

## 6

### O problema inverso

Uma definição simplificada do problema direto e inverso foi feita na introdução. Uma definição mais completa pode ser obtida em Kirsch (1996). Segundo esse autor dois problemas (ou funções) são considerados inversos entre si se a formulação de um deles requerer o conhecimento total (ou parcial) do outro. No problema direto a informação sempre deve ser completa e precisa. No problema inverso a informação pode ser incompleta e imprecisa. Seguindo esta definição, é possível determinar qual problema deverá ser considerado direto ou inverso.

Na maioria dos casos, um problema inverso é considerado mal – posto. Para um problema ser considerado bem-posto, três requisitos essenciais deverão ser satisfeitos:

- i. Existência - o problema deverá apresentar solução;
- ii. Unicidade - a solução deverá ser única;
- iii. Estabilidade - a solução deverá exibir dependência contínua em relação aos dados que a originou.

Pode-se matematicamente, obter a existência e a unicidade de uma solução delimitando-se o espaço onde ela, provavelmente, se encontra. Se um problema exhibe múltiplas soluções, as informações que definem o operador são insuficientes para descrevê-lo corretamente. Neste caso, critérios adicionais baseados em informações de compromisso com a modelagem devem ser adotados.

O atributo da estabilidade é tido como o mais importante, já que é praticamente impossível convergir para o espaço de soluções sem considerar os efeitos degenerativos do ruído aditivo sobre os dados, o operador, ou até mesmo as limitações impostas pelo caráter iterativo do processamento numérico.

Caso a solução não dependa continuamente dos dados, os valores computados encontram-se, freqüentemente, distantes da solução esperada. Desta forma, não haveria como superar esta dificuldade a menos que se pudesse fornecer

informações adicionais confiáveis acerca da solução. Portanto, *”a falta de informação não pode ser remediada por artifícios matemáticos”* (Kirsch, 1996).

Dependendo do número de equações e de incógnitas que formam o sistema de equações a resolver, procura-se o método apropriado que ajude a resolver-lo. O método de máxima entropia é utilizado quando o número de incógnitas é maior que o número de equações e o método de mínimos quadrados é utilizado quando o número de incógnitas é igual o menor que o número de equações disponíveis.

### 6.1.

#### Formulação matemática do problema inverso

Nesta seção serão apresentados 2 casos a resolver:

**Caso 1** – É formulado com os contaminantes: antraceno, fenantreno, pireno fluoranteno e criseno enumerados por  $n=1, \dots, 5$ , respectivamente. Considera-se um vetor de incógnitas  $\vec{Z}$  formado por 16 componentes, segundo a Tabela 6.1, nas quais as 10 primeiras incógnitas estão relacionadas ao contaminante e as seis restantes estão relacionadas ao ambiente. Considera-se como conhecidas as concentrações dos HPAs no mexilhão e no sedimento, e outros parâmetros que formam parte da solução do problema direto dado pelas eqs. (5.5) e (5.6). Considera-se a fração de carbono orgânica no sólidos do sedimento ressuspensão ( $O_{RGR}$ ) igual que a fração de carbono orgânico no sedimento ( $O_{RGS}$ ), devido que a diferença entre elas é pequena. Deste modo, reescreve-se as eqs. (5.5) e (5.6):

