades, pode-se citar: (1) \mathbf{Q} sendo ortogonal, o posto de \mathbf{A} é igual ao posto de \mathbf{R} (2) O espaço gerado pelas colunas de \mathbf{A} é igual ao espaço gerados pelas colunas de \mathbf{Q} . (3) A decomposição $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$, onde \mathbf{a}_j são colunas de \mathbf{A} , pode ser escrito como um conjunto de equações:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= r_{11} \mathbf{q}_1 \\ \mathbf{a}_2 &= r_{12} \mathbf{q}_1 + r_{22} \mathbf{q}_2 \\ &\vdots \end{aligned} \quad (5.2)$$

$$\mathbf{a}_n = r_{1n} \mathbf{q}_1 + r_{2n} \mathbf{q}_2 + \dots + r_{nn} \mathbf{q}_n \quad (5.3)$$

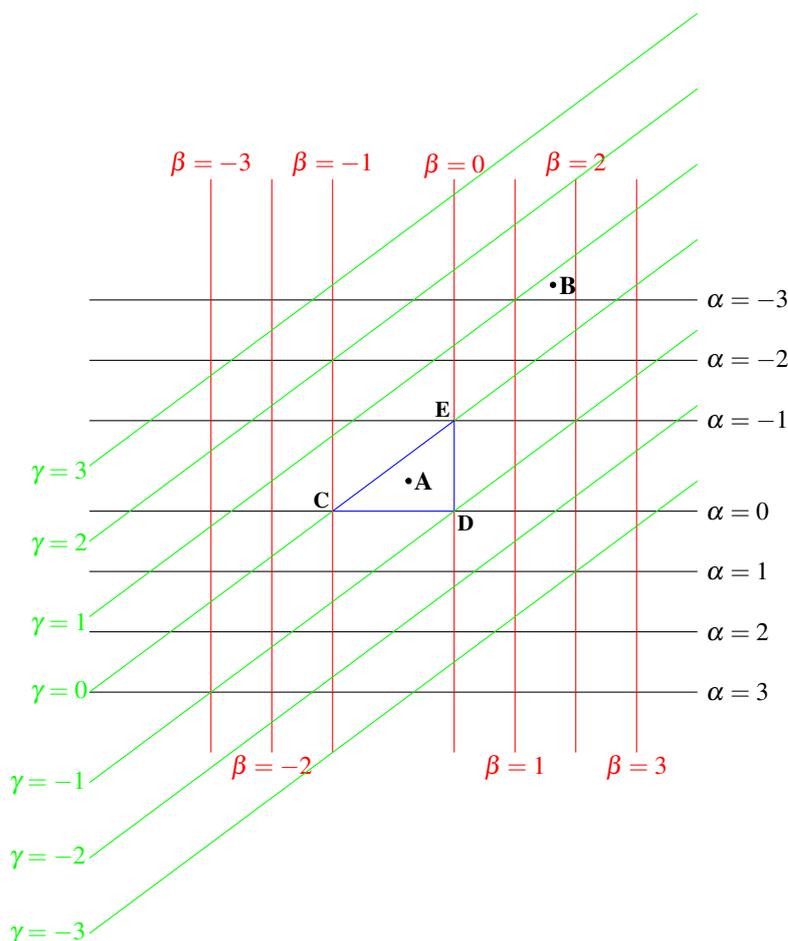


Figura 5.1: Coordenadas baricêntricas. Se uma determinada amostra pode ser descrita como uma combinação linear de seus compostos, $R_{s,i} = \sum_{j=1}^n \alpha_j R_{j,i} + e_i$, equação (2.51), onde α_j é uma fração percentual do composto na amostra, então a amostra pode ser descrita em função de coordenadas baricêntricas. Se os vértices do triângulo $\triangle CED$, da Figura 5.1, podem ser imaginados como base de um determinado composto **A** (sendo esses vértices a contagem espectral de um composto em dois canais, por exemplo), o ponto **A** pode ser escrito como uma combinação dos parâmetros α, β e γ , $0 \leq \alpha \leq 1$, $0 \leq \beta \leq 1$, $0 \leq \gamma \leq 1$ e $\alpha + \beta + \gamma = 1$, ou seja, $\mathbf{A} = \alpha\mathbf{C} + \beta\mathbf{D} + \gamma\mathbf{E}$. O ponto **B**, por exemplo, apresenta coordenadas baricêntricas que não se encaixam na restrição de que as coordenadas sejam positivas e que se encontrem no intervalo compreendido entre 0 e 1. Para o ponto **B**, existe coordenadas negativas e valores que não se encontram entre 0 e 1. Essa quebra nas restrições pode denunciar, assim, que esses compostos não sejam coplanares à biblioteca de *background*. Esse indicativo irá permitir uma rastreabilidade do mesmo.

