Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Problemas Inversos em Física Experimental: A secção de choque fotonuclear e radiação de aniquilação elétron-pósitron.

Tese apresentada ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo para a obtenção do grau de Doutor em Ciências na área de Física

Membros banca examinadora:
Prof. Dr. Fernando Manuel Ramos (INPE)
Prof. Dr. Marcos Nogueira Martins (IFUSP)
Prof. Dr. Mauro da Silva Dias (IPEN)
Prof. Dr. Odair Lelis Gonçalez (ITA/CTA)
Prof. Dr. Otaviano Augusto Marcondes Helene - Orientador (IFUSP)

Carlos Takiya

Prof. Armando Corbani Ferraz
Presidente da Comissão de Pós Graduação

(São Paulo-2003)

SBI-IFUSP
305M810T3857

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
3857
SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO
ex. 1
INSTITUTO DE FÍSICA

Agradecimentos

Aos meus familiares pelo apoio constante e incentivo. Aos estudantes, funcionários e professores de Instituto de Física da USP pela convivência frutífera e gratificante. Ao prof. Otaviano Helene pela Orientação e amizade. Ao Yukio e Lídia pela lição de vida "im memoriam". Ao CNPQ pelo auxílio financeiro e Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia pela licença concedida. A Andréia pelos momentos juntos. E a todos que trabalham para o bem do Ensino e Pesquisa neste grande País.

Resumo

Os métodos para resolução de Problemas Inversos aplicados a dados experimentais (Regularização, Bayesianos e Máxima Entropia) foram revistos. O procedimento de Mínimos Quadrados com Regularização por Mínima Variância (MQ-RMV) foi desenvolvido para resolução de Problemas Inversos lineares, tendo sido aplicado em: a) espectros unidimensionais simulados; b) determinação da secção de choque ^{34}S (γ, xn) a partir de *yield* de *bremsstrahlung* c) análise da radiação de aniquilação elétron-pósitron em alumínio de experimento de coincidência com dois detetores semicondutores. Os resultados são comparados aos obtidos por outros métodos.

Abstract

The methods used to solve inverse problems applied to experimental data (Regularization, Bayesian, and Maximum Entropy) were revised. The Least-Squares procedure with Minimum Variance Regularization (LS-MVR) was developed to solve linear inverse problems, being applied to: a) simulated one-dimensional histograms; b) ^{34}S (γ, xn) cross-section determination from bremsstrahlung yield data, and c) electron-positron annihilation radiation in Aluminum from coincidence experiments with two semiconductor detectors. The results were compared to that obtained by other methods.

Conteúdo

1 Introdução **8**

2 Problema Inverso **12**

2.1 Introdução 12

2.2 Definição qualitativa geral 12

2.2.1 Descrição esquemática 13

2.3 Caso contínuo 14

2.4 Convolução e Deconvolução 15

2.4.1 Propriedades 16

2.4.2 Deconvolução de um espectro gaussiano 17

2.5 Caso discreto 18

2.6 Regularização 20

2.6.1 O método de Tikhonov 20

2.6.2 O método de Phillips 21

2.6.3 Discussão 22

2.7 Interpretação Estatística, Informação *a priori* e o Teorema de Bayes 23

2.7.1 O Teorema de Bayes e o Problema Inverso 23

2.8 O Método da Máxima Entropia 28

2.9 O problema do Problema Inverso 31

2.9.1 Dificuldades 32

3 O método proposto: MQ-RMV **35**

3.1 O método dos Mínimos Quadrados-MQ 35

3.1.1 Dados correlacionados 37

3.1.2 Matrizes mal condicionadas 39

3.1.3 O *cond* e o Problema Inverso 42

3.1.4 Discussão sobre o MQ 43

3.2 Regularização por Mínima Variância-RMV 44

3.2.1 Discussão 47

4 Testes, simulações e comparacões com o MQ-RMV **49**

4.1 Comportamento oscilatório 49

4.1.1 Intensidade das Oscilações 53

4.2 Compactação 56

4.3 Regularização 61

4.4 Regularização de Tikhonov 66

4.5 Artefatos 70

4.6 Discussão 75

5 Estudo da secção de choque $^{34}S\,(\gamma, xn)$ **77**

5.1 Introdução 77

5.2 Simulações 79

5.2.1 Artefatos 86

5.3 Análise dos dados experimentais 88

5.4 Discussão 89

6 Radiação de aniquilação $e^- - e^+$ **92**

6.1 Introdução 92

6.2 Experimento 92

6.3 Discussão 99

7 Conclusões e possíveis desdobramentos futuros 101

7.1 Conclusões 101

7.2 Possíveis desdobramentos futuros 103

A Interpretação de dois dados correlacionados (Oscilações e Artefatos) 104

A.1 Correlação negativa- Oscilação 105

A.2 Correlação positiva- Artefato 106

B Dedução da solução de Mínimos Quadrados e Regularização de Tikhonov 108

B.1 A solução de MQ 108

B.2 A solução de Tikhonov 110

Capítulo 1

Introdução

O problema Inverso está presente em muitas áreas das ciências experimentais como em problemas de física, geofísica, química, engenharia, física médica, epidemiologia entre outros [1-12]. Na literatura existe um grande número de procedimentos distintos, propostos para resolução destes problemas. A não-existência de um método único deve-se às dificuldades inerentes dos problemas inversos, como: solução altamente oscilante, a possibilidade do aparecimento de artefatos (estruturas sem significado físico) e distorções entre outros. As dificuldades surgem diferentemente para cada situação experimental e são solucionadas (ou não) caso a caso, dependendo do procedimento de resolução do Problema Inverso utilizado. Trata-se portanto de um problema em aberto.

Para se "desviar" das dificuldades apresentadas acima foram (e são) desenvolvidas técnicas experimentais que não necessitam na análise dos dados, a resolução de Problemas Inversos. Entretanto em algumas situações este "desvio" não é possível, como nos casos onde não se pode ter acesso direto ao objeto de estudo, tais como: nos problemas de tomografia sísmica, imagens médicas, reconstrução de imagens em geral e no estudo de sinais alterados pelo arranjo experimental de deteção.

O presente trabalho apresenta uma revisão e discussão com os métodos de Regularização , Bayesianos e Máxima Entropia.

Os métodos de resolução de Problemas Inversos mais utilizados para dados experimentais, foram desenvolvidos em meados do século XX, como o método de Regularização de Tikhonov-Phillips (década de 60) que foi utilizado inicialmente em problemas unidimensionais nas ciências exatas, mais especificamente em física experimental, e continua sendo muito utilizado em praticamente todas as áreas.

A idéia básica da regularização de Tikhonov-Phillips consiste em impor uma condição de suavidade na solução do problema inverso (sem oscilações), através de uma matriz de estabilização associada a um parâmetro de regularização. Entretanto esta imposição de soluções suaves tem implicações como a possibilidade do aparecimento de artefatos, distorções e tendenciosidades indesejáveis na solução, conforme é mostrado no capítulo 4 deste trabalho. E um dos maiores problemas neste método é a escolha das matrizes de estabilização e do parâmetro de regularização.

Nas décadas de 60-70 foram propostos os métodos Bayesianos que utilizam o teorema de Bayes (1764) aplicado à Problemas Inversos e também são utilizados até hoje. Estes métodos utilizam o conceito de informação *a priori* sobre os resultados, ou seja, informações que se tem sobre os dados experimentais ou parâmetros a serem estimados antes da realização do experimento, como: a massa deve ser positiva, a velocidade deve ser menor que a velocidade da luz, limites superiores e inferiores para grandezas físicas, informações anatômicas para imagens, ou distribuições baseadas em outros resultados experimentais, entre outros. As soluções obtidas pelo método Bayesiano, assim como o aparecimento das "dificuldades inerentes", dependem fortemente da informação *a priori* utilizada. Um risco que se corre na abordagem Bayesiana, é a obtenção de resultados não realistas quando se utiliza uma informação *a priori* não realista. Outra dificuldade deste método tem sido a escolha da informação *a priori* assim como sua justificativa de utilização.

Também na década de 60, E.T. Jaynes propôs a utilização do princípio de máxima entropia de Boltzmann-Gibbs para resolução de Problemas Inversos. O Método de Máxima Entropia é bastante geral, ele permite a obtenção de probabilidades ou distribuições de

probabilidades a partir de informações sobre os dados, que levam a solução. Os resultados dependem muito das informações sobre os dados, que podem variar em cada situação. Conforme demonstra o estudo realizado (secção 2.8), o método de Máxima Entropia fornece a solução clássica de Mínimos Quadrados em certas condições.

O Problema Inverso (quando presente em situações experimentais) é interpretado neste trabalho, como um problema probabilístico ou de análise estatística de dados experimentais, pois em geral os dados medidos estão sujeitos a flutuações presentes no processo de medida, que necessariamente devem ser consideradas e tem implicações. O procedimento de Mínimos Quadrados com regularização por Mínima Variância (MQ-RMV) foi desenvolvido e proposto neste trabalho para resolução de Problemas Inversos unidimensionais.

Foram realizados testes do MQ-RMV e comparações com métodos de regularização (Tikhonov-Phillips) através de simulações numéricas, onde foi possível interpretar as dificuldades inerentes aos problemas inversos. Uma das principais conclusões da aplicação do MQ-RMV, consiste na constatação de que as soluções em geral apresentam dados correlacionados, que podem explicar as oscilações e ajudar na identificação dos artefatos. O presente trabalho, diferentemente dos outros procedimentos, sugere a convivência com soluções altamente oscilantes pois, se devidamente tratadas (consideradas as correlações), podem ser representadas por funções suaves decorrentes de ajustes, que em geral, não são triviais.

No Capítulo 5, é apresentado a aplicação do procedimeto proposto no estudo de secções de choque para reações fotonucleares que utilizam fótons de *bremsstrahlung*. Foram realizadas simulações numéricas e, também obteve-se a secção de choque do ^{34}S para a reação (γ, xn). Muitas secções de choque foram obtidas resolvendo problemas inversos e de acordo com o estudo realizado no presente trabalho estes resultados podem apresentar distorções e/ou artefatos, sendo então interessante, em alguns casos, rever a análise com critérios mais rigorosos ou mesmo medir novamente as secções de choque com outras técnicas experimentais que não envolvam problemas inversos na análise dos dados.

No Capítulo 6 é apresentado a aplicação do MQ-RMV para o estudo da radiação de

aniquilação elétron-pósitron no alumínio obtida de um experimento realizado no Instituto de Física da USP. A análise dos dados necessitou de um ajuste de uma função anaítica a dados altamente correlacionados (espectro obtido pela resolução do Problema Inverso). O procedimento mostrou-se eficiente e confirmou sua aplicabilidade em diferentes situações. Foi possível obter os percentuais de aniquilação nos elétrons da banda de condução e elétrons ligados, assim como as energias de corte de Fermi.

Capítulo 2

Problema Inverso

2.1 Introdução

Neste capítulo são apresentadas as diferentes abordagens para Problemas Inversos. É realizada uma compilação, revisão e discussão de métodos propostos na literatura, em especial os mais utilizados em física experimental: métodos de Regularização, Bayesianos e Máxima Entropia. Apresenta-se também as principais dificuldades existentes (oscilações do espectro, variâncias grandes, artefatos e correlações).

2.2 Definição qualitativa geral

O Problema Inverso pode ser interpretado como uma combinação das seguintes informações:

1. Parâmetros observados. Em geral são os dados resultantes de um experimento realizado ou de dados experimentais provenientes de outros experimentos.

2. Relação entre os parâmetros observados e os parâmetros do modelo. Esta relação pode ser explicitada por uma função matemática relativa ao modelo considerado.

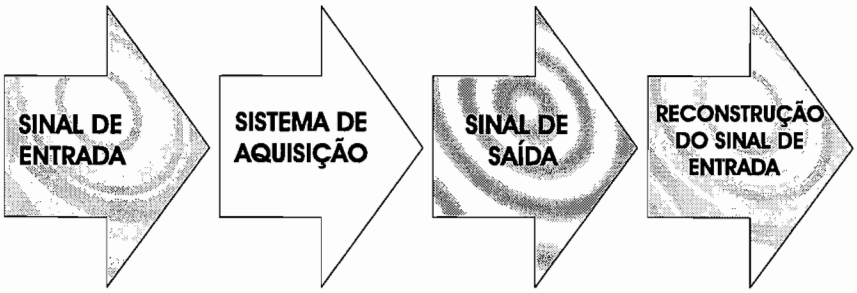
3. Informação prévia sobre os parâmetros do modelo, ou seja, é a informação que se tem (ou não) sobre os parâmetros a serem estimados antes da realização do experimento.

A resolução do Problema Inverso consiste na determinação dos parâmetros do modelo a partir do conhecimento dos ítems 1,2 e 3.

Quando na literatura é utilizado o termo Problema Inverso, também chamado de problema de deconvolução, de problema mal colocado "ill posed problem" ou também sistema mal condicionado "ill conditioned", em geral, deseja-se estimar uma distribuição representada por um espectro unidimensional ou multidimensional (imagens), com centenas ou até milhares de pontos (parâmetros)[1-46, 51, 54, 59-61]. A relação entre os parâmetros do modelo e os dados experimentais pode ser bastante complexa, envolvendo tanto modelos teóricos que descrevem fenômenos físicos quanto modelos relacionados a processos presentes na aquisição e apresentação dos dados experimentais.

2.2.1 Descrição esquemática

A resolução de Problemas Inversos para análise de dados experimentais, pode ser representada na forma esquemática:



O experimento é realizado com o objetivo de estimar o SINAL DE ENTRADA (distribuições, parâmetros, imagens em geral entre outros). Entretando, o processo de medida, através do SISTEMA DE AQUISIÇÃO (funções respostas de arranjos experimentais),

modifica o SINAL DE ENTRADA e apresenta como resultado o SINAL DE SAÍDA (dados experimentais medidos). A RECONSTRUÇÃO DO SINAL DE ENTRADA consiste em "retirar" do SINAL DE SAÍDA a modificação adicionada pelo SISTEMA DE AQUISIÇÃO ; este processo corresponde à resolução do Problema Inverso que pode ser realizada através de algoritmos numéricos (métodos de Mínimos Quadrados, Bayesianos, de Máxima Entropia, entre outros). Em equipamentos de imagens em geral, a resolução do Problema Inverso está presente na reconstrução da imagem de interesse, que é realizada automaticamente com auxílio de algoritmos implementados nos mesmos.