$$C_{SS(n)} = \frac{\{[1]+[2]+[3]+[4]+Z_n + (1 + \frac{C_{VPX}}{D_{ENP}})(C_{WI(n)}G_I \frac{1+K_{OC}C_{VPX}Z_{14}}{1+K_{OC}C_{VPX}Z_{13}})\}}{\{(\frac{G_{RN}A_W}{D_{ENS}} + \frac{A_S Z_{5+n}}{K_{OC}D_{ENS}Z_{12}} + 0.693 \cdot Z_{11}A_S \frac{V_{FS} + \frac{(1-V_{FS})}{K_{OC}D_{ENS}Z_{12}}}{T_{DS}(n)} + \frac{G_{BN}A_W}{D_{ENS}})\} \cdot \frac{\{G_{DN}A_W K_{OC}Z_{14} + Z_{5+n} \cdot A_S\}}{(K_V A_W + 0.693(1-V_{FP} + V_{FP}K_{OC}Z_{14} \frac{D_{ENP}V_W}{T_{DW}(n)}) + (G_{DN}A_W + G_J C_{VPW})K_{OC}Z_{14} + 1} \cdot \frac{1}{+G_J + Z_{12}A_S)\} - \{(\frac{G_{RN}A_W}{D_{ENS}} + \frac{A_S Z_{5+n}}{K_{OC}D_{ENS}Z_{12}})(G_{DN}A_W K_{OC}Z_{14} + Z_{5+n}A_S\}} \quad (6.1)$$

$$C_{W(n)} = C_{SS(n)} \left( \frac{\frac{Z_{12} \cdot G_{RN} A_W}{Z_{14} \cdot D_{ENS}} + Z_{(5+n)} \frac{A_S}{K_{SW}} + 0.693 \cdot Z_{11} A_S \frac{V_{FS} + \frac{(1-V_{FS})}{K_{OC(n)} D_{ENS} Z_{12}}}{T_{DS}(n)} + \frac{G_{BN} A_W}{D_{ENS}}}{G_{DN} A_W K_{OC} Z_{14} + Z_{(5+n)} A_S} \right) \quad (6.2)$$

da equação (5.22) temos

$$C_{me(n)} = K_{WT} C_{SS(n)} \left( \frac{\frac{Z_{15} \cdot G_{RN} A_W}{Z_{14} \cdot D_{ENS}} + Z_{(5+n)} \frac{A_S}{K_{SW}} + 0.693 \cdot Z_{11} A_S \frac{V_{FS} + \frac{(1-V_{FS})}{K_{OC(n)} D_{ENS} Z_{12}}}{T_{DS}(n)} + \frac{G_{BN} A_W}{D_{ENS}}}{G_{DN} A_W K_{OC(n)} Z_{14} + Z_{(5+n)} A_S} \right) \cdot [ALOG (Z_{15} LOG Kow + Z_{16})] \quad (6.3)$$

onde o sub-índice  $n$  está relacionado com um dos contaminante acima mencionados.

Note que para cada contaminante existe uma expressão semelhante às eqs. (6.1) e (6.3), com 16 incógnitas que formam o vetor  $\bar{Z}$ . Temos por tanto um sistema de 10 equações e 16 incógnitas, formado pelas eqs. (6.1) e (6.3) que são não lineares. Este sistema proposto será resolvido com o método de máxima entropia generalizada, descrito na seção 6.2.

**Caso 2** – Resolvido o caso 1 e conhecidos os valores das incógnitas  $Z_{11} - Z_{16}$  relacionadas ao meio ambiente, considere como contaminantes o naftaleno, o fluoreno, o benzo(b)fluoranteno, o benzo(k)fluoranteno e o benzo(a)pireno enumerados com  $n=1, 2, 3, 4$  e  $5$ , respectivamente. Para este caso; para cada contaminante sua concentração no sedimento, a emissão na baía e o coeficiente de transferência de massa sedimento-água são as incógnitas a serem estimadas. A Tabela 6.2 enumera as incógnitas do caso 2.