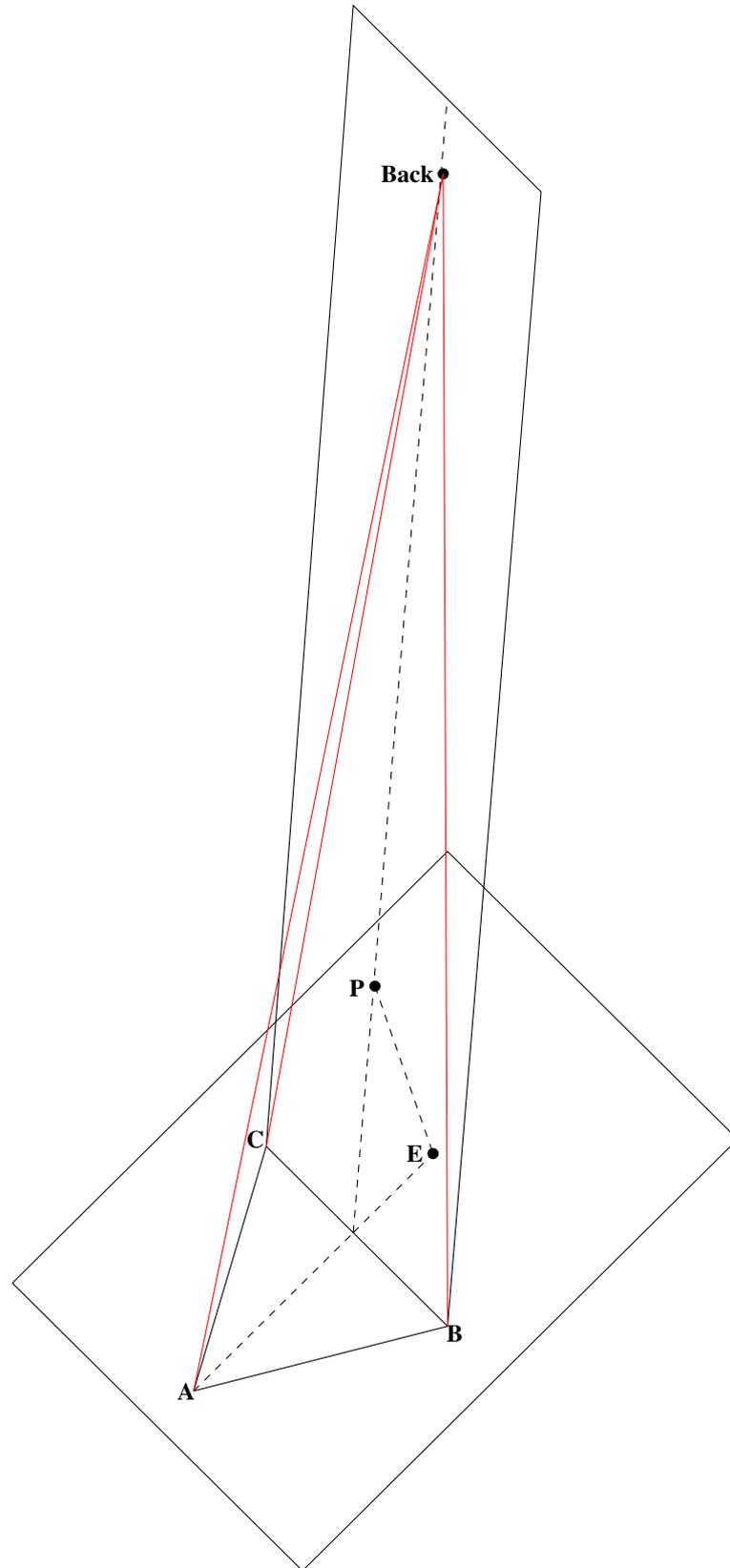


Figura 5.2: Proposta para futura rastreabilidade da biblioteca de background. Como afirmado na Figura 5.1, caso não sejam coplanares os pontos representativos da amostra, parte-se da suposição de que o background não esteja necessariamente no mesmo subespaço determinado pelos demais compostos, sugerindo-se uma participação do mesmo na geometrização do problema (Estimativa inicial: 10%). É verificada a posição do ponto **E** relativamente aos pontos que definem o plano **ABC**, e então projetado em **P** (plano contendo **Back**), para uma posterior determinação do Background

o que sugere que a decomposição seja calculada por construção de vetores ortonormais $\{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_n\}$ e das entradas r_{ij} de \mathbf{R} . Os vetores ortonormais podem ser obtidos por Gram-Schmidt. Nesse processo, o que se procura no j -ésimo passo é um vetor $\mathbf{q}_j \in \{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n\}$ ortogonal a $\{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_{j-1}\}$. Assim:

$$\begin{aligned}\mathbf{q}_j &= \frac{\mathbf{a}_j - \sum_{i=1}^{j-1} r_{ij} \mathbf{q}_i}{r_{jj}}, \\ r_{ij} &= \mathbf{q}_i^T \mathbf{a}_j, \quad i \neq j \\ |r_{jj}| &= \left\| \mathbf{a}_j - \sum_{i=1}^{j-1} r_{ij} \mathbf{q}_i \right\|_2\end{aligned}\tag{5.4}$$

Referências

- AIEX, R. M.; RESENDE, M. G.; RIBEIRO, C. C. Probability distribution of solution time in GRASP: an experimental investigation. **Journal of Heuristics**, [S.l.], v.8, n.3, p.343–373, 2002.
- ANTON, H.; RORRES, C. **Algebra Linear com Aplicações**. [S.l.]: Bookman, 2001.
- ARINC, F. et al. Application of the least-squares method to the analysis of XRF spectral intensities from atmospheric particulates collected on filters. **Advances in X-ray Analysis**, [S.l.], v.19, p.367–379, 1975.
- ASTER, R. C.; BORCHERS, B.; THURBER, C. H. **Parameter estimation and inverse problems**. [S.l.]: Academic Press, 2013.