2.3 Caso contínuo

Para um estudo mais detalhado é necessário apresentar o Problema Inverso em uma linguagem mais precisa, vamos considerar os casos que podem ser representados através da equação integral de Fredholm de primeiro tipo [1]:

$$d(y) = \int_a^b k(r,y)m(r)dr \qquad a \leq y \leq b \ , \tag{2.1}$$

$d(y)$ é uma função conhecida e $k(r,y)$ comumente chamado de *kernel* ou núcleo da equação integral, também é uma função conhecida.

A resolução do Problema Inverso consiste na determinação de $m(r)$, ou seja, deve-se resolver a equação integral.

É interessante salientar alguns casos particulares de núcleos:

$$e^{-iyr}, \quad e^{-yr}, \quad rJ_n(yr), \quad r^{y-1}, \tag{2.2}$$

que correspondem às seguintes transformações :

$$d(y) = \int_{-\infty}^{\infty} m(r)e^{-iyr}dr \qquad \text{Transformada de Fourier} \tag{2.3}$$

$$d(y) = \int_0^\infty m(r)e^{-yr}dr \qquad \text{Transformada de Laplace} \tag{2.4}$$

$$d(y) = \int_0^\infty m(r)rJ_n(yr)dr \qquad \text{Transformada de Haenkel} \tag{2.5}$$

$$d(y) = \int_0^\infty m(r)r^{y-1}dr \qquad \text{Transformada de Mellin} \tag{2.6}$$

Nota-se que $d(y)$ é conhecida e deseja-se obter $m(r)$. Nestes casos particulares, pode-se resolver o problema através das respectivas transformadas inversas, que são integrais. Consequentemente, a solução da equação integral se resume na resolução de uma integral. Entretanto, nos casos onde não existem transformadas inversas pode-se utilizar métodos númericos, sujeitos a erros no resultado final provenientes das aproximações feitas. É importante ressaltar que a formulação do Problema Inverso através da equação de Fredholm de primeiro tipo é aplicado a funções. Em situacões que envolvem dados experimentais (caso discreto), não se tem funções, mas dados discretos que podem ser representados por matrizes, sujeitas a flutuações estatísticas presentes no processo de medida. Estas situações são discutidas na secção 2.5.

2.4 Convolução e Deconvolução

A convolução de duas funções k e m é definida por [5],

$$d(y) = \int_a^b k(y-r)\, m(r)dr \qquad a \leq y \leq b\ , \tag{2.7}$$

A Deconvolução consiste na determinação de m a partir do conhecimento de $k(y-r)$ e $d(y)$. Trata-se portanto de um caso particular de Problema Inverso, ou seja, quando o núcleo é do tipo $k(y-r)$. Muitos casos nas ciências experimentais correspondem a problemas de deconvolução [3, 5, 8, 13, 14, 15, 16, 17]. Por exemplo, nas situações onde deseja-se estimar um sinal ($m(r)$) que ao entrar em um sistema de deteção (arranjo experimental) é modificado através da convolução com a função resposta do sistema de deteção com núcleo do tipo $k(y-r)$ (como gaussianas), resultando nos dados experimentais medidos $d(y)$.

2.4.1 Propriedades

A convolução de duas funções obedece a certas propriedades [5] que podem ajudar na solução e/ou interpretação dos problemas de deconvolução. Vamos representar a convolução de k com m resultando em d da seguite maneira:

$$d = k \otimes m \tag{2.8}$$

Propriedades:

- Comutativa $k \otimes m = m \otimes k$
- Associativa $(k \otimes m) \otimes h = k \otimes (m \otimes h)$
- Distributiva $k \otimes (m + h) = k \otimes m + k \otimes h$
- $d' = k' \otimes m = k \otimes m'$ onde ' representa a diferenciação
- Teorema da Convolução : se $d = k \otimes m$ então $D = K.M$ onde $D(w)$, $K(w)$ e $M(w)$ são as transformadas de Fourier de $d(x)$, $k(x)$ e $m(x)$ respectivamente.

2.4.2 Deconvolução de um espectro gaussiano

Vamos apresentar um procedimento baseado no teorema da convolução que pode ser utilizado para a obtenção de soluções analíticas em problemas de deconvolução. No caso de dados experimentais pode ser útil também para prever o comportamento da solução, entretanto nestas situações não é possível obter a solução (espectro final) propriamente dita, pois seria necessário considerar as flutuações estatísticas presentes no processo de medida.

Considerando a equação da convolução:

$$d = k \otimes m \ , \tag{2.9}$$

e o teorema da convolução,

$$D = K \cdot M. \tag{2.10}$$

Pode-se obter a seguinte expressão :

$$m(y) = \int \frac{D(w)}{K(w)} e^{-iwy} dw \ , \tag{2.11}$$

A equação integral 2.1 se resume neste caso, a resolução de uma integral.
Vamos considerar o problema de deconvolução no caso de um sinal gaussiano:

$$d(y) = \frac{e^{\frac{-y^2}{2\sigma_1^2}}}{\sqrt{2\pi}\sigma_1} \ , \tag{2.12}$$

com núcleo também gaussiano,

$$k(y-r) = \frac{e^{\frac{-(y-r)^2}{2\sigma_2^2}}}{\sqrt{2\pi}\sigma_2} \,. \tag{2.13}$$

A solução pode ser dada aplicando a equação 2.11, após a resolução de algumas integrais, chega-se ao seguinte resultado,

$$m(y) = \frac{e^{\frac{-y^2}{2(\sigma_1^2-\sigma_2^2)}}}{\sqrt{2\pi(\sigma_1^2-\sigma_2^2)}} \,. \tag{2.14}$$

Nota-se que a solução é uma gaussiana novamente, com σ dado por:

$$\sigma = \sqrt{\sigma_1^2 - \sigma_2^2} \tag{2.15}$$

Pode-se concluir também que a convolução de duas gaussianas resulta em outra gaussiana com σ dada pela raiz quadrada da soma dos σ's de cada gaussiana ao quadrado. No caso de dados experimentais na forma discreta, deve-se utilizar procedimentos numéricos, e fazer transformadas de Fourier para casos discretos. É interessante salientar também que deve-se considerar, na resolução do problema, as flutuações estatísticas dos dados provenientes do experimento.

2.5 Caso discreto

Conforme dito anteriormente, o presente trabalho irá focalizar o Problema Inverso aplicado a dados experimentais. Inicialmente, é necessário discretizar o problema, pois os resultados experimentais, com exceção de casos particulares, são apresentados na forma discreta, ou seja, através de um vetor de dados experimentais representado pelos elementos d_i:

$$d_i = \int k(i,r)m(r)dr \ , \tag{2.16}$$

aproximando a integral por uma somatória finita, tem-se,

$$\int k(i,r)m(r)dr \simeq \sum_j k_{i,j} \ m_j \ , \tag{2.17}$$

considerando todos os dados d_i, pode-se escrever a equação do problema inverso na forma matricial,

$$\begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_{1,1} & k_{1,2} & \cdots & k_{1,m} \\ k_{2,1} & k_{2,2} & \cdots & k_{2,rm} \\ k_{3,1} & k_{3,2} & \cdots & k_{3,m} \\ \vdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ k_{n,1} & k_{n,2} & \cdots & k_{n,m} \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \\ \vdots \\ m_m \end{bmatrix} \ , \tag{2.18}$$

ou em uma forma mais simples,

$$\mathbf{d} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{m} \ , \tag{2.19}$$

Onde:

- Os elementos d_i representam os dados (conhecidos).
- $k_{i,j}$ são termos que representam o núcleo. É importante notar que eles dependem da função $k(y,r)$ (núcleo da equação integral), e dependem também, do método de integração numérica utilizado na aproximação dada pela equação 2.17.
- m_j são os parâmetros, a serem obtidos pela resolução do Problema Inverso (eles representam a função m(r)).

É importante salientar que o caso discreto da equação de Fredholm de primeiro tipo, corresponde a um sistema de equações lineares nos parâmetros ou também chamado de Problema Inverso linear.

2.6 Regularização

Conforme mencionado no presente trabalho, dentre as dificuldades presentes em problemas inversos, está a grande oscilação dos pontos do espectro resultante. Para minimizar este efeito, Tikhonov e Phillips [18, 19] propuseram o método conhecido como regularização, muito utilizado em praticamente todas as áreas.

2.6.1 O método de Tikhonov

O método de Tikhonov impõe uma condição de suavidade na solução do Problema Inverso ($\mathbf{m}$) da seguinte maneira:

$$\Omega(\mathbf{m}) = \int \left[\frac{d^n\mathbf{m}}{dx^n}\right]^2 dx \quad \text{não pode divergir.} \tag{2.20}$$

A solução é obtida minimizando a seguinte grandeza,

$$Q = [\mathbf{d} - \mathbf{k}(\mathbf{m})]^t \mathbf{V}^{-1} [\mathbf{d} - \mathbf{k}(\mathbf{m})] + \mu\Omega(\mathbf{m}) \ . \tag{2.21}$$

onde $\mathbf{V}$ é a matriz de covariâncias de $\mathbf{d}$, e μ é um escalar, o parâmetro de regularização. Para os casos discretos têm-se uma equação geral e mais adequada:

$$Q = [\mathbf{d} - \mathbf{k}(\mathbf{m})]^t \mathbf{V}^{-1} [\mathbf{d} - \mathbf{k}(\mathbf{m})] + \mu ||\{\mathbf{L}(\mathbf{m})||^2 \ , \tag{2.22}$$

A matriz $\mathbf{L}(\mathbf{m})$ é denominada de matriz de estabilização. Considerando a condição de suavidade de Tikhonov (2.20) a matriz $\mathbf{L}(\mathbf{m})$ é a que representa o espectro resultante da n-ésima derivada de $\mathbf{m}$. Com este formalismo (eq. 2.22), pode-se utilizar a regularização de forma mais ampla que o método proposto inicialmente por Tikhonov, como por exemplo, utilizando uma matriz de estabilização que realiza uma combinação não linear de $\mathbf{m}$ que não corresponde a condição de suavidade de Tikhonov. É interessante salientar que o primeiro termo do lado direito da igualdade da equação 2.22, corresponde à condição clássica de mínimos quadrados, e o segundo termo corresponde à regularização. No caso de uma condição de regularização linear, ou seja, $\mathbf{L}(\mathbf{m}) = \mathbf{L}\mathbf{m}$, e modelo linear ($\mathbf{k}(\mathbf{m}) = \mathbf{k}\,\mathbf{m}$), pode-se mostrar (Apêndice B) que a solução é dada por :

$$\mathbf{m}_{\mu\mathbf{L}} = (\mathbf{k}^t\mathbf{V}^{-1}\mathbf{k} + \mu\mathbf{L}^t\mathbf{L})^{-1}\mathbf{k}^t\mathbf{V}^{-1}\mathbf{d}\ . \tag{2.23}$$

2.6.2 O método de Phillips

A regularização proposta inicialmente por Phillips [19] é um caso particular da regularização de Tikhonov. Phillips propôs a matriz de estabilização relativa à derivada de segunda ordem de $\mathbf{m}$ (n=2 para equação 2.20). Neste caso a matriz $\mathbf{L}$ é independente de $\mathbf{m}$, dada por:

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 & 1 \end{bmatrix} \tag{2.24}$$

Pode-se verificar que a aplicação desta matriz a um espectro $\mathbf{x}$ ou seja, $\mathbf{L}\mathbf{x}$, corresponde a realizar a derivada de segunda ordem numericamente.

Pode-se utilizar também como matriz de estabilização ($\mathbf{L}$) a matriz que realiza a derivada de primeira ordem (ou também chamado de primeiras diferenças). Neste caso

tem-se:

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \tag{2.25}$$

2.6.3 Discussão

Pode-se fazer as seguintes perguntas: Qual matriz de estabilização de regularização ($\mathbf{L}$) deve-se utilizar? Qual deve ser o valor do parâmetro de regularização (μ)? Quais são as implicações destas escolhas ? Nota-se que a solução (eq. 2.23) depende da regularização considerada ($\mathbf{L}$) e de μ, o parâmetro de regularização, que têm sido escolhidos empiricamente e diferentemente para cada situação experimental, configurando-se numa dificuldade para um procedimento padrão.

Existem na literatura, trabalhos que discutem procedimentos para a escolha do parâmetro de regularização [1, 19, 22, 21, 20]. No presente trabalho foi realizado (Capítulo 4) um estudo sobre as implicações das regularizações. Foi realizada também, uma comparação númerica da regularização de Tikhonov, com a matriz $\mathbf{L}$ correspondente às derivadas de primeira e segunda ordem, confrontando com o procedimento proposto neste trabalho (MQ-RMV).

2.7 Interpretação Estatística, Informação *a priori* e o Teorema de Bayes

Nesta seção o Problema Inverso é interpretado como um problema de estimação ou inferência [23]. Procura-se estimar parâmetros, que em geral estão relacionados com grandezas físicas de interesse, a partir de certos critérios (mínimos quadrados, máxima entropia, máxima verossimilhança , métodos de regularização, entre outros). Logicamente deve-se ter algumas informações para a obtenção da solução. Em geral, conhecem-se os dados provenientes do experimento e a relação entre os parâmetros e os dados experimentais (modelo físico). Pode-se considerar também alguma informação que se tem sobre os parâmetros a serem estimados, antes da realização do experimento, também chamado de Informação *a priori*.

O Problema Inverso tem sido tratado com duas abordagens distintas e concorrentes:

- A Bayesiana, que utiliza o teorema de Bayes e o conceito de informação *a priori*, que neste contexto corresponde a informações que se tem sobre os dados experimentais ou sobre os parâmetros de interesse, antes da realização do experimento.
- A clássica ou frequencista, que não faz nehuma hipótese sobre os dados ou parâmetros, ou melhor, que não utiliza a informação *a priori*.

2.7.1 O Teorema de Bayes e o Problema Inverso

O teorema foi proposto por Thomas Bayes e publicado postumamente em 1764, e pode ser demonstrado e verificado a partir da álgebra da teoria de probabilidades. O teorema afirma que,

$$P(B|A) = P(A|B)\frac{P(B)}{P(A)} \tag{2.26}$$

- Onde $P(A|B)$ é a probabilidade condicional, a probabilidade da ocorrência do evento A, dado que o evento B ocorreu.
- $P(B|A)$ é a probabilidade da ocorrência do evento B, dado que o evento A ocorreu.
- $P(A)$ e $P(B)$ são as probabilidades dos eventos A e B, respectivamente.