As equações a serem resolvidas têm a seguinte forma:

$$C_{me(n)} = K_{WT} Z_{2n} \left( \frac{\frac{O_{RGR} \cdot G_{RN} A_W}{O_{RGP} \cdot D_{ENS}} + Z_{3n} \frac{A_S}{K_{SW}} + 0.693 \cdot H_S A_S \frac{V_{FS} + \frac{(1-V_{FS})}{K_{OC(n)} D_{ENS} O_{RGS}}}{T_{DS}(n)} + \frac{G_{BN} A_W}{D_{ENS}}}{G_{DN} A_W K_{OC(n)} O_{RGP} + Z_{3n} A_S} \right) [ALOG (E \cdot LOG Kow + G)] \quad (6.4)$$

$$Z_{2n} = \frac{\{[1]+[2]+[3]+[4]+Z_n+[7]+[8]\} \cdot \{[12]+[15]\} \cdot \left( V_{FS} + \frac{(1-V_{FS})}{K_{OC(n)} D_{ENS} O_{RGS}} \right)}{\left\{ ([5] + \frac{A_S Z_{3-n}}{K_{OC(n)} D_{ENS} O_{RGR}} + 0.693 \cdot Z_{3-n} A_S) \frac{V_{FS}}{T_{DS}(n)} + [17] \right\} \cdot 1 \cdot \left( ([10]+[11]+[12]+[13]+[14]+Z_{3-n}) - \left( ([5] + \frac{A_S Z_{3-n}}{K_{OC(n)} D_{ENS} O_{RGS}}) \cdot ([12]+Z_{3-n} A_S) \right) \right)}$$

(6.5)

Tabela 6.1 - Incógnitas a serem estimadas no caso 1.

$\bar{z}$	INCÓGNITAS	
$Z_1$	Taxa de descarga direta do antraceno	kg/ano
$Z_2$	Taxa de descarga direta do fenantreno	kg/ano
$Z_3$	Taxa de descarga direta do pireno	kg/ano
$Z_4$	Taxa de descarga direta do fluoranteno	kg/ano
$Z_5$	Taxa de descarga direta do criseno	kg/ano
$Z_6$	Coefficiente de transferência de massa sed.-água do antraceno	m/h
$Z_7$	Coefficiente de transferência de massa sed.-água do fenantreno	m/h
$Z_8$	Coefficiente de transferência de massa sed.-água do pireno	m/h
$Z_9$	Coefficiente de transferência de massa sed.-água do fluoranteno	m/h
$Z_{10}$	Coefficiente de transferência de massa sed.-água do criseno	m/h
$Z_{11}$	Altura do sedimento ativo	m
$Z_{12}$	Fração de carbono orgânico em sedimento sólido	-
$Z_{13}$	Fração de carbono orgânico nas partículas que entram com a água	-
$Z_{14}$	Fração de carbono orgânico em particuladas na coluna da água	-
$Z_{15}$	Coefficiente E na relação LOG Kow vs LOG BAF	-
$Z_{16}$	Coefficiente G na relação LOG Kow vs LOG BAF	-

Tabela 6.2 - Incógnitas a serem estimadas no caso 2.

$\bar{z}$	INCÓGNITAS	
$Z_{1n}$	Emissão ou Taxa de descarga direta	kg/ano
$Z_{2n}$	Concentração no sólido do sedimento	ng/g
$Z_{3n}$	Coefficiente de transferência de massa sedimento – água	m/h

onde Z são as incógnitas e n é o índice de contaminantes

Desse modo, no sistema proposto para o caso 2, cada contaminante tem 2 equações e 3 incógnitas. Observa-se que o sub-sistema correspondente a cada contaminante é independente dos demais. Os intervalos da solução para a emissão e a concentração no sedimento para cada contaminante serão determinadas, considerando que o valor do coeficiente de transferência de massa sedimento-água ( $K_T$ ) encontra-se dentro do intervalo [0.000001-0.1]. A razão da escolha deste intervalo está baseada no fato que a concentração do contaminante no sedimento e na água é insensível a uma variação do valor de  $K_T$  fora deste intervalo. O caso 2 será resolvido pelo método de mínimos quadrados.

## 6.2.

### O método de Máxima Entropia Generalizada

A palavra *entropia* como conceito científico foi usada pela primeira vez em termodinâmica por Clausius, em 1850. Sua interpretação probabilística no contexto da mecânica estatística para definir o grau de desordem de um sistema é atribuída a Boltzmann, em 1877. Entretanto, a relação explícita entre entropia e probabilidade só foi descoberta por Planck, em 1906.