- BATTITI, R.; TECCHIOLLI, G. Parallel biased search for combinatorial optimization: genetic algorithms and tabu. **Microprocessors and Microsystems**, [S.l.], v.16, n.7, p.351–367, 1992.
- BORSARU, M.; JECNY, Z. Application of PGNAA for bulk coal samples in a 4π geometry. **Applied Radiation and Isotopes**, [S.l.], v.54, n.3, p.519–526, 2001.
- CARTER, L. L.; CASHWELL, E. D. **Particle-transport simulation with the Monte Carlo method**. [S.l.]: Los Alamos Scientific Lab., N. Mex.(USA), 1975.
- CLINE, A. K. et al. An estimate for the condition number of a matrix. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, [S.l.], v.16, n.2, p.368–375, 1979.
- DODD, N. Slow annealing versus multiple fast annealing runs—an empirical investigation. **Parallel Computing**, [S.l.], v.16, n.2, p.269–272, 1990.
- E.SAYYED. **Nuclear methods**. 2000. Tese (Doutorado em Ciência da Computação) — .
- FEO, T. A.; RESENDE, M. G. A probabilistic heuristic for a computationally difficult set covering problem. **Operations research letters**, [S.l.], v.8, n.2, p.67–71, 1989.
- FEO, T. A.; RESENDE, M. G. Greedy randomized adaptive search procedures. **Journal of global optimization**, [S.l.], v.6, n.2, p.109–133, 1995.
- FERMI, E. et al. Artificial radioactivity produced by neutron bombardment. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character**, [S.l.], p.483–500, 1934.
- GARDNER, R. A Report on the Contract: software design for a pgnaa coal analyzer prototype. **North Carolina State University**, [S.l.], 2000.
- GARDNER, R. et al. On using Monte Carlo generated libraries for applying the library least-squares analysis approach to the C/O tool. In: SPWLA 47TH ANNUAL LOGGING SYMPOSIUM. **Anais...** [S.l.: s.n.], 2006.
- GILL, P.; MURRAY, W.; WRIGHT, M. **Numerical linear algebra and optimization**. [S.l.]: Addison-Wesley Pub. Co., Advanced Book Program, 1991. n.v. 1. (Numerical Linear Algebra and Optimization).