O teorema pode ser utilizado no cálculo de probabilidades condicionais aplicado a casos reais sem maiores problemas.

O teorema de Bayes tem sido muito utilizado em problemas inversos [4, 24, 25, 27, 26, 28], em praticamente todas as áreas.

Vamos considerar agora a equação para a solução de problemas inversos, decorrente do teorema de Bayes, dada pela de distribuição condicional de $\mathbf{m}$ dada a ocorrência de $\mathbf{d}$:

$$p(\mathbf{m}|\mathbf{d}) = \frac{f(\mathbf{d}|\mathbf{m})\rho(\mathbf{m})}{h(\mathbf{d})} \tag{2.27}$$

Para o caso de problemas inversos interpreta-se da seguite maneira:

- $\mathbf{d}$ é o vetor de dados experimentais medidos
- $\mathbf{m}$ é o vetor de parâmetros ou espectro que contém as grandezas físicas de interesse.
- $f(\mathbf{d}|\mathbf{m})$ representa a distribuição de probabilidades condicional dos dados $\mathbf{d}$, que considera o modelo físico adotado (a relação entre $\mathbf{m}$ e $\mathbf{d}$) também conhecido como distribuição verossimilhança dos dados.
- $\rho(\mathbf{m})$ é a distribuição que contém a informação *a priori* sobre os parâmetros, ou seja, a distribuição dos parâmetros independente dos dados.
- $h(\mathbf{d})$ é a distribuição de probabilidades dos dados (é uma constante).
- $p(\mathbf{m}|\mathbf{d})$ representa a distribuição a *posteriori*, ou seja, é a distribuição dos parâmetros dada a ocorrência dos dados experimentais.

A solução

Para resolução do Problema Inverso é necessário, inicialmente a escolha da informação *a priori* para obtenção da distribuição *a posteriori* (eq. 2.27), alguns exemplos são apresentados a seguir.

Interpretação Bayesiana

Nesta situação utiliza-se uma distribuição para $\rho(\mathbf{m})$ que pode estar associada a modelos físicos ou outros que consideram alguns parâmetros, como por exemplo: a velocidade deve ser menor que a velocidade da luz, a massa deve ser positiva, limites superiores ou inferiores para grandezas físicas, informações sobre anatomia (no caso de imagens médicas), entre outros. A distribuição *a priori* $\rho(\mathbf{m})$ pode também ser construída com inspiração em resultados de outros experimentos disponíveis. Um dos maiores problemas na abordagem bayesiana é a escolha e justificativa da distribuição *a priori* [25, 26].

Vamos considerar inicialmente uma distribuição $\rho(\mathbf{m})$ geral, e dados experimentais que obedecem uma distribuição gaussiana, considerando a eq. 2.27. A distribuição *a posteriori* pode ser escrita como:

$$p(\mathbf{m}|\mathbf{d}) = C\,\rho(\mathbf{m})\; e^{-[\mathbf{d}-\mathbf{k}(\mathbf{m})]^t\mathbf{V}^{-1}[\mathbf{d}-\mathbf{k}(\mathbf{m})]}\;, \tag{2.28}$$

onde C é uma constante de normalização.

Os parâmetros $(\mathbf{m})$ podem ser obtidos maximizando a distribuição $p(\mathbf{m}|\mathbf{d})$. A solução pode ser obtida analiticamente, dependendo da distribuição $\rho(\mathbf{m})$, ou através de métodos numéricos.

Distribuição *a priori* gaussiana

Vamos considerar os casos onde a distribuição *a priori* é gaussiana [24, 29, 30] e o modelo físico considerado é linear nos parâmetros $(\mathbf{K}(\mathbf{m}) = \mathbf{K}\;\mathbf{m})$ utilizando a eq. 2.28

chega-se a,

$$p(\mathbf{m}|\mathbf{d}) = Ce^{-[(\mathbf{m}-\mathbf{m}_{priori})^t V_{priori}^{-1}(\mathbf{m}-\mathbf{m}_{priori})+(\mathbf{d}-\mathbf{k}\,\mathbf{m})^t\mathbf{V}^{-1}(\mathbf{d}-\mathbf{k}\,\mathbf{m})]} \ . \tag{2.29}$$

Maximizando em relação aos parâmetros, pode-se chegar [a] a solução :

$$\mathbf{m} = (\mathbf{k}^t\mathbf{V}^{-1}\mathbf{k} + \mathbf{V}_{priori}^{-1})^{-1}(\mathbf{k}^t\mathbf{V}^{-1}\mathbf{d} + \mathbf{V}_{priori}^{-1}\mathbf{m}_{priori}) \tag{2.30}$$

Estimativa direta

Vamos apresentar um caso onde deseja-se estimar uma grandeza física m_o, a partir de um experimento realizado que fornece $(d_1, d_2, d_3, ..., d_N)$ como resultados experimentais para m_o. Ou seja, deseja-se estimar uma grandeza, sem a necessidade de um modelo físico. Os dados experimentais (d_i) são estatisticamente independentes, a matriz de covariâncias é diagonal,

$$V_{i,i} = \sigma_i^2 \qquad\qquad Vij = 0 \quad (i \neq j) \ , \tag{2.31}$$

e obedecem uma distribuição gaussiana, tem-se então,

$$f(\mathbf{d}|\mathbf{m}) = C\, e^{-\frac{\sum_i (d_i - m)^2}{2\sigma^2}} \ . \tag{2.32}$$

A informação *a priori* apresenta m_{priori} como estimativa para a gradeza física de interesse (m_o), com uma distribuição *a priori* gaussiana, dada por,

[a] A solução pode ser obtida analogamente a solução de Tikhonov desenvolvida no Apêndice B

$$\rho(\mathbf{m}) = C\, e^{-\frac{(m-m_{priori})^2}{2\sigma^2_{priori}}} , \tag{2.33}$$

pode-se então calcular a distribuição *a posteriori* através da eq. 2.27,

$$p(\mathbf{m}|\mathbf{d}) = e^{-\frac{\sum_i (d_i-m)^2}{2\sigma^2} - \frac{(m-m_{priori})^2}{2\sigma^2_{priori}}} . \tag{2.34}$$

A soluçãoé obtida maximizando a distribuição *a posteriori* em relação a m,

$$m = \frac{\frac{N\bar{d}}{\sigma^2} + \frac{m_{priori}}{\sigma^2_{priori}}}{\frac{N}{\sigma^2} + \frac{1}{\sigma^2_{priori}}} , \tag{2.35}$$

com variância dada por,

$$\sigma^2_m = \frac{1}{\frac{N}{\sigma^2} + \frac{1}{\sigma^2_{priori}}} , \tag{2.36}$$

onde $\bar{d}$ corresponde a média aritmética dos dados d_i.

A solução m, corresponde a uma média ponderada de $\bar{d}$ (estimativa clássica de mínimos quadrados) e m_{priori}, com pesos respectivamente dados por $\frac{N}{\sigma^2}$ e $\frac{1}{\sigma^2_{priori}}$, ou seja, inversamente proporcionais às respectivas variâncias. No limite de $\sigma_{priori} \to \infty$, $m = \bar{d}$ e $\sigma^2_m = \frac{\sigma^2}{N}$ que corresponde à estimativa clássica para um conjunto de dados experimentais. Agora, no caso de $\frac{1}{\sigma^2_{priori}} > \frac{N}{\sigma^2}$, o peso da estimativa *a priori* (m_{priori}) será maior que a estimativa proveniente dos dados experimentais ($\bar{d}$) no cálculo da média ponderada. De fato, ao considerar-se a distribuição *a priori*, pode-se chegar a um resultado mais preciso que a solução clássica ($\sigma^2_m < \frac{\sigma^2}{N}$).

Existe um grande risco na abordagem bayesiana, quando não se escolhe uma distribuição a priori realista, comprometendo assim a estimativa final (m). Outro problema

que pode ser apontado, é a possibilidade de se chegar à estimativas com uma alta precisão "artificialmente", pois pode-se escolher uma distribuição *a priori* com σ_{priori} tão pequeno quanto se queira de modo a obter um resultado com variância (σ_m^2) tão pequena quanto se queira.

2.8 O Método da Máxima Entropia

A entropia foi introduzida inicialmente por Rudolf Clausius por volta de 1865 para Sistemas Termodinâmicos. Uma década depois foi apresentada uma interpretação probabilística no contexto da Mecânica Estatística por Boltzmann-Gibbs. Mais tarde em meados do século XX, Jaynes [31, 32] propõe o princípio ou método da máxima entropia para a resolução de problemas inversos que, assim como a regularização de Tikhonov e métodos Bayesianos, tem sido muito utilizado em praticamente todas as áreas das ciências experimentais [33 - 37].

Entropia para Problemas Inversos

Vamos considerar um experimento com N eventos x_i, $i = 1, 2, ..., N$, com probabilidades p_i ou seja, $X = (x_1, x_2, ..., x_N)$. Define-se a entropia de X como:

$$H(X) = -\sum_{i=1}^{N} p_i \; log \; p_i \; . \tag{2.37}$$

O princípio da máxima entropia consiste na estimação de p_i tal que maximize a entropia $H(X)$, a solução de máxima entropia, é denominada no presente trabalho de $p_{m\,i}$. Jaynes considera a entropia como a medida da incerteza. Assim, a incerteza acerca dos valores de X deve ser máxima.

Distribuição uniforme

No caso onde não se tem nenhum conhecimento sobre os dados a solução pode ser obtida fazendo,

$$\frac{d}{dp_i}\left[-\sum_{i=1}^{N} p_i \; log \; p_i\right] = 0 \; , \tag{2.38}$$

que leva a solução,

$$p_{m\,i} = Constante. \tag{2.39}$$

O resultado coincide com o resultado clássico, ou seja, uma distribuição uniforme.

Conhecimento parcial

A solução pode ser diferente para os casos onde existe um conhecimento parcial sobre os dados, da seguinte forma:

$$< g(x_i) >= \theta \; , \tag{2.40}$$

$g(x_i)$ corresponde a uma função conhecida dos dados (x_i), e $< \; >$ corresponde ao valor esperado, ou seja:

$$\sum_{i=1}^{N} p_i \; g(x_i) = \theta \; , \tag{2.41}$$

com a condição de normalização,

$$\sum_{i=1}^{N} p_i = 1 \; , \tag{2.42}$$

A solução p_i pode ser obtida utilizando o método dos multiplicadores de Lagrange, ou seja,

$$\frac{d}{dp_i}\left[-\sum_{i=1}^{N} p_i \; log \; p_i + \mu\left(\theta - \sum_{i=1}^{N} p_i \, g(x_i)\right) + \lambda\left(1 - \sum_{i=1}^{N} p_i\right)\right] = 0 \; , \tag{2.43}$$

resolvendo a equação acima chega-se a,

$$p_{m\,i} = e^{-1-\mu g(x_i)-\lambda} \; . \tag{2.44}$$

Escrevendo de outra forma,

$$p_{m\,i} = \gamma e^{-\mu g(x_i)}. \tag{2.45}$$

A função $g(x_i)$ pode depender de um modelo físico considerado, ou seja, de parâmetros $\mathbf{m}$, neste caso tem-se:

$$p_{m\,i} = \gamma e^{-\mu g(x_i, \mathbf{m})} \tag{2.46}$$

Finalmente, para a obtenção de $\mathbf{m}$ deve-se maximizar p_i em relação aos parâmetros.

Aplicação

Os problemas inversos podem ser resolvidos através do método da máxima entropia, considerando a seguinte condição: O valor esperado de χ^2 é igual ao número de graus de liberdade θ (número de pontos experimentais menos o número de parâmetros) [35, 36, 37], ou seja,

$$g(x_i) = \chi^2 = (d_i - \sum_j k_{ij} m_j)^2 V_{ii}^{-1} \; , \tag{2.47}$$

cujo valor esperado é dado por,

$$\sum_i p_i(d_i - \sum_j k_{ij} m_j)^2 V_{ii}^{-1} = \theta \ . \tag{2.48}$$

Considerando a solução de máxima entropia (eq. 2.46) têm-se:

$$p_{m\,i} = \gamma e^{-\mu(d_i - \sum_j k_{ij} m_j)^2 V_{ii}^{-1}} \tag{2.49}$$

$$\mathbf{p} = \prod_{i=1}^{N} p_i = \gamma^N e^{-\mu \sum_i (d_i - \sum_j k_{ij} m_j)^2 V_{ii}^{-1}} \ . \tag{2.50}$$

Maximizando $\mathbf{p}$ em relação aos parâmetros m_j,

$$\mathbf{m} = (\mathbf{k}^t \mathbf{V}^{-1} \mathbf{k})^{-1} \mathbf{k}^t \mathbf{V}^{-1} \mathbf{d} \ . \tag{2.51}$$

É interessante observar que a utilização de máxima entropia com a condição $< \chi^2 >= \theta$, fornece um resultado que corresponde a condição clássica de mínimos quadrados.

O Método da Máxima Entropia é bastante geral, as soluções dependem fortemente da função $g(x_i, \mathbf{m})$ considerada.

2.9 O problema do Problema Inverso

O termo *ill posed*, introduzido por Hadamard é bastante utilizado. Apresenta-se a seguir, sem a totalidade do rigor da linguagem matemática, a definição de *well posed e ill posed problems*, uma definição mais rigorosa pode ser obtida em [18].

A solução para o Problema Inverso é considerado *well posed* se obedece a três condições:

- Existência da solução

- Unicidade da solução
- A solução é estável (esta condição está relacionada com a continuidade da solução).

Caso a solução não obedeça a pelo menos uma das condições acima, o problema é considerado *ill posed.* É importante salientar que a definição acima é feita para funções, no espaço contínuo. Em geral, nos problemas inversos aplicados às ciencias experimentais, têm-se espectros discretos.

Uma outra definição mais geral, aplicada aos casos discretos, presente no trabalho de Hansen [1], é apresentada a seguir: "Quando a solução do Problema Inverso é extremamente sensível a pertubações pequenas no sistema, o problema é considerado como *ill posed* ".

Ambas definições sugerem a existência de soluções instáveis, o que de fato ocorre, conforme mostram as simulações numéricas realizadas no Cap4. O grande problema é como lidar com estas soluções.