Shannon (1948) idealizou uma medida que foi chamada de “quantidade de incerteza” (quantificar a “*missing information*”).

Jaynes (1957) enunciou o princípio da máxima entropia como um critério de inferência, condição suficiente para garantir a existência, a unicidade e a estabilidade de uma solução no escopo de um problema mal-condicionado.

Por muito tempo, discutiu-se ou conjecturou-se que a noção de entropia definia um tipo de medida no espaço das distribuições de probabilidade, de forma que eventos com alta entropia são em algum sentido mais favoráveis que outros. Jaynes (1982) observou que tal visão esta baseada em uma série de fatores, como por exemplo, que as distribuições de mais alta entropia representam maior desordem, elas também são mais suaves e de acordo com a interpretação de Shannon da entropia como uma medida de informação, as distribuições de mais alta entropia as mais desconhecidas.

O critério de máxima entropia confere à solução um caráter de máxima incerteza em relação à igual distribuição de probabilidades dos elementos que compõem o sistema estudado, desde que nenhuma informação suplementar confiável seja fornecida. Deve-se, portanto, “atribuir máxima incerteza a tudo aquilo que não se conhece acerca dos dados” (Kapur & Kesavan, 1992).

No Apêndice 3 são apresentados alguns critérios necessários para compreender o desenvolvimento do método de máxima entropia generalizada.

Considere-se o vetor  $\vec{Z}$  formado por todas as incógnitas do sistema.

$$\vec{Z} = \{z_1, z_2, \dots, z_p\} \quad (6.7)$$

onde  $p$  é o número total de incógnitas.

Seja  $q_{med}^k$  um dado medido como a concentração do contaminante na Baía de Guanabara, com  $k = 1, \dots, K$ ; onde  $K$  é o número total de dados experimentais.

A modelagem estabelece que  $q_{med}^k$  pode ser aproximado por uma função das incógnitas do sistema de eqs. (6.1), (6.2) e (6.3), aqui representado por  $q_{cal}^k(\vec{Z})$ . Deste modo,

$$q_{med}^k \cong q_{cal}^k(\vec{Z}), \quad k = 1, \dots, K \quad (6.8)$$

pode ser usada para definir a função erro  $F_k(\vec{Z})$  como a diferença entre a medida experimental  $q_{med}^k$  e o valor extraído segundo o modelo,  $q_{cal}^k(\vec{Z})$ .

$$F_k(\vec{Z}) = q_{med}^k - q_{cal}^k(\vec{Z}) \quad (6.9)$$

Quando esta função é igual a zero, tem-se um sistema de equações formado por  $p$  incógnitas e  $K$  equações.

$$F_k(\vec{Z}) = 0 \quad \text{com } k = 1, \dots, K \quad (6.10)$$

Se  $p < K$ , o sistema está geralmente sobre determinado, a unicidade da solução pode ser encontrada quando se trabalha com dados exatos e consistentes com o modelo, e uma solução aproximada no caso que se considera o ruído nas medições.

No caso  $p > K$ , tem-se um sistema indeterminado que pode ter um conjunto infinito de soluções. Nesta situação, quando os dados são consistentes com o modelo, pode-se dizer que não há dados suficientes para resolver o problema de forma única sendo necessário outro tipo de análise. Não se encontrando a unicidade da solução para a formulação inicial do problema, procura-se dentro do conjunto de soluções o melhor resultado, segundo um critério de otimização (Kapur & Kesavan, 1992; Censor & Lent, 1981; Reis & Roberty, 1992; Carita Montero et al., 2001; Cidade et al. 1998).

O método de máxima entropia generalizada é um método de otimização que encontra a “melhor” solução entre todas as soluções possíveis, isto é, usando o critério de máxima entropia, a distância de Bregman generalizada, a lagrangeana e os multiplicadores de Lagrange.