- GLOVER, F. Tabu search-part I. **ORSA Journal on computing**, [S.l.], v.1, n.3, p.190–206, 1989.
- GLOVER, F. Tabu search and adaptive memory programming—advances, applications and challenges. In: **Interfaces in computer science and operations research**. [S.l.]: Springer, 1997. p.1–75.
- GLOVER, F.; LAGUNA, M.; MARTÍ, R. Fundamentals of scatter search and path relinking. **Control and cybernetics**, [S.l.], v.29, p.653–684, 2000.
- GOLBERG, D. E. Genetic algorithms in search, optimization, and machine learning. **Addison wesley**, [S.l.], v.1989, 1989.
- GOLUB, G.; VAN LOAN, C. **Matrix Computations**. [S.l.]: Johns Hopkins University Press, 2012. (Johns Hopkins Studies in the Mathematical Sciences).
- HAKIMABAD, H. M.; PANJEH, H.; VEJDANI-NOGHREIYAN, A. Response Function of a 3 x 3 in. NaI Scintillation Detector in the range of 0. 081 to 4. 438 MeV. **Asian Journal of Experimental Sciences**, [S.l.], v.21, n.2, p.233–237, 2007.
- HAN, X.; GARDNER, R. P.; METWALLY, W. CEARCPG: a monte carlo simulation code for normal and coincidence prompt-gamma-ray neutron activation analysis. **Nuclear science and engineering**, [S.l.], v.155, n.1, p.143–153, 2007.
- HANSEN, P.; MLADENOVIĆ, N. **An introduction to variable neighborhood search**. [S.l.]: Springer, 1999.
- HARTLEY, R. I.; ZISSERMAN, A. **Multiple View Geometry in Computer Vision**. 2.ed. [S.l.]: Cambridge University Press, ISBN: 0521540518, 2004.
- HEVESY, G.; LEVI, H. Action of slow neutrons on rare earth elements. **Nature**, [S.l.], v.137, p.185, 1936.
- HOLSTAD, M. B. . **Implementation of Dual Mode Gamma -ray Densitometer for Gas Fraction Measurement in Multiphase Pipe Flows**. 2000. Dissertação (Mestrado em Ciência da Computação) — University of Bergen, Norway.
- HOOS, H. H.; STÜTZLE, T. Towards a characterisation of the behaviour of stochastic local search algorithms for SAT. **Artificial Intelligence**, [S.l.], v.112, n.1, p.213–232, 1999.
- JOHANSEN, G. A.; JACKSON, P. **Radioisotope gauges for industrial process measurements**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2004.
- JOHANSEN, G.; JACKSON, P. Salinity independent measurement of gas volume fraction in oil/gas/water pipe flows. **Applied Radiation and Isotopes**, [S.l.], v.53, n.4, p.595–601, 2000.
- KIRKPATRICK, S. Optimization by simulated annealing: quantitative studies. **Journal of statistical physics**, [S.l.], v.34, n.5-6, p.975–986, 1984.
- KOLMAN, B. **Introdução a algebra linear com aplicações**. [S.l.]: LTC, 2006.
- LE BIHAN, D. et al. Diffusion tensor imaging: concepts and applications. **Journal of Magnetic Resonance Imaging**, [S.l.], v.13, n.4, p.534–546, 2001.

LIM, C. Recent developments in neutron-induced gamma activation for on-line multielemental analysis in industry. **Journal of radioanalytical and nuclear chemistry**, [S.l.], v.262, n.2, p.525–532, 2004.