2.9.1 Dificuldades

A existência de diversos procedimentos propostos para a resolução de problemas inversos aplicados às ciências experimentais pode ser justificada pela presença de algumas dificuldades inerentes. Nesta seção é realizada uma apresentação resumida. Nas seções que se seguem são apresentados alguns exemplos de simulações e situações experimentais reais, onde é realizada uma discussão mais detalhada, incluido comparações do procedimento proposto (MQ-RMV) e da regularização de Tikhonov. As dificuldades são apresentadas a seguir:

1. Grande oscilação do espectro resultante.

   A solução, obtida através de inversão direta da matriz $\mathbf{k}$, do método dos mínimos quadrados ou procedimentos de regularização (com parâmetro de regularização de

valor baixo) pode apresentar um espectro altamente oscilatório. Nestas situações é impossível observar qualitativamente alguma estrutura física. Na figura 2.1 são apresentados os resultados da aplicação do procedimento de regularização em simulações numéricas, apresentados no trabalho de Phillips [19], onde λ corresponde ao parâmetro de regularização. Pode-se notar o comportamento oscilatório para $\lambda = 0$ (típico de problemas inversos).

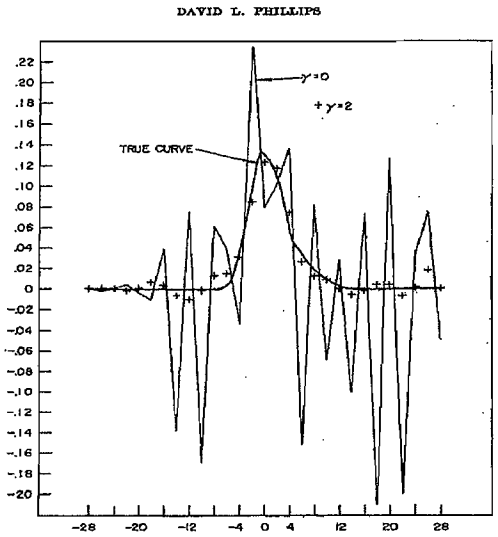


Figura 2.1: Oscilações em Problemas Inversos

2. Variâncias muito grandes.

   Outro problema que está associado à grande oscilação, é o fato de que os resultados têm incertezas enormes.

3. Dificuldade na escolha de procedimentos de regularização e distribuições *a priori*.

   Com o propósito de minimizar as oscilações e diminuir as variâncias, foram desenvolvidos diversos procedimentos como métodos de Regularização e Bayesianos. Entretanto existem dificuldades para as escolhas e justificativas de considerações *ad*

hoc (parâmetro de regularização, matriz de estabilização, distribuição *a priori*, entre outros), que tem diferentes implicações.

4. Possibilidade de aparecimento de artefatos

   A aplicação de métodos bayesianos ou de regularização, pode levar ao aparecimento de artefatos, que são estruturas que aparecem no resultado e que não têm significado físico. Nestas situações os artefatos podem ser interpretados erroneamente como fenômenos físicos. Os artefatos podem aparecer em problemas que envolvem processamento de imagens (imagens médicas, geofísicas entre outras), ou também em situações experimentais que resultam em espectros unidimensionais (espectroscopia alfa, beta e gama, determinações de secções de choque entre outros)

5. Resultados tendenciosos

   A aplicação de métodos de regularização ou Bayesianos, também pode levar a tendenciosidade[b] nos resultados. A tendenciosidade pode levar a distorções indesejadas nas soluções, no Capítulo 4 são apresentados testes de distorção através de simulações, que dependem dos parâmetros *ad hoc* (como informação *a priori*, matriz de estabilização e parâmetro de regularização).

[b] Conceito em Estatística definido em [49]

Capítulo 3

O método proposto: MQ-RMV

3.1 O método dos Mínimos Quadrados-MQ

O método dos mínimos quadrados foi proposto por Gauss (1777-1855) e aplicado inicialmente em astronomia. Hoje é utilizado em praticamente todas as áreas das ciências. Um procedimento muito utilizado é a regressão linear ou ajuste de reta a um conjunto de dados experimentais. Em princípio o MQ pode ser utilizado para ajustar qualquer função (relacionada com um modelo físico) a um conjunto de dados experimentais, desde que o número de graus de liberdade seja maior que zero. Desta maneira pode-se realizar testes de modelos, fazer interpolações /extrapolações e estimar grandezas físicas de interesse. Conforme apresentado nos capítulos precedentes, existem diferentes interpretações sobre o problema inverso. O procedimento proposto no presente trabalho, interpreta como um problema de estimação (na linguagem dos estatísticos) ou um problema de análise de dados experimentais (na linguagem dos físicos). Ou seja: deseja-se estimar parâmetros considerando um modelo físico e os dados experimentais sujeitos a erros (variâncias e covariâncias) presentes no processo de medida.

Em problemas inversos (caso discreto) a abordagem é diferente do ajuste de funções utilizando o procedimento clássico de mínimos quadrados. Os parâmetros a serem esti-

mados correspondem aos pontos de espectros de interesse, que podem ser unidimensionais (espectros alfa, beta e gama, secções de choque em geral e distribuições em geral, entre outros) ou multidimensionais (imagens para diagnóstico médico, imagens geofísicas entre outros). Após a determinação do espectro de interesse, pode-se (ou não) ajustar funções para obter mais informações quantitativas.

Os problemas que decorrem da equação de Fredholm de primeiro tipo, podem ser representados pela eq. 2.19. Entretanto, no caso de dados experimentais sujeitos a erros presentes no processo de medida (ϵ), tem-se uma equação mais adequada:

$$\mathbf{d} = \mathbf{d}_o + \epsilon \tag{3.1}$$

onde $\mathbf{d}_o$ é o vetor que representa o valor verdadeiro [47] dos dados experimentais ($\mathbf{d}$), ou seja, é o valor que os dados teriam caso a experiência fosse ideal, ou com erros identicamente iguais a zero, logicamente é uma situação hipotética. É importante salientar que tanto $\mathbf{d}_o$ como ϵ são (e sempre serão) desconhecidos, pois caso contrário, não seria necessária a experiência. Entretanto, eles podem ser estimados através de métodos estatísticos. Vamos considerar os casos onde os erros têm as seguintes propriedades,

$$< \epsilon_i >= 0 \qquad e \qquad < \epsilon_i^2 >= \sigma_i^2 \tag{3.2}$$

Vamos considerar também um modelo físico linear (ou linearizável),

$$\mathbf{d} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{m}_o + \epsilon \ , \tag{3.3}$$

onde $\mathbf{m}_o$ é o vetor dos parâmetros verdadeiros a ser estimado.

O método dos mínimos quadrados, como o próprio nome diz, consiste em determinar parâmetros que minimizam a somatória das diferenças quadráticas, dada pela equação:

$$Q = \sum_i V_{ii}^{-1}(d_i - \sum_j k_{ij}m_j)^2 \ , \tag{3.4}$$

sendo que a equação acima é válida para dados estatisticamente independentes. Para o caso geral tem-se,

$$Q = (\mathbf{d} - \mathbf{km})^t \mathbf{V}^{-1}(\mathbf{d} - \mathbf{km}) \ . \tag{3.5}$$

Minimizando Q em relação a $\mathbf{m}$, e após algumas passagens algébricas (Apêndice B), pode-se chegar à solução:

$$\mathbf{m} = (\mathbf{k}^t\mathbf{V}^{-1}\mathbf{k})^{-1}\mathbf{k}^t\mathbf{V}^{-1}\mathbf{d}. \tag{3.6}$$

A matriz de covariâncias de $\mathbf{m}$ é dada por (Apêndice B):

$$\mathbf{V}_m = (\mathbf{k}^t\mathbf{V}^{-1}\mathbf{k})^{-1} \tag{3.7}$$

3.1.1 Dados correlacionados

As correlações estatísticas foram de grande importância para a interpretação das dificuldades (oscilações, variâncias grandes e artefatos) no estudo de Problemas Inversos proposto pelo presente trabalho (Capítulo 4).

Nesta seção, é apresentado um pequeno resumo de conceitos e fórmulas utilizados:

- Dados estatisticamente independentes têm a matriz de covariâncias diagonal, ou seja, na diagonal estão as variâcias dos dados, que correspondem ao quadrado das

incertezas, e, fora da diagonal, os elementos são nulos:

$$V_{ij} = \sigma_i^2 \;\; (p/\; i = j) \quad e \;\; V_{ij} = 0 \;\; (p/i \neq j) \; . \tag{3.8}$$

- Dados estatisticamente dependentes também chamados de covariantes ou correlacionados, têm a matriz de covariâncias não diagonal, ou seja, na sua diagonal estão as variâncias dos dados e fora da diagonal existem elementos não nulos chamados de covariâncias. A covariância de x_i em relação a x_j é dada pelo elemento da matriz V_{ij}.

$$V_{i,j} = cov(x_i, x_j)$$

onde,

$$cov(x_i, x_j) =< (x_i - x_{o\,i})\,(x_j - x_{o\,j}) > \; , \tag{3.9}$$

e $x_{o\,i}$ e $x_{o\,j}$ correspondem aos valores verdadeiros das variáveis x_i e x_j.

- O coeficiente de correlação , também chamado simplesmente de correlação, pode ser utilizado para quantificar a dependência estatística dos dados. A correlação entre os dados x_i e x_j é definida por:

$$\rho_{i,j} = \frac{V_{ij}}{\sqrt{V_{ii}V_{jj}}}, \qquad \text{onde} - 1 < \;\; \rho_{i,j} \;\; < 1 \; . \tag{3.10}$$

Dada a correlação entre dois dados, pode-se calcular por exemplo, a probabilidade de um dado ser superestimado ou subestimado caso o outro dado seja superestimado ou subestimado. No Apêndice A, são apresentadas as fórmulas e exemplos numéricos que são aplicáveis aos casos estudados no Capítulo 4.

3.1.2 Matrizes mal condicionadas

Na seção 2.9, foram apresentados os conceitos de problemas mal colocados nas abordagens de Hansen e Hadamard, que são úteis para classificar qualitativamente os Problemas Inversos. Um conceito quantitativo mais prático, que pode ser utilizado junto com o MQ para Problemas Inversos, é o conceito de sistema "mal condicionado" do inglês *ill conditioned* [4].

O número de condição de uma matriz $\mathbf{A}$ é definida por:

$$cond(\mathbf{A})_k = \|\mathbf{A}\|_k \, \|\mathbf{A}^{-1}\|_k \tag{3.11}$$

onde $\|A\|_k$ representa a norma do tipo k da matriz dada por:

$$\|\mathbf{A}\|_1 = max \sum_i |A^{ij}| \tag{3.12}$$

$$\|\mathbf{A}\|_\infty = max \sum_j |A^{ij}| \tag{3.13}$$

$$\|\mathbf{A}\|_2 = \sqrt{max \ \lambda_i(\mathbf{A}^* \, \mathbf{A})} \tag{3.14}$$

onde $\mathbf{A}^*$ é matriz adjunta de $\mathbf{A}$ e $\lambda_i(\mathbf{A}^* \, \mathbf{A})$ corresponde aos autovalores de $(\mathbf{A}^* \, \mathbf{A})$

Valem as seguintes propriedades [4, 48]:

$$cond(\mathbf{A}) = cond(\mathbf{A}^{-1}) \tag{3.15}$$

$$\textit{dado} \quad \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad \textit{então} \quad \|\mathbf{b}\| \leq \|\mathbf{A}\| \, \|\mathbf{x}\| \tag{3.16}$$

Considerando um sistema linear dado por $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$:

- quando $cond(\mathbf{A}) \approx 1$ o sistema é considerado "bem condicionado".
- quando $cond(\mathbf{A}) \gg 1$ o sistema é considerado "mal condicionado" .

Um exemplo numérico[a]

Vamos considerar o seguinte sistema de equações lineares,

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{d} \, , \tag{3.17}$$

onde

$$\mathbf{k} = \begin{bmatrix} 10 & 7 & 8 & 7 \\ 7 & 5 & 6 & 5 \\ 8 & 6 & 10 & 9 \\ 7 & 5 & 9 & 10 \end{bmatrix} \quad , \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} \quad , \quad \mathbf{d} = \begin{bmatrix} 32.0 \\ 23.0 \\ 33.0 \\ 31.0 \end{bmatrix} \, . \tag{3.18}$$

Resolvendo o sistema chega-se a seguinte solução:

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.0 \\ 1.0 \\ 1.0 \\ 1.0 \end{bmatrix} \, . \tag{3.19}$$

[a] Baseado no exemplo do Livro de Tarantola [4]

Pode-se considerar o sistema como "mal condicionado" pois $cond(\mathbf{k})$[b] $= 2,98 \cdot 10^3$ Agora vamos considerar um vetor $\mathbf{d}'$ "levemente" diferente de $\mathbf{d}$:

$$\mathbf{d}' = \begin{bmatrix} 32.1 \\ 22.9 \\ 33.0 \\ 31.1 \end{bmatrix} , \tag{3.20}$$

resolvendo o sistema:

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{d}' , \tag{3.21}$$

chega-se a seguite solução:

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7.0 \\ -8.9 \\ 3.4 \\ -0.4 \end{bmatrix} . \tag{3.22}$$

Um resultado surpreendente, pois uma diferença menor que 0,5% de $\mathbf{d}'$ em relação $\mathbf{d}$, implica em uma diferença , em alguns casos, de até 890% ! na solução do sistema linear. Pode-se comprovar sem maiores problemas, que este comportamento de solução altamente instável a pequenas variações, não ocorre em um sistema bem condicionado, por exemplo, considerando o mesmo caso apresentado, com uma matriz $\mathbf{k}$ onde o $cond(\mathbf{k})$ tem ordem de grandeza de 10. Deve existir, portanto, uma relação entre sistemas com soluções instáveis e número de condição ($cond(\mathbf{k})$).

[b] Calculado pela subrotina *cond* do Matlab que calcula o maior valor singular sobre o menor valor singular de $\mathbf{k}$.