A lagrangeana para a função  $F_k(\vec{Z})$  pode expressar-se como:

$$L_{Bq}(\vec{Z}, \vec{Z}_o, \lambda_k) = D_{B,q}(\vec{Z}, \vec{Z}_o) + \sum_{k=1}^K \lambda_k \cdot F_k(\vec{Z}) \quad (6.11)$$

onde:

$\lambda_k$  é o multiplicador de Lagrange para a equação k,

$\vec{Z}_o$  é uma informação inicial sobre o valor de  $\vec{Z}$ ,

$D_{B,q}(\vec{Z}, \vec{Z}_o)$  é a distância de Bregman entre  $Z$  e  $Z_o$  (Bregman, 1967).

$D_{B,q}$  é definido como:

$$D_{B,q}(\vec{Z}, \vec{Z}_o) = D_{B,q}(\eta_{B,q}(\vec{Z}), \eta_{B,q}(\vec{Z}_o)) \quad (6.12)$$

que é igual a:

$$D_{B,q} = \eta_{B,q}(\vec{Z}) - \eta_{B,q}(\vec{Z}_o) - \langle \nabla \eta_{B,q}(\vec{Z}_o), \vec{Z} - \vec{Z}_o \rangle \quad (6.13)$$

onde:

$\eta_{B,q}$  é a funcional momento de ordem B enésimo da q-discrepância (Apêndice 3), e é definida como:

$$\eta_{B,q}(\vec{Z}) = \sum_{i=1}^p z_i^B \frac{z_i^q - 1}{q} \quad (6.14)$$

quando  $q \rightarrow 0$  tem-se a seguinte aproximação:

$$\eta_{B,0}(\vec{Z}) = \sum_{i=1}^p z_i^B \ln z_i \quad (6.15)$$

Esta expressão é derivada dos trabalhos sobre divergência direta (Sharma & Mittall, 1975; Sharma & Taneja, 1977; Taneja, 1977). A Este funcional representa o desvio de um valor esperado de  $z$ , elevado à potencia  $q$ , do valor constante  $z_o=1$ .

O valor do último termo da eq. (6.13) calcula-se as

$$\langle \nabla \eta_{B,q}(\vec{Z}_o), \vec{Z} - \vec{Z}_o \rangle = \sum_{i=1}^p \frac{\partial \eta_{B,q}}{\partial z_{oi}} (z_i - z_{oi}) (z_i - z_{oi}) \quad (6.16)$$

$$\sum_{i=1}^p \frac{\partial \eta_{B,q}}{\partial z_{oi}} = \sum_{i=1}^p (B \cdot z_{oi}^{B-1} (\frac{z_{oi}^q - 1}{q}) + z_{oi}^{B+q-1}) \quad (6.17)$$

logo:

$$\langle \nabla \eta_{B,q}(\vec{Z}_o), \vec{Z} - \vec{Z}_o \rangle = \sum_{i=1}^p (B \cdot z_{oi}^{B-1} (\frac{z_{oi}^q - 1}{q}) + z_{oi}^{B+q-1}) (z_i - z_{oi}) \quad (6.18)$$

Das equações (6.13), (6.14) e (6.15) resulta:

Se  $q \rightarrow 0$

$$D_{B,q}(\vec{Z}, \vec{Z}_o) = \sum_{i=1}^p z_i^B \ln z_i - z_{oi}^B \ln(z_{oi}) - (B \cdot z_{oi}^{B-1} \ln(z_{oi}) + z_{oi}^{B-1}) (z_i - z_{oi}) \quad (6.19)$$

caso contrário, isto é  $q \neq 0$  :

$$D_{B,q}(\vec{Z}, \vec{Z}_o) = \sum_{i=1}^p z_i^B \frac{z_i^q - 1}{q} - z_{oi}^B \frac{z_{oi}^q - 1}{q} - (B \cdot z_{oi}^{B-1} (\frac{z_{oi}^q - 1}{q}) + z_{oi}^{B+q-1}) (z_i - z_{oi}) \quad (6.20)$$

tem-se um caso particular para  $B=1$  e  $q \rightarrow 0$  (Apêndice 3). Tem-se o caso de entropia

$$D_{1,0}(\vec{Z}) = \sum_{i=1}^p z_i \ln z_i - z_i \ln(z_{oi}) - (z_i - z_{oi}) \quad (6.21)$$