LIM, C.; ABERNETHY, D. On-line coal analysis using fast neutron-induced gamma-rays. **Applied radiation and isotopes**, [S.l.], v.63, n.5, p.697–704, 2005.

MACIEL, S. T. R. **Fatoração QR como ferramenta para a determinação de poços principais em redes de monitoramento de aquíferos freáticos**. 2011. Dissertação (Mestrado em Ciência da Computação) — .

MATEUS, G. R.; RESENDE, M. G.; SILVA, R. M. GRASP with Path-relinking for the Generalized Quadratic Assignment Problem. **Journal of Heuristics**, Hingham, MA, USA, v.17, n.5, p.527–565, Oct. 2011.

MERIC, I. **Nuclear methods for subsea fluid characterization**. 2012. Tese (Doutorado em Ciência da Computação) — .

MOLNAR, G. **Handbook of prompt gamma activation analysis: with neutron beams**. [S.l.]: Springer, 2004. v.1.

PARK, H.; CHUNG, C. Design and application of a single-beam gamma densitometer for void fraction measurement in a small diameter stainless steel pipe in a critical flow condition. **Nuclear Engineering and Technology**, [S.l.], v.39, n.4, p.349, 2007.

PROCTOR, R. et al. Detectors for on-line prompt gamma neutron activation analysis. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment**, [S.l.], v.422, n.1, p.933–937, 1999.

RINARD, P. Neutron interactions with matter. **Passive Nondestructive Assay of Nuclear Materials**, [S.l.], p.357–377, 1991.

SELMAN, B.; KAUTZ, H. A.; COHEN, B. Noise strategies for improving local search. In: AAAI. **Anais...** [S.l.: s.n.], 1994. v.94, p.337–343.

SHYU, C.-M.; GARDNER, R.; VERGHESE, K. Development of the Monte Carlo-library least-squares method of analysis for neutron capture prompt gamma-ray analyzers. **The International journal of radiation applications and instrumentation. Part E. Nuclear geophysics**, [S.l.], v.7, n.2, p.241–267, 1993.

SKARE, S. et al. Condition Number as a Measure of Noise Performance of Diffusion Tensor Data Acquisition Schemes with {MRI}. **Journal of Magnetic Resonance**, [S.l.], v.147, n.2, p.340 – 352, 2000.

SOLLRADL, S. **Developments in prompt gamma-ray neutron activation analysis and cold neutron tomography and their application in non-destructive testing**. 2014. Tese (Doutorado em Ciência da Computação) — .

STEWART, G. **Matrix Algorithms: volume 1, basic decompositions**. [S.l.]: Cambridge University Press, 1998. v.1.

TEN EIKELDER, H. et al. A probabilistic analysis of local search. In: **Meta-Heuristics**. [S.l.]: Springer, 1996. p.605–618.

- TJUGUM, S.-A.; FRIELING, J.; JOHANSEN, G. A. A compact low energy multibeam gamma-ray densitometer for pipe-flow measurements. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms**, [S.l.], v.197, n.3, p.301–309, 2002.
- TJUGUM, S.; JOHANSEN, G.; HOLSTAD, M. The use of gamma radiation in fluid flow measurements. **Radiation Physics and Chemistry**, [S.l.], v.61, n.3, p.797–798, 2001.
- VEIL, J. A. et al. A white paper describing produced water from production of crude oil, natural gas, and coal bed methane. **prepared by Argonne National Laboratory for the US Department of Energy, National Energy Technology Laboratory, January. Available at http://www.ead.anl.gov/pub/dsp_detail.cfm**, [S.l.], 2004.
- VERGHESE, K. et al. The Monte Carlo-library least squares analysis principle for borehole nuclear well logging elemental analyzers. **Geo**, [S.l.], 1988.
- WANG, J.; LI, F.; GARDNER, R. P. On the use of prompt gamma-ray neutron activation analysis for determining phase amounts in multiphase flow. **Measurement Science and Technology**, [S.l.], v.19, n.9, p.094005, 2008.
- WONG, S. S. **Computational methods in physics and engineering**. [S.l.]: Prentice-Hall, Inc., 1992.
- ZHANG, W.; GARDNER, R. P. The analog linear interpolation approach for Monte Carlo simulation of PGNA: the cearpa code. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms**, [S.l.], v.213, p.116–123, 2004.