3.1.3 O *cond* e o Problema Inverso

A solução de MQ pode ser escrita na forma de um sistema linear de equações, lembrando que a solução é dada por:

$$\mathbf{m} = (\mathbf{k}^t\mathbf{V}^{-1}\mathbf{k})^{-1}\mathbf{k}^t\mathbf{V}^{-1}\mathbf{d} \ , \tag{3.23}$$

para matrizes $\mathbf{k}$ quadradas, que corresponde a obter um espetro $\mathbf{m}$ com o mesmo número de dados experimentais $\mathbf{d}$, pode-se escrever,

$$\mathbf{A}^{-1} \equiv (\mathbf{k}^t\mathbf{V}^{-1}\mathbf{k})^{-1}\mathbf{k}^t\mathbf{V}^{-1} \ , \tag{3.24}$$

logo,

$$\mathbf{m} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{d} \ . \tag{3.25}$$

Vamos considerar uma perturbação nos dados experimentais dado por $\delta\mathbf{d}$ que provoca uma perturbação na solução do Problema Inverso de $\delta\mathbf{m}$, ou seja:

$$(\mathbf{m} + \delta\mathbf{m}) = \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{d} + \delta\mathbf{d}) \ , \tag{3.26}$$

como $\mathbf{m} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{d}$ tem-se,

$$\delta\mathbf{m} = \mathbf{A}^{-1}\delta\mathbf{d} \ , \tag{3.27}$$

aplicando a propriedade 3.16 na equação acima,

$$\|\delta\mathbf{m}\| \leq \|\mathbf{A}^{-1}\| \, \|\delta\mathbf{d}\| \ , \tag{3.28}$$

analogamente para $\mathbf{d} = \mathbf{Am}$ tem-se,

$$\|\mathbf{d}\| \leq \|\mathbf{A}\| \, \|\mathbf{m}\| \, , \tag{3.29}$$

considerando as equações 3.28 e 3.29 pode-se chegar a,

$$\frac{\|\delta\mathbf{m}\|}{\|\mathbf{m}\|} \leq \|\mathbf{A}\| \, \|\mathbf{A}^{-1}\| \, \frac{\|\delta\mathbf{d}\|}{\|\mathbf{d}\|} \, , \tag{3.30}$$

de acordo com a definição do *cond*, tem-se:

$$\frac{\|\delta\mathbf{m}\|}{\|\mathbf{m}\|} \leq \; cond(\mathbf{A}) \, \frac{\|\delta\mathbf{d}\|}{\|\mathbf{d}\|} \, . \tag{3.31}$$

A equação acima permite uma interpretação bastante útil e prática: para um dado erro relativo nos dados experimentais ($\frac{\|\delta\mathbf{d}\|}{\|\mathbf{d}\|}$), se $cond(\mathbf{A})$ for grande o erro relativo da solução ($\frac{\|\delta\mathbf{m}\|}{\|\mathbf{m}\|}$) pode também ser grande.

Nas seções que se seguem foram realizados testes numéricos e experimentais para o *cond*. Verificou-se que em geral, nos problemas mal condicionados, quando o *cond* é muito maior que 1, de fato, as incertezas relativas da solução são amplificadas em relação aos dados experimentais por algumas ordens de grandeza.

3.1.4 Discussão sobre o MQ

O método dos mínimos quadrados para ajuste de funções é muito utilizado, talvez o mais utilizado. Esta grande utilização deve-se, entre outros, ao fato que o MQ tem algumas propriedades estatísticas para estimadores que são desejáveis [49]: consistência, eficiência, não tendenciosidade e mínima variância para o modelo linear.

Em problemas inversos, diferentemente do caso de ajuste de funções, o MQ é utilizado com uma frequência bem menor em relação aos outros procedimentos propostos

na literatura, pois a solução apresenta um espectro com grandes oscilações de modo a ocultar as estruturas físicas desejadas. Como apresentado anteriormente, para minimizar as oscilações, foram e são desenvolvidos métodos de Regularização e métodos Bayesianos. De acordo com os resultados do presente trabalho (Capítulo 4), os espectros, mesmo que oscilantes, podem ser representados por funções suaves.

Analisando a equação 3.7, verifica-se que a menos de casos muito particulares, a matriz V_m é não-diagonal, ou seja: os pontos do espectro resultante do problema inverso são covariantes ou correlacionados. No presente trabalho (Capítulo 4) verifica-se que as correlações geradas pela resolução do problema inverso foram importantes para explicar as típicas oscilações, identificar os artefatos e permitir o ajuste de funções suaves ao espectros oscilantes.

3.2 Regularização por Mínima Variância-RMV

Com o propósito de minimizar as típicas oscilações o método de regularização por mínima variância foi desenvolvido. Foram realizadas duas aplicações da RMV (Caps. 5 e 6) e parte dos resultados também foram apresentados em trabalhos recentes [7, 8, 50]. A abordagem proposta pelo presente trabalho é diferente da regularização de Tikhonov. O procedimento (MQ-RMV) têm três fases:

1. Inicialmente determina-se a solução ($\mathbf{m}$) do Problema Inverso por MQ.

2. Dependendo do problema físico, com o objetivo de minimizar as oscilações, pode-se (ou não) regularizar o espectro $\mathbf{m}$ pela RMV.

3. Finalmente pode-se (ou não) ajustar uma função ao espectro $\mathbf{m}$ com o objetivo de obter mais informações físicas.

A regularização por mínima variância do espectro consiste em uma transformação linear, uma média ponderada de três pontos. Os pesos das médias são calculados de

maneira a minimizar as variâncias dos pontos do espectro regularizado $\mathbf{m}_R$, dado por:

$$\mathbf{m}_R = \mathbf{R} \cdot \mathbf{m} \ , \tag{3.32}$$

com a matriz de covariâncias do espectro regularizado é dada por:

$$\mathbf{V}_R = \mathbf{R}\mathbf{V}_m\mathbf{R}^t \ , \tag{3.33}$$

e $\mathbf{R}$ corresponde a matriz de regularização por mínima variância:

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} a_1 & 1-2a_1 & a_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & 1-2a_2 & a_2 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & a_{m-2} & 1-2a_{m-2} & a_{m-2} \end{bmatrix} . \tag{3.34}$$

os coeficientes a_i são obtidos minimizando as variâncias do espectro regularizado[c] ,

$$V_{Ri,i} = a_i^2(V_{m_{i-1,i-1}} - 4V_{m_{i-1,i+2}} + 2V_{m_{i-1,i+1}} + 4V_{m_{i,i}} - 4V_{m_{i,i+1}} + V_{m_{i+1,i+1}}) +$$

$$+a_i(2V_{m_{i-1,i}} - 4V_{m_{i,i}} + 2V_{m_{i,i+1}}) + V_{m_{i,i}} \ , \tag{3.35}$$

em relação aos parâmetros a_i, ou seja, fazendo,

[c] Para obtenção da equação 3.35, utilizou-se que $V_{m\ i,j} = V_{m\ j,i}$ (propriedade de simetria da matriz de covariâncias).

$$\frac{d}{da_i} V_{Ri,i} = 0 \ , \tag{3.36}$$

chega-se a:

$$a_i = \frac{-V_{m_{i,i+1}} + 2V_{m_{i+1,i+1}} - V_{m_{i+1,i+2}}}{V_{m_{i,i}} - 4V_{m_{i,i+1}} + 2V_{m_{i,i+2}} + 4V_{m_{i+1,i+1}} - 4V_{m_{i+1,i+2}} + V_{m_{i+2,i+2}}} \tag{3.37}$$

A regularização por mínima variância pode ser aplicada a espectros localmente simétricos, e nestes caso as simetrias locais irão manter-se, conforme a demonstração a seguir.

Vamos considerar espectros localmente simétricos em relação ao canal Δ (ímpar) com uma simetria na matriz de covariâncias para pontos simétricos, ou seja, variâncias e covariâncias iguais para pontos simétricos, explicitando melhor,

$$m_k = m_{2\Delta-k} \qquad {\scriptstyle (k=1,2...\Delta)} \ , \tag{3.38}$$

e

$$\mathbf{V}_m = \left[\begin{array}{c|c|c|c|c|c|c} \mathrm{V}_{m_{1,1}} & \mathrm{V}_{m_{1,2}} & \mathrm{V}_{m_{1,3}} & \mathrm{V}_{m_{1,4}} & \mathrm{V}_{m_{1,5}} & \cdots & \mathrm{V}_{m_{1,2\Delta+1}} \\ \hline \mathrm{V}_{m_{1,2}} & \mathrm{V}_{m_{2,2}} & \mathrm{V}_{m_{2,3}} & \mathrm{V}_{m_{2,4}} & \ddots & \ddots & \vdots \\ \hline \mathrm{V}_{m_{1,3}} & \mathrm{V}_{m_{2,3}} & \mathrm{V}_{m_{3,3}} & \ddots & \ddots & \ddots & \mathrm{V}_{m_{1,5}} \\ \hline \mathrm{V}_{m_{1,4}} & \mathrm{V}_{m_{2,4}} & \ddots & \ddots & \ddots & \mathrm{V}_{m_{2,4}} & \mathrm{V}_{m_{1,4}} \\ \hline \mathrm{V}_{m_{1,5}} & \ddots & \ddots & \ddots & \mathrm{V}_{m_{3,3}} & \mathrm{V}_{m_{2,3}} & \mathrm{V}_{m_{1,3}} \\ \hline \vdots & \ddots & \ddots & \mathrm{V}_{m_{2,4}} & \mathrm{V}_{m_{2,3}} & \mathrm{V}_{m_{2,2}} & \mathrm{V}_{m_{1,2}} \\ \hline \mathrm{V}_{m_{1,2\Delta+1}} & \cdots & \mathrm{V}_{m_{1,5}} & \mathrm{V}_{m_{1,4}} & \mathrm{V}_{m_{1,3}} & \mathrm{V}_{m_{1,2}} & \mathrm{V}_{m_{1,1}} \end{array}\right] . \tag{3.39}$$

Os parâmetros a_i serão iguais para pontos simétricos do espectro $\mathbf{m}$ devido à simetria da

equação 3.37 em relação às variâncias e covariâncias, ou seja,

$$a_i = a_{2\Delta - i} \qquad (i=2,3,\ldots,\Delta-1) \ , \tag{3.40}$$

logo, a matriz de regularização terá a seguinte estrutura,

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} R_{1,1} & R_{1,2} & R_{1,1} & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & R_{2,2} & R_{2,1} & R_{2,2} & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & R_{3,3} & R_{3,4} & R_{3,3} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & R_{3,3} & R_{3,4} & R_{3,3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & R_{2,2} & R_{2,1} & R_{2,2} & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & R_{1,1} & R_{1,2} & R_{1,1} \end{bmatrix} . \tag{3.41}$$

Consequentemente, pode-se verificar, que a aplicação de $\mathbf{R}$ preserva as simetrias locais de um espectro.

3.2.1 Discussão

É importante salientar que, assim como a resolução do Problema Inverso, a regularização gera dados correlacionados. Se for necessário realizar um ajuste no espectro regularizado para obtenção das grandezas físicas, deve-se portanto realizar um ajuste a dados correlacionados. O procedimento proposto para problemas inversos (MQ-RMV) permite a realizacão do ajuste a dados correlacionados sem maiores problemas, pois fornece em todos os passos as devidas correlações ou covariâncias geradas.

A RMV, diferentemente dos médodos de regularização de Tikhonov, não depende de parâmetros *ad hoc* (parâmetros de regularização, matriz de estabilização) e tem se mostrado eficiente em reduzir as oscilações. Nos Capítulos que se seguem são apresentados testes e comparações com outros métodos, assim como aplicações a espectros simulados

e dados experimentais (estudos de secções de choque para reações fotonucleares e estudo da radiação de aniquilação elétron-pósitron).

Capítulo 4

Testes, simulações e comparacões com o MQ-RMV

Neste capítulo são apresentados testes com o procedimento proposto (MQ-RMV) e comparações com o método de regularização de Tikhonov, através de simulações de espectros multicanais experimentais. Os espectros simulados correspondem a convolução de gaussianas. Os programas utilizados nos cálculos foram desenvolvidos em códigos para Matlab 6.0/R.12 e Fortran[a], nos programas desenvolvidos para ajustes de funções não lineares foi utilizado o Método de Gauss-Marquardt.

4.1 Comportamento oscilatório

Vamos considerar os casos onde os espectros multicanais têm erros regidos por uma distribuição de Poisson, a função de probabilidade de média a é dada por:

$$P_a(n) = \frac{a^n e^{-a}}{n!} , \tag{4.1}$$

[a] Utilizou-se o pacote IMSL para inversão de matrizes

com variância dada por:

$$\sigma^2 = a \ . \tag{4.2}$$

No caso de a ser grande ($a >> 1$) a função de probabilidade de Poisson aproxima-se de uma função de probabilidade gaussiana:

$$P_a(n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} e^{-\frac{(n-a)^2}{2a}} \tag{4.3}$$

Vamos representar o sinal simulado por $\mathbf{d}_S$, resultante da convolução de duas gaussianas representado pelo produto de matrizes mais um vetor de erros:

$$\mathbf{d}_S = \mathbf{k}\mathbf{m}_S + \epsilon \ , \tag{4.4}$$

os elementos das matrizes são dados por:

$$k_{ij} = \frac{A_1}{\sqrt{2\pi}\sigma_1} e^{-\frac{(i-j)^2}{2\sigma_1^2}} \ , \tag{4.5}$$

e

$$m_{Si} = \frac{A_2}{\sqrt{2\pi}\sigma_2} e^{-\frac{(i-x_o)^2}{2\sigma_2^2}} \ . \tag{4.6}$$

Para o cálculo do espectro simulado $\mathbf{d}_S$ (com 100 canais), utilizou-se: $\sigma_1 = 1.2$ canais, $A_1 = 1$, $\sigma_2 = 5$ canais, $A_2 = 2 \cdot 10^5$, contagens fundo de 200 contagens e um erro dado por uma distribuição de Poisson:

$$\epsilon_i = \sum_j k_{ij} m_j - poissrnd\,(\sum_j k_{ij} m_j)\ , \tag{4.7}$$

onde $poissrnd(X)$ corresponde a um número aleatório determinado por uma distribuição de Poisson de média X com desvio padrão dado por:

$$\sigma_i = \sqrt{d_{Si}}\ . \tag{4.8}$$

A partir do espectro simulado $\mathbf{d}_S$ e do núcleo $\mathbf{k}$ aplicou-se o procedimento de MQ para a estimação da gaussiana $\mathbf{m}_S$, o espectro resultante $\mathbf{m}$ é apresentado na Figura 4.1. Calculou-se também a matriz de correlação do espectro resultante apresentado na Tabela 4.1.