Das equações (6.10), (6.18) e (6.19), resulta:

Se  $q \rightarrow 0$  :

$$L_q(\vec{Z}, \vec{Z}_o, \lambda_k) = \sum_{i=1}^p z_i^B \ln z_i - z_{oi}^B \ln(z_{oi}) - (B \cdot z_{oi}^{B-1} \ln(z_{oi}) + z_{oi}^{B-1}) (z_i - z_{oi}) + \sum_{k=1}^K \lambda_k F_k(\vec{Z}) \quad (6.22)$$

caso contrário, isto é,  $q \neq 0$  :

$$L_{Bq}(\vec{Z}, \vec{Z}_o, \lambda_k) = \sum_{i=1}^p z_i^B \frac{z_i^q - 1}{q} - z_{oi}^B \frac{z_{oi}^q - 1}{q} - (B \cdot z_{oi}^{B-1} (\frac{z_{oi}^q - 1}{q}) + z_{oi}^{B+q-1}) (z_i - z_{oi}) + \sum_{k=1}^K \lambda_k F_k(\vec{Z}) \quad (6.23)$$

para o caso particular em que  $B=1$ , tem-se:

Se  $q \rightarrow 0$  :

$$L_{Bq}(\vec{Z}, \vec{Z}_o, \lambda_k) = \sum_{i=1}^p z_i \ln z_i - z_i \ln(z_{oi}) - (z_i - z_{oi}) + \sum_{k=1}^K \lambda_k \cdot F_k(\vec{Z}) \quad (6.24)$$

caso contrário:

$$L_{Bq}(\vec{Z}, \vec{Z}_o, \lambda_k) = \sum_{i=1}^p z_i \left( \frac{z_i^q - z_{oi}^q}{q} \right) - z_{oi}^q (z_i - z_{oi}) + \sum_{k=1}^K \lambda_k \cdot F_k(\vec{Z}) \quad (6.25)$$

Em resumo, o novo sistema formado pelas eqs. (6.22) e (6.23) tem como incógnitas:

$\lambda_k$ , com  $k=1, \dots, K$ ,  $\lambda_k \in \lambda$

$z_i$ , com  $i=1, \dots, p$ ,  $z_i \in \vec{Z}$ , resultando em um total de  $(k+p)$  incógnitas

O problema inverso é formulado como um problema de otimização. Usando a lagrangeana dada pelas equações (6.22) e (6.23) e variando o valor dos parâmetros  $q$  e  $B$ , uma família de algoritmos pode ser construída.

A solução deste sistema de equações é obtida determinando-se o mínimo valor da lagrangeana que pode ser obtido encontrando seu ponto crítico. Para isto, deriva-se a lagrangeana e iguala-se a zero.

$$\frac{\partial}{\partial z_i} L_{Bq}(\vec{Z}, \vec{Z}_o, \lambda) = \frac{\partial}{\partial z_i} D_{B,q}(\vec{Z}, \vec{Z}_o) + \sum_{k=1}^K \lambda_k \cdot \frac{\partial}{\partial z_i} F_k(\vec{Z}) = 0 \quad i=1, \dots, p; \quad (6.26)$$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_k} L_{Bq}(\vec{Z}, \vec{Z}_o, \lambda) = 0 \quad \text{resultando: } F_k(\vec{Z}) = 0, \quad k=1, 2, \dots, K. \quad (6.27)$$

Logo o novo sistema é formado pelas eqs. (6.26) e (6.27) com um total de  $(p+K)$  equações. Em resumo o novo sistema é formada por  $(p+K)$  equações e  $(p+K)$  incógnitas.