Anexo

A

Norma Matricial

A análise de algoritmos matriciais frequentemente necessitam o uso de normas matriciais. Um exemplo, a qualidade de uma solução de sistema linear pode ser pobre se a matriz de coeficientes é quase singular. A noção de quase singularidade é feita por meio de uma distância no espaço matricial. Norma de matrizes fornece essa medida.

Definição A.1. $f : \mathbb{R}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{R}$ é uma norma matricial se as seguintes propriedades são asseguradas:

1. $f(\mathbf{A}) \geq 0$, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ($f(\mathbf{A}) = 0$ se e somente se $\mathbf{A} = 0$)
2. $f(\mathbf{A} + \mathbf{B}) \leq f(\mathbf{A}) + f(\mathbf{B})$, $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times n}$
3. $f(\alpha \mathbf{A}) = |\alpha| f(\mathbf{A})$, $\alpha \in \mathbb{R}$, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$

Assim como em norma vetorial, usa-se a notação de dupla barra, com os devidos subscritos, para as normas matriciais.

As normas mais utilizadas em álgebra linear é a de Frobenius:

$$\|\mathbf{A}\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2} \quad (\text{A.1})$$

e a p -norma

$$\|\mathbf{A}\|_p = \max_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|_p}{\|\mathbf{x}\|_p} \quad (\text{A.2})$$

As matrizes p -norma são definidas em termos dos vetores p -norma. Percebe-se $\|\mathbf{A}\|_p$ é a p -norma do maior vetor obtido pela aplicação de \mathbf{A} a uma p -norma unitária vetorial:

$$\|\mathbf{A}\|_p = \max_{\mathbf{x} \neq 0} \left\| \mathbf{A} \left(\frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|_p} \right) \right\| = \max_{\|\mathbf{x}\|_p = 1} \|\mathbf{A}\mathbf{x}\|_p \quad (\text{A.3})$$

A equação (A.1) e a equação (A.2) definem uma família de normas, a depender das dimensões das matrizes a se considerar. A norma-2 de uma matriz de $\mathbb{R}^{3 \times 2}$ é diferente da norma-2 de uma matriz $\mathbb{R}^{5 \times 6}$. É possível, então, verificar:

$$\| \mathbf{AB} \|_p \leq \| \mathbf{A} \|_p \| \mathbf{B} \|_p, \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times q} \quad (\text{A.4})$$

Uma importante observação sobre três diferentes normas se faz necessário. Afirma-se que as normas f_1 , f_2 , and f_3 em $\mathbb{R}^{m \times q}$, $\mathbb{R}^{m \times n}$, and $\mathbb{R}^{n \times q}$ são coerentes entre si se para todo $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ e $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times q}$ tem-se

$$f_1(\mathbf{AB}) \leq f_2(\mathbf{A})f_3(\mathbf{B}). \quad (\text{A.5})$$

Uma propriedade útil de normas: (equação (A.6)):

$$\| \mathbf{AB} \| \leq \| \mathbf{A} \| \| \mathbf{B} \| . \quad (\text{A.6})$$

As normas tem a importante propriedade que para cada $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ e $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, tem-se que $\| \mathbf{Ax} \|_p = \| \mathbf{A} \|_p \| \mathbf{x} \|_p$. De maneira geral, para qualquer norma vetorial $\| \cdot \|_\alpha$ em \mathbb{R}^n e $\| \cdot \|_\beta$ em \mathbb{R}^m , tem-se que $\| \mathbf{Ax} \|_\beta \leq \| \mathbf{A} \|_{\alpha, \beta} \| \mathbf{x} \|_\alpha$, onde $\| \mathbf{A} \|_{\alpha, \beta}$ é uma norma matricial definida por:

$$\| \mathbf{A} \|_{\alpha, \beta} = \max_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\| \mathbf{Ax} \|_\beta}{\| \mathbf{x} \|_\alpha} \quad (\text{A.7})$$