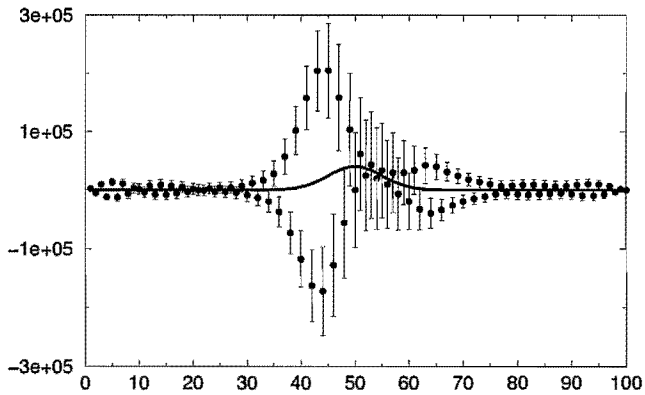


Figura 4.1: Linha sólida: gaussiana $\mathbf{m}_S$. Pontos com barras de incertezas: espectro obtido por MQ .

É interessante salientar que o espectro da Figura 4.1 difere muito da gaussiana $\mathbf{m}_S$, apresentando um comportamento muito oscilante com valores negativos para alguns pontos de até -10^5, uma das dificuldades típica em problemas inversos. Em algumas situações experimentais os valores negativos não tem sentido, como por exemplo na determinação

	46	47	48	49	50	51	52	53	54
46	1	-0.985	0.942	-0.878	0.800	-0.715	0.629	-0.548	0.473
47	-0.985	1	-0.984	0.942	-0.877	0.798	-0.713	0.628	-0.548
48	0.942	-0.984	1	-0.984	0.941	-0.876	0.797	-0.713	0.629
49	-0.878	0.942	-0.984	1	-0.984	0.941	-0.876	0.798	-0.7141
50	0.800	-0.877	0.941	-0.984	1	-0.984	0.941	-0.876	0.799
51	-0.715	0.798	-0.876	0.941	-0.984	1	-0.984	0.941	-0.878
52	0.629	-0.713	0.798	-0.876	0.941	-0.987	1	-0.984	0.942
53	-0.548	0.628	-0.713	0.798	-0.876	0.941	-0.984	1	-0.985
54	0.473	-0.548	0.629	-0.714	0.796	-0.871	0.942	-0.985	1

Tabela 4.1: Coeficientes de correlação relativos aos canais 46-54

de massas, densidades, probabilidades, entre outros. Nestas situações poderíamos questionar: O que fazer com estes resultados negativos ? Deveríamos considerar apenas os resultados positivos ? Esta questões são respondidas no presente trabalho.

Os elementos da diagonal ($\rho_{i,i+1}$) (Tabela 4.1) localizados acima da diagonal principal correspondem às correlações de pontos vizinhos, pode-se observar que são grandes ($\simeq -0.98$) e negativas. Estas correlações podem explicar o comportamento oscilatório, pois se a correlação entre pontos vizinhos é altamente negativa, e se um dado for subestimado o vizinho provavelmente será superestimado e o vizinho deste provavelmente, será subestimado, assim por diante, resultando em um comportamento oscilatório (ver Apêndice A). Esta é uma interpretação simplificada pois considera apenas as correlações de pontos vizinhos e, de fato, observando a matriz de correlação obtida, todos os pontos são correlacionados entre si. Nas seções que se seguem verifica-se que, de fato, as intensidades das oscilações estão relacionadas com as correlações entre os pontos vizinhos do espectro resultante do Problema Inverso.

4.1.1 Intensidade das Oscilações

Nesta secção é realizado um estudo das oscilações em problemas inversos, que podem ser quantificadas através de alguns parâmetros (*cond*, *ARI*, ρ) descritos a seguir.

Vamos considerar novamente o caso da convolução de duas gaussianas com erro determinado por uma distribuição de Poisson (equações 4.4, 4.5 e 4.6). Inicialmente foi aplicado o MQ para vários valores de σ_1 e para cada caso foram calculados o coeficiente de correlação de pontos vizinhos ($\rho_{49,50}$) , o número de condição do núcleo ($cond(\mathbf{k})$) e a amplificação relativa das incertezas *ARI* definida por:

$$ARI = \frac{\left(\frac{\|\sigma \mathbf{d}\|}{\|\mathbf{d}\|}\right)}{\left(\frac{\|\sigma \mathbf{m}\|}{\|\mathbf{m}\|}\right)}, \tag{4.9}$$

onde $\|\sigma\mathbf{d}\|$ e $\|\sigma\mathbf{m}\|$ representam as normas L-2 dos vetores das incertezas de $\mathbf{d}$ e $\mathbf{m}$ respectivamente.

Utilizou-se nos espectros simulados ($\mathbf{d}_S$), $A_1 = 1$ contagem, $\sigma_2 = 5$ canais, $A_2 = 5 \cdot 10^5$ contagens e σ_1 variável (ver tabela 4.2), Os resultados são apresentados na Tabela 4.2 e alguns espectros listados na tabela são apresentados na Figura 4.2.

σ_1 (canais)	$cond(\mathbf{k})$	ARI	$\rho_{49,50}$	Fig.4.2
0.1	1.0	1.0	$-4\,10^{-22}$	-
0.5	1.7	1.3	-0.2704	G1
0.7	5.6	2.9	-0.6895	-
0.9	27.1	10.2	-0.9022	G2
1.0	69.2	22.7	-0.9430	G3
1.1	194.8	57.0	-0.9649	G4
1.2	604.2	144.5	-0.9773	G5
1.3	2066.4	169.6	-0.9846	G6
1.4	7793.9	228.1	-0.9894	-

Tabela 4.2: Resultados do MQ para diferentes valores de σ_1

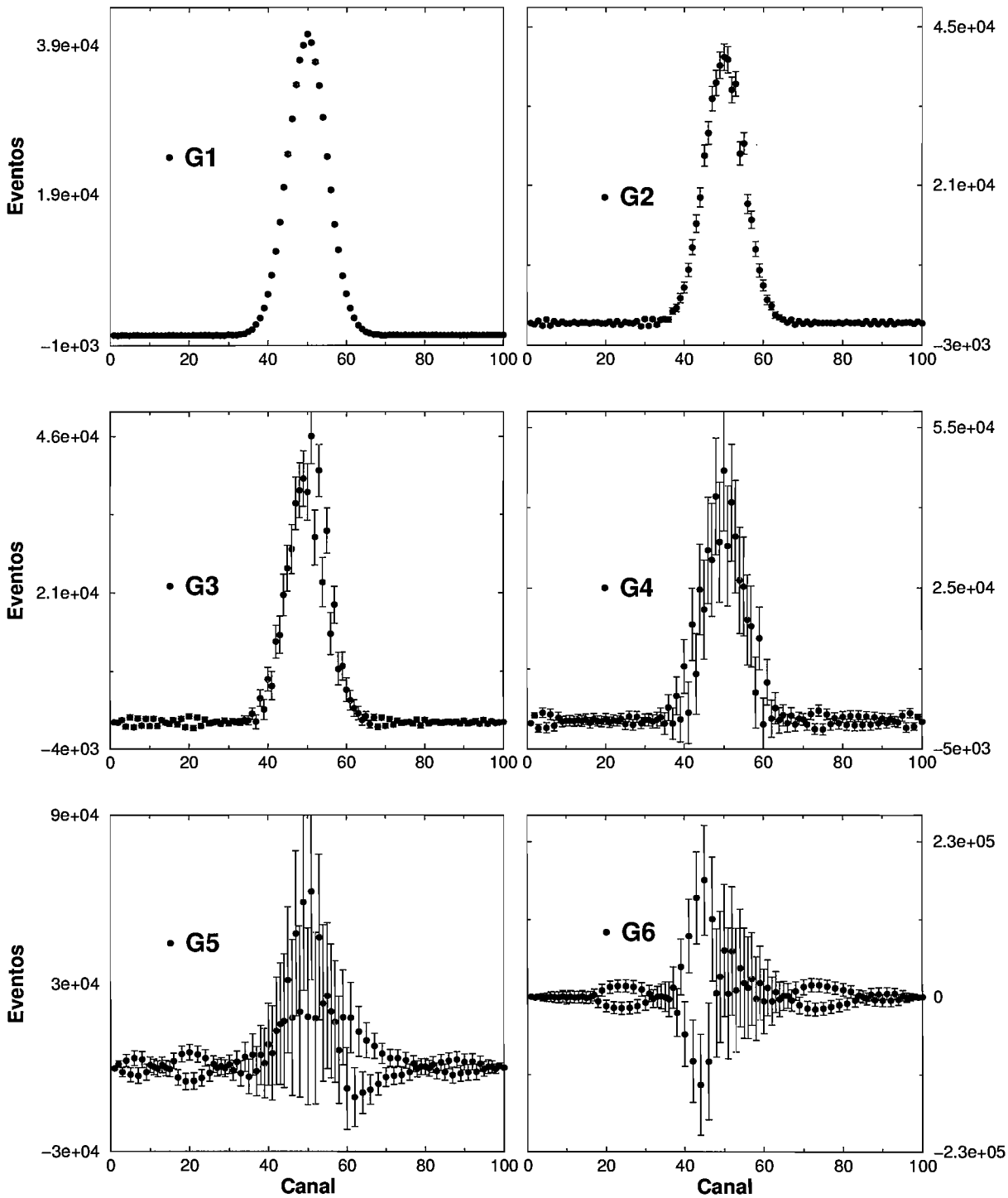


Figura 4.2: Espectros obtidos por MQ para diferentes valores de σ_1.

Observa-se que as oscilações dependem do valor de $cond(\mathbf{k})$: quanto maior, maior a oscilação. A intensidade da oscilação pode ser quantificada pela Amplificação Relativa de Incertezas (eq. 4.9), e também pela correlação entre pontos vizinhos.

O comportamento oscilatório está diretamente relacionado com a matriz **k** que, por sua vez, é construída de acordo com o problema físico em questão, ou seja, depende do arranjo experimental de medida e também dos fenômenos físicos presentes. Sendo assim, dado um experimento, a matriz **k** está definida e se houverem oscilações na solução do problema inverso, existem, dois caminhos que são discutidos em detalhe no presente trabalho:

a) Conviver com as oscilações .

b) Aplicar métodos de regularização e compactação.

4.2 Compactação

Com o propósito de diminuir o comportamento oscilatório, as correlações entre pontos vizinhos e a amplificação das incertezas em problemas inversos, no presente trabalho, é proposto o procedimento de compactação associado ao MQ.

Os dados experimentais representados por espectros multicanais (**d**), evidentemente, ocupam uma certa região, ou seja, um certo número de canais (N), que depende do fenômeno físico a ser estudado, do equipamento de aquisição utilizado no experimento, assim como regulagens (ganho de amplificadores, colimadores, entre outros). A resolução do Problema Inverso consiste em estimar uma distribuição **m** a partir do conhecimento dos dados experimentais **d**. Em geral o espectro **m** tem o mesmo número de canais que os dados experimentais medidos (N). O método proposto permite que **m** tenha um número menor de canais (n$<$ N), para isto basta que a matriz **k** tenha dimensão $N \times n$. O procedimento de obtenção do espectro **m** com um número de canais menor que os dados medidos é denominado de compactação. Apesar de ser um procedimento simples, pode-se observar, através dos casos a seguir, que tem se mostrado eficiente na redução das oscilações.

Em um caso extremo, podemos supor a compactação de um espectro de 100 canais para um espectro $\mathbf{m}$ de um só canal, neste caso, não será possível observar nenhuma estrutura em $\mathbf{m}$, ou melhor, ocorreu grande perda de informação. Obviamente, deve haver um limite para a compactação. O processo de compactação pode provocar distorções ou modificações no espectro compactado, o que é verificado pelas simulações descritas a seguir.

Vamos considerar novamente o caso de um espectro simulado ($\mathbf{d}_S$) resultante da convolução de uma gaussiana ($\mathbf{m}_S$) com um núcleo também gaussiano (equações 4.4, 4.5 e 4.6). O espectro estimado pelo procedimento de MQ associado ao procedimento de compactação será representado nesta seção por $\mathbf{m}$.

Uma maneira de verificar a distorção causada pelo processo de compactação é realizando um teste de χ^2 da distribuição simulada $\mathbf{m}_S$ com o espectro obtido por MQ-compactação ($\mathbf{m}$).

O χ^2 da distribuição simulada é dado por:

$$\chi_S^2 = (\mathbf{m} - \mathbf{m}_S)^t \, \mathbf{V}_m^{-1} (\mathbf{m} - \mathbf{m}_S) \,, \tag{4.10}$$

e a probabilidade deste χ^2 ser excedido por:

$$P(\chi_S^2) = \int_{\chi_S^2}^{\infty} F_l(\chi_S^2) \, d\chi_S^2 \,, \tag{4.11}$$

onde $F_l(\chi_S^2)$ é a distribuição de chi quadrado para l graus de liberdade.

Vamos considerar como nível de significância a região [0.05 , 0.95]. Ou melhor, estamos considerando que não houve distorção do espectro ($\mathbf{m}$) para os casos onde foram realizadas compactações e as probabilidades $P(\chi_S^2)$ ficaram dentro do nível aceitável.

A seguir (tabela 4.3) são apresentados resultados para o Problema Inverso da convolução de duas gaussianas. Os espectros simulados foram calculados pelas equações 4.4, 4.5 e 4.6 . Aplicou-se o procedimento de MQ junto com a compactação para diferentes

valores de n. Utilizou-se os seguintes valores: fundo constante de 200 contagens, espectros com 100 canais $A_1 = 1$, $\sigma_1 = 1.5$ canal, $A_2 = 10^3$ contagem, $\sigma_2 = 5$ canais. Na tabela é apresentado também o resultado do teste de chi quadrado ($P(\chi^2_A)$) de uma gaussiana ajustada[b] ao espectro $\mathbf{m}$.

n ($n^{\underline{o}}$ de canais)	$cond(\mathbf{k})$	ARI	ρ	$P(\chi^2_A)$	$P(\chi^2_S)$	Fig.4.3
100	$3.2\,10^4$	59	-0.9924	0.54	0.44	G1
80	929	55	-0.9847	0.70	0.48	G2
60	40	8.6	-0.9184	0.89	0.08	G3
50	11.9	2.9	-0.8045	0.62	0.33	G4
30	2.32	0.72	-0.2904	0.41	0.85	G5
20	1.72	0.48	-0.0953	0.07	1.00	G6

Tabela 4.3: Resultados obtidos em função da compactação ($n^{\underline{o}}$ de canais)

Pode-se observar (figura 4.3 e tabela 4.3) que à medida que se aumenta o fator de compactação as oscilações diminuem, assim como o *cond*, *ARI* e ρ. Os casos de G1 até G5 correspondem à região aceitável, ou seja, não ocorreu distorção.