Para resolver o sistema descrito pelas equações (6.26) e (6.27), foi escrito um código em MATLAB. Este “m-file” faz uso das ferramentas encontradas no “Toolbox” de otimização do MATLAB. A minimização deste sistema foi obtida com os algoritmos: Programação Quadrática Seqüencial (SQP), Quasi-Newton e o Procura Linear. Uma descrição detalhada destes algoritmos são encontradas em Luenberger, 1970 ou na guia de usuário para o Optimization Toolbox disponível no MATLAB versão 6.0 ou em sua página web: [www.mathwork.com](http://www.mathwork.com). É evidente

que a estimativa para as novas incógnitas depende da quantidade e da qualidade dos dados experimentais fornecidos ao programa.

**Observação:** O método de máxima entropia generalizada é similar a querer encontrar as incógnitas que minimizam o valor da distância de Bregman generalizada, eq. (6.20), restrita à função erro, eq. (6.9), tal procedimento é análogo ao exemplo apresentado no Apêndice 3 (solução 2), onde se utilizou o método dos multiplicadores de Lagrange para obter uma nova função denominada lagrangeana, eq. (6.11). Em seguida, determina-se o valor mínimo desta função, igualando todas as suas derivadas parciais a zero, eqs. (6.26) e (6.27), obtendo um novo sistema onde os números de incógnitas e de equações são iguais. Com a solução deste sistema é possível obter os valores das incógnitas.

Da distância de Bregman, eq. (6.20), deve-se questionar que valores seriam ótimos para B e q. Esta pergunta será respondida na seção 7.2.1.

### 6.3

#### O método de Mínimos Quadrados

Seja  $\vec{Z}$  o vetor de incógnitas é dado por  $\vec{Z} = \{z_1, z_2, \dots, z_p\}^T$ , onde  $p$  é o número total de incógnitas, e  $q_{med}^k$  com  $k=1, \dots, K$ ; é o conjunto de dados experimentais (concentrações medidas), onde  $K$  é o número total de medidas, definimos o vetor erro como o resíduo entre o valor calculado pelo modelo matemático  $q_{cal}^k(\vec{Z})$  e o dado experimental  $q_{med}^k$  que será representado por:

$$F_k(\vec{Z}) = q_{cal}^k(\vec{Z}) - q_{med}^k \quad \text{com } k=1, 2, \dots, K \quad (6.28)$$

Assim,  $\vec{F} = \{F_1, F_2, \dots, F_K\} \in \mathfrak{R}^K$  com  $\vec{Z} = \{z_1, z_2, \dots, z_p\}^T \in \mathfrak{R}^p$  que representam o vetor de incógnitas do problema e o sub-índice  $k$  indica a relação de paridade entre a solução  $q_{cal}^k(\vec{Z})$  e a medição  $q_{med}^k$ .

Define-se  $Re$  como o funcional dos resíduos quadrados

$$\text{Re} = \text{Re}(\vec{Z}) = \frac{1}{2} \|\vec{F}\|^2 = \frac{1}{2} \vec{F}^T \vec{F} \quad (6.29)$$

ou seja:

$$\text{Re}(\vec{Z}) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n [q_{cal}^k - q_{med}^k]^2 \quad (6.30)$$

Sendo o objetivo determinar o vetor  $\vec{Z}$  que minimize a norma  $\text{Re}$ , a equação do ponto crítico é escrita:

$$\nabla \text{Re} = 0 \text{ ou } \frac{\partial \text{Re}}{\partial z_i} = 0, \text{ para } i=1, \dots, p \quad (6.31)$$

Obtém-se assim, um sistema de  $p$  equações e  $p$  incógnitas. Das eqs. (6.30) e (6.31) vem:

$$\sum_{k=1}^n F^k \frac{\partial q_{cal}^k}{\partial z_i} = 0 \quad i=1, \dots, p \quad (6.32)$$

Usando uma expansão de Taylor em torno de um valor de referência  $\vec{Z}^m$  onde  $m$  será posteriormente o contador de iterações no procedimento iterativo e retendo apenas até os termos de primeira ordem, obtém-se:

$$F^{k,m+1} = F^{k,m} + \sum_{j=1}^p \frac{\partial F^{k,m}}{\partial z_j} \Delta z_j^m \quad k = 1, 2, \dots, K \quad (6.33)$$

onde  $\vec{F}^m$  denota a avaliação de  $F$  em  $\vec{Z}^m$ , e  $\Delta \vec{Z}^m = \vec{Z}^{m+1} - \vec{Z}^m$ , i.e :

$$F^{k,m} = F^k(\vec{Z}^m), \text{ com } k = 1, \dots, K.$$

Substituindo a eq. (6.33) na eq. (6.32) obtém-se então:

$$\sum_{k=1}^n (F^{k,m} + \sum_{j=1}^p \frac{\partial F^{k,m}}{\partial z_j} \Delta z_j^m) \frac{\partial q_{cal}^k}{\partial z_i} |_{\vec{Z}=\vec{Z}^m} = 0 \quad i=1, \dots, p \quad (6.32)$$

Usando a matriz Jacobiana,  $J$ , com elementos denotados por  $J_{rs} = \frac{\partial q_{cal}^r}{\partial z_s}$

para  $r = 1, \dots, K$  e  $s = 1, \dots, p$

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial q_{cal}^1}{\partial z_1} & \dots & \frac{\partial q_{cal}^1}{\partial z_p} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial q_{cal}^k}{\partial z_1} & \vdots & \frac{\partial q_{cal}^k}{\partial z_p} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial q_{cal}^K}{\partial z_1} & \dots & \frac{\partial q_{cal}^K}{\partial z_p} \end{bmatrix} \quad (6.35)$$

O sistema de equações (6.34) pode ser reescrito como:

$$(J^m)^T J^m \Delta \vec{Z}^m = -(J^m)^T \vec{F}^m \quad (6.36)$$

Multiplicando formalmente ambos os lados da eq. (6.36) por  $((J^m)^T J^m)^{-1}$  obtém-se:

$$\Delta \vec{Z}^m = -((J^m)^T J^m)^{-1} (J^m)^T \vec{F}^m \quad (6.37)$$

sendo  $m$  o contador de iterações. Começando com uma estimativa inicial  $\vec{Z}_0$ , podem ser feitas correções nas estimativas de  $\Delta \vec{Z}^m$ , considerando

$$\vec{Z}^{m+1} = \vec{Z}^m + \Delta \vec{Z}^m \quad (6.38)$$

onde  $\Delta \vec{Z}^m$  é determinada pela solução do sistema (6.34).

Caso o método convirja, ao prosseguir no procedimento iterativo o valor de  $\Delta \vec{Z}^m$  diminui as iterações podem ser interrompidas tomando como critério de convergência, por exemplo:

$$|\Delta z_j^{m+1} / Z_j^m| < \varepsilon \text{ onde } \varepsilon \text{ é um valor pequeno definido a priori.}$$

Dois comentários são necessários:

- (i) Se o número de incógnitas é grande a eq. (6.37) não é usada para a determinação de  $\Delta\vec{Z}^m$  por exigir o cálculo de uma matriz inversa. Nesse caso o sistema é resolvido pelas eqs. (6.36);
- (ii) Sendo um método de tipo Newton, ele pode não convergir caso a estimativa inicial não esteja na região de convergência e, além disso, mesmo que o método convirja, pode-se ficar preso em um mínimo local (Muniz et al., 1999).