É interessante salientar que em todos os gráficos (G1 a G6) foi possível ajustar gaussianas com $P(\chi^2_A)$ aceitavéis. Entretanto o teste para comparação com o espectro simulado do gráfico G6 apresenta um resultado não aceitável ($P(\chi^2_S) = 1.00$), ou seja, apesar de ser possível ajustar uma gaussiana, não se deve realizar a compactação até 20 canais (um fator 5 de compactação), pois o espectro será deformado, podendo apresentar resultados sem significado físico. Observando os gráficos G1 e G2, em primeiro momento, parece que as gaussianas ajustadas (linha sólida) não correspondem aos respectivos espectros; entretanto os resultados apresentados ($P(\chi^2_A)$) garantem a compatibilidade entre as gaussianas e os respectivos espectros obtidos pela resolução do Problema Inverso. A explicação está

[b] Através de um programa desenvolvido em Matlab que utiliza o método de Gauss-Marquardt

no fato que os espectros obtidos têm pontos altamente correlacionados, que causam o comportamento oscilatório mas as correlações geradas são consideradas nos ajustes. Este é um resultado importante do presente trabalho, onde pode-se concluir que espectros altamente oscilantes inclusive com pontos negativos, podem ser representados por funções suaves decorrentes de ajustes, situação que só é possível se as correlações geradas pela resolução do Problema Inverso forem consideradas.

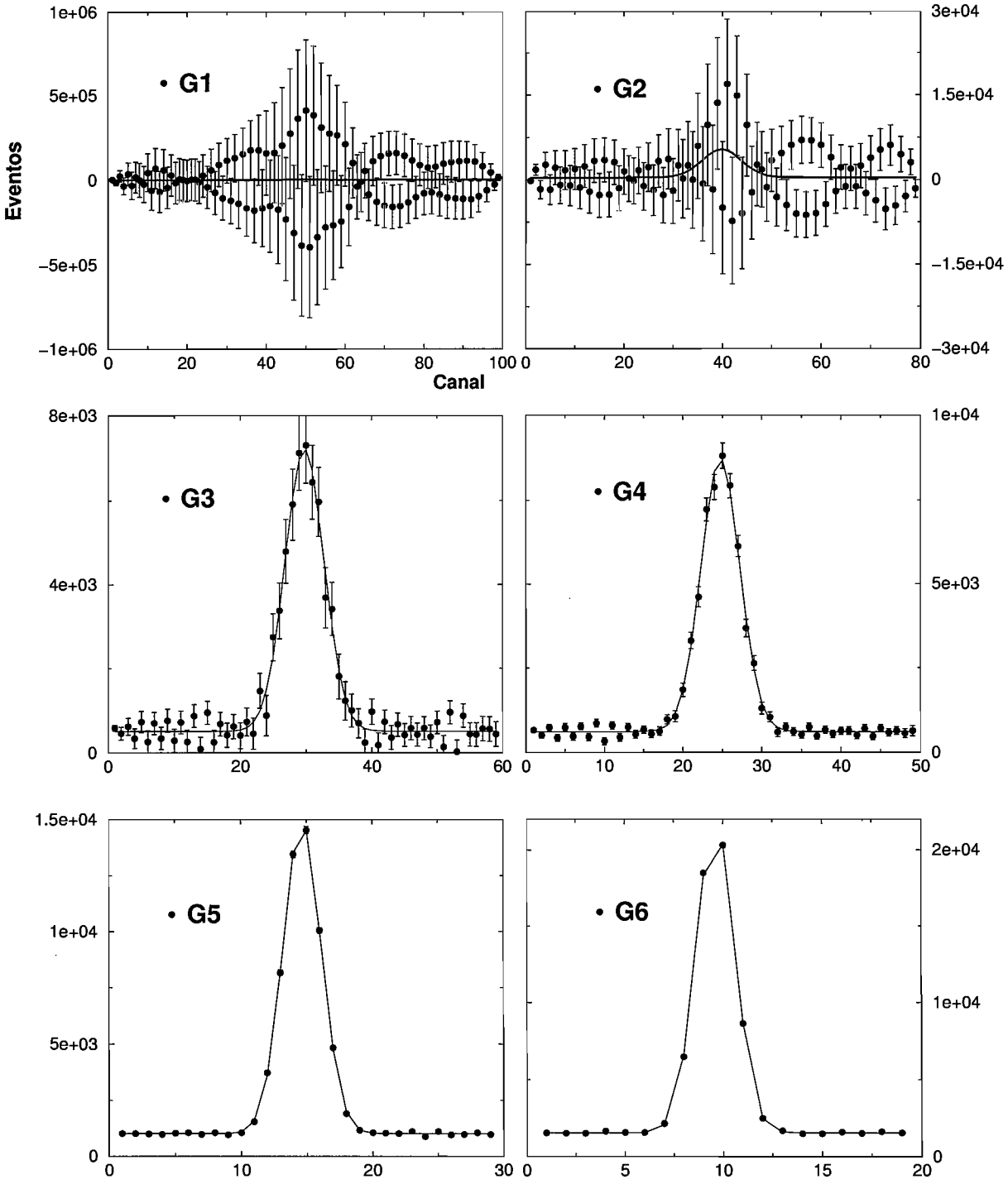


Figura 4.3: Pontos com barras de incertezas: espectros obtidos por MQ para diferentes compactações. Linhas sólidas: gaussianas ajustadas.

4.3 Regularização

O procedimento de regularização proposto (RMV) pode ser aplicado da seguite maneira:

$$\mathbf{m}_R = \mathbf{R}_1 \cdot \mathbf{R}_2 \cdot \mathbf{R}_3 \cdots \mathbf{R}_n \cdot \mathbf{m} \ , \tag{4.12}$$

onde $\mathbf{R}_i$ é a matriz de regularização (eq.3.34) e $\mathbf{m}$ é o espectro obtido pela resolução do Problema Inverso por MQ.

A equação 4.12 corresponde a aplicar o processo de regularização por mínima variância n vezes, procedimento que pode ser necessário, dependendo da situação, para minimizar as oscilações. Entretanto a regularização também pode distorcer o espectro, pois ela substitui $\mathbf{m}$ por outro espectro formado por uma combinação linear dos pontos de $\mathbf{m}$. Vamos considerar um critério análogo ao utilizado no caso da compactação para aceitar um espectro regularizado, ou seja, realizando um teste de χ^2 com a gaussiana $\mathbf{m}_S$ e o espectro regularizado.

Na tabela 4.4 são apresentados os resultados obtidos pelo procedimento de MQ-RMV, a partir de espectros simulados resultantes da convolução de duas gaussianas (equações 4.4, 4.5 e 4.6) com os seguintes parâmetros: fundo constante de 300 contagens, $A_1 = 1$, $\sigma_1 = 1.5$ canais, A_2=variável de acordo com a tabela, $\sigma_2 = 5$ canais. NMR corresponde ao número máximo de regularizações aceitáveis (espectro não distorcido), ou seja, com $P(\chi^2_S)$ dentro do intervalo [0.05,0.95].

A_2	NMR	$P(\chi^2_A)$	$P(\chi^2_S)$	Fig.4.4
10^6	0	0.28	0.62	G1
10^5	1	0.79	0.13	G2
$2\,10^4$	3	0.18	0.91	G3
$8\,10^3$	4	0.89	0.16	G4
$4\,10^3$	5	0.63	0.34	G5
10^3	6	0.33	0.64	G6

Tabela 4.4: Limite de Regularização

Pode-se observar que quanto menor A_2 (ou seja maior a incerteza relativa dos pontos de $\mathbf{d}_S$) maior o número máximo de regularizacoes. É interessante observar que para o caso de $A_2 = 10^6$ contagens não , é possível regularizar o espectro sequer por uma vez ($NMR = 0$).

O gráfico G6 (figura 4.4) apresenta diversas estruturas que não têm significado físico, pois conforme a simulação realizada, a região corresponde ao fundo constante e, como veremos adiante, estas estruturas correspondem a artefatos.

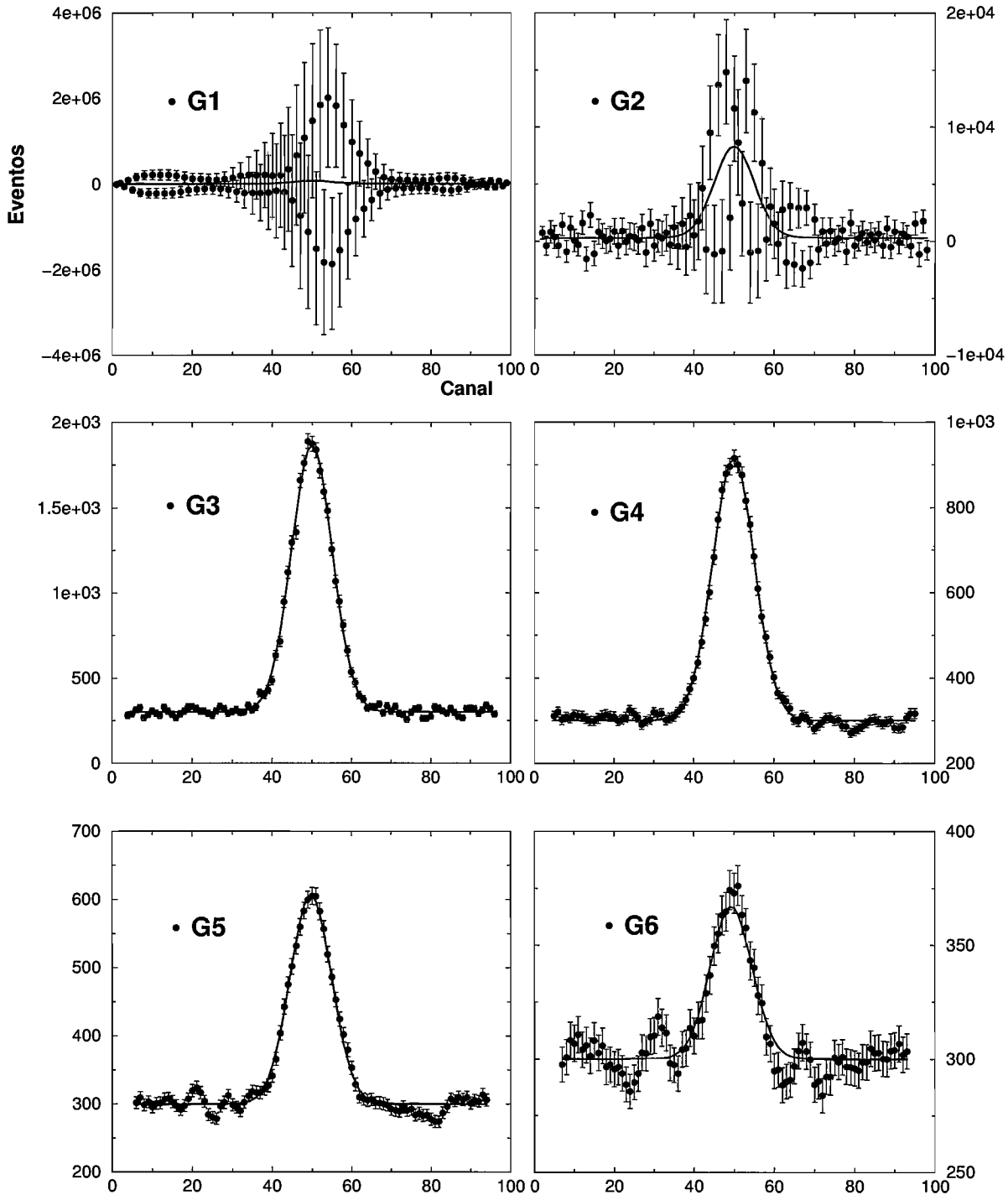


Figura 4.4: Pontos com barras de incertezas: espectros obtidos por MQ-RMV para diferentes limites máximos de regularização. Linha sólida: gaussiana ($\mathbf{m}_G$).

Na tabela 4.5 são apresentados os resultados para diferentes regularizações por mínima variância (NR 1-6), com $A_2 = 10^3$ contagens, $\sigma_1 = 1.5$ canal, $\sigma_2 = 5$ canais, $A_1 = 1$ contagem. Pode-se observar na figura 4.5 que as oscilações dos pontos diminuem á medida em que o número de regularizações aumenta (NR). Todos os gráficos (G1-G6) correspondem a espectros aceitáveis, ou melhor, que não foram distorcidos considerando o critério adotado na seção anterior. Observa-se nos gráficos G5 e G6, a existência de estruturas que correspondem a artefatos.

NR	$cond(\mathbf{k})$	ARI	ρ	$P(\chi^2_S)$	$P(\chi^2_A)$	Fig.4.5
0	$3.2\,10^4$	28.0	-0.9910	0.66	0.39	G1
2	20.4	3.95	-0.4934	0.34	0.70	G2
3	32.1	1.06	0.1694	0.33	0.17	G3
4	60.2	0.64	0.5539	0.31	0.70	G4
5	904.1	0.51	0.7357	0.25	0.75	G5
6	$7.25\,10^3$	0.45	0.8110	0.43	0.59	G6

Tabela 4.5: Resultados para diferentes regularizações

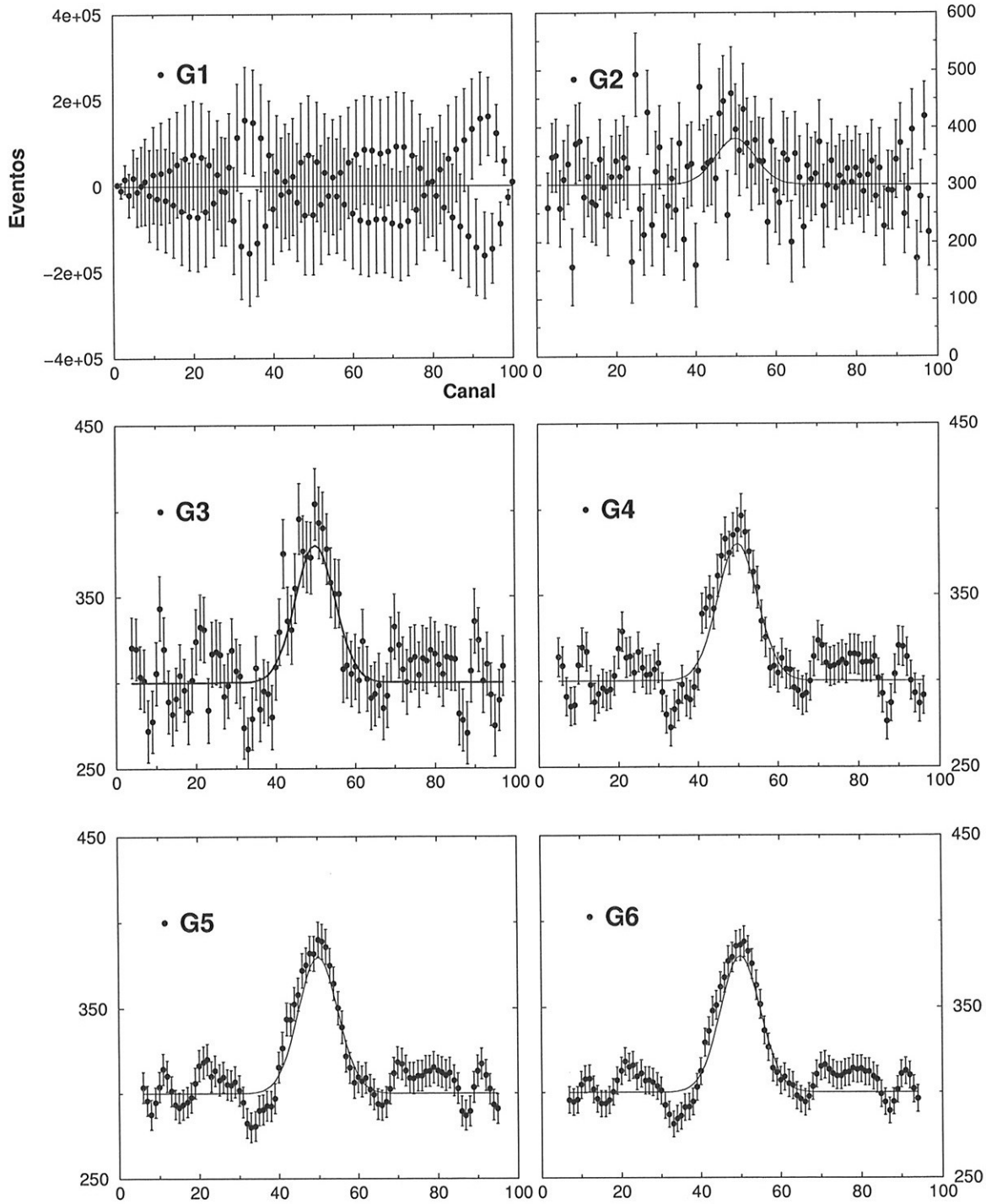


Figura 4.5: Pontos com barras de incertezas: espectros obtidos por MQ para diferentes regularizações. Linha sólida: gaussiana $\mathbf{m}_c$.

4.4 Regularização de Tikhonov

Nesta seção são apresentados testes realizado com o método de regularização de Tikhonov e comparações com o procedimento MQ-RMV. Conforme discutido anteriormente, é um método muito utilizado nas mais diversas áreas, e um dos maiores problemas é a escolha do valor do parâmetro de regularização (μ) e suas implicações. Nas simulações que se seguem, utilizamos a matriz de estabilização que corresponde à operação de primeira derivada (eq. 2.25), denominada nesta secção de **L**1. Foi realizado também um teste com a matriz correspondente à derivada de segunda ordem (eq. 2.24) denominada nesta seção de **L**2.

Podemos considerar como critério de escolha do parâmetro de regularizaçãoo teste de χ^2 do espectro regularizado, ou melhor, escolhe-se μ, tal que,

$$P(\chi^2_{TS}) = \int_{\chi^2_{TS}}^{\infty} F_l(\chi^2_{TS})\, d\chi^2_{TS} \ , \tag{4.13}$$

esteja dentro do intervalo $[0.05, 0.95]$, onde χ^2_{TS} é dado por,

$$\chi^2_{TS} = (\mathbf{m}_{\mu L} - \mathbf{m}_S)^t\, \mathbf{V}^{-1}_{\mathbf{m}_{\mu L}} (\mathbf{m}_{\mu L} - \mathbf{m}_S) \ . \tag{4.14}$$

Lembrando que $\mathbf{m}_{\mu L}$ corresponde ao espectro obtido pelo método de Tikhonov (Seção 2.6) e $\mathbf{V}\mathbf{m}_{\mu L}$ é a sua matriz de covariâncias. $\mathbf{m}_S$ é a gaussiana (eq. 4.6). Conforme discutido anteriormente, o espectro obtido pela regularização de Tikhonov, depende de μ e **L**, consequentemente, o χ^2_{TS} irá depender também destes mesmos parâmetros. Calculou-se χ^2_{TS} para alguns valores de μ para as matrizes de estabilização **L**1 e **L**2 (figura 4.6). Foram utilizados espectros simulados a partir da convolução de duas gaussianas (eqs.4.4, 4.5 e 4.6) com 100 canais, fundo constante de 200 contagens, $A_1 = 1$, $\sigma_1 = 1.5$ canal, $A_2 = 10^3$ contagens, $\sigma_2 = 5$ canais e $x_o = 50$ canais.

Observando o gráfico referente à matriz **L**1 (figura 4.6), podemos afirmar que, neste

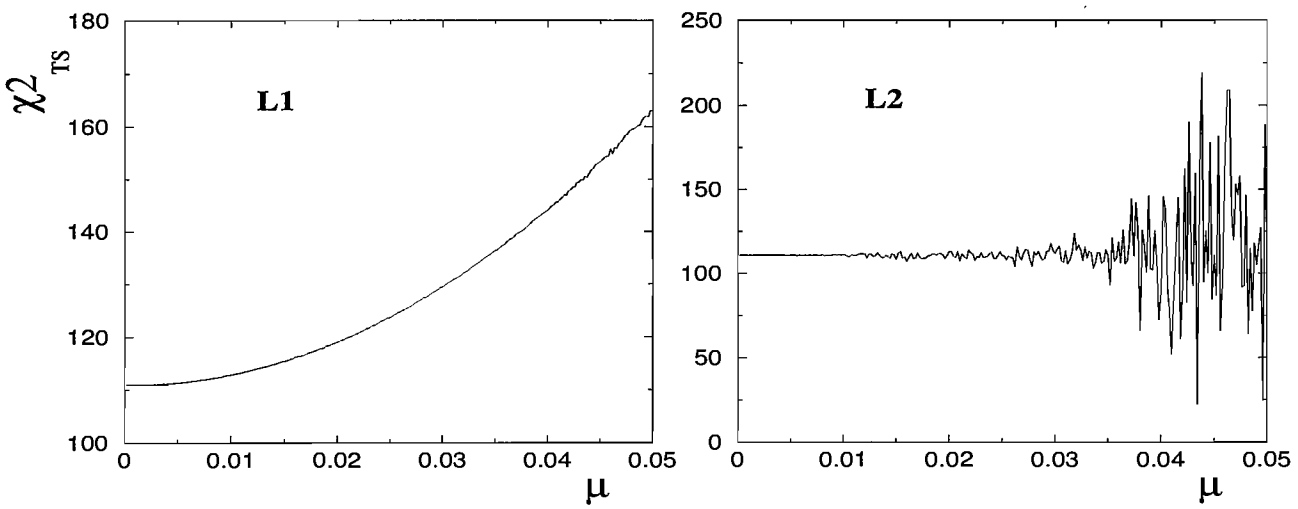


Figura 4.6: Valores de χ^2 para espectros obtidos pela regularização de Tikhonov em função do parâmetro de regularização.

caso, é possível escolher uma faixa contínua de valores de μ tal que χ^2_{TS} tenha valores aceitáveis. No caso da matriz L2 o χ^2_{TS} têm um comportamento oscilante e existem inúmeros valores distintos de μ que resultam em um mesmo valor de χ^2_{TS}, resultando em uma regularização de difícil aplicação, pois uma pequena variação em μ pode resultar em valores muito diferentes no χ^2_{TS}.

Com o objetivo de comparar a regularização de Tikhonov com o MQ-RMV, foram obtidos espectros regularizados a partir de um único espectro simulado ($\mathbf{d}_S$). Utilizou-se a matriz de regularização L1. Os valores do parâmetro de regularização (μ) foram escolhidos para que os valores de χ^2_{TS} fossem iguais aos de χ^2_S para os espectros regularizados por mínima variância com N=5,6 e 7 (número de regularizações) conforme mostra a tabela 4.6.

Pode-se observar na figura 4.7, que os espectros obtidos pela regularização de Tikhonov

MMQ-RMV			Tikhonov (**L**1)		
N	χ^2_S	Fig.4.7	μ	χ^2_{TS}	Fig.4.7
5	101.6	G1	0.0188	101.6	G2
6	112.0	G3	0.0293	112.0	G4
7	842	G5	0.1854	842	G6

Tabela 4.6: Comparação entre MQ-MMV e Tikhonov(**L**1)

são sistematicamente mais baixos, ou melhor, têm uma amplitude menor que as gaussianas simuladas ($\mathbf{m}_S$). Quanto maior o valor de μ, maior é a diferença de amplitude e o espectro tende a ficar mais largo. Comparando-se os pares que resultam em um mesmo χ^2 (G1/G2, G3/G4, G5/G6), nota-se que este efeito não acontece nos espectros obtidos com o MQ-RMV.

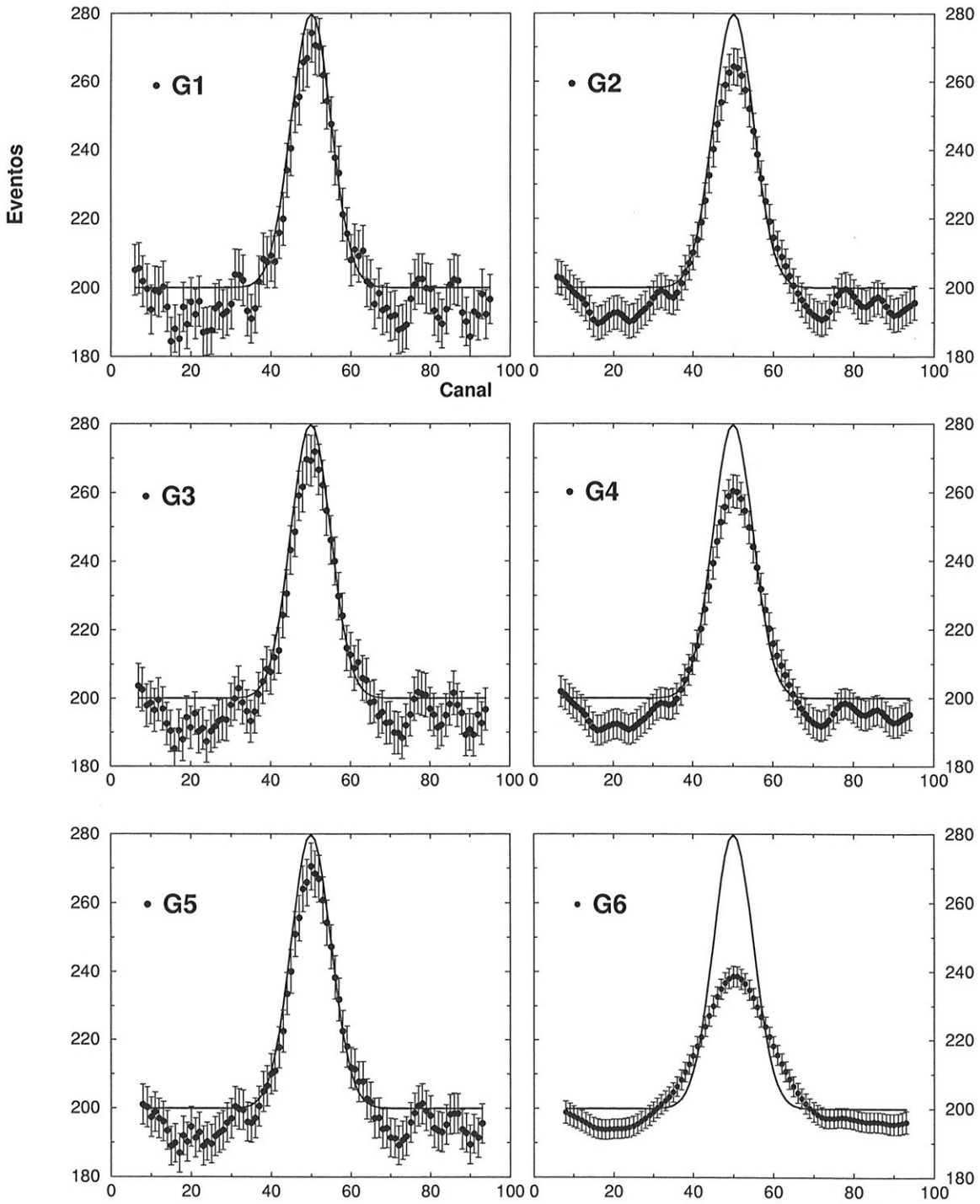


Figura 4.7: Pontos com barras de incertezas: espectros obtidos por MQ-RMV(G1, G3 e G5) e regularização de Tikhonov (G2,G4 e G6). Linha sólida: gaussiana $\mathbf{m}_g$

4.5 Artefatos

Artefatos são estruturas sem significado físico que podem aparecer em: soluções de problemas inversos, em espectros resultantes de suavizações (combinações lineares ou não dos dados) e em dados experimentais em geral. A grande dificuldade está na identificação dos artefatos, pois podem ser confundidos com fenômenos físicos. Esta dificuldade está presente no caso de imagens médicas [6, 51] onde, em um caso extremo, pode-se associar um tumor ou uma ruptura de um osso erroneamente a um artefato. Artefatos estão presentes também em problemas de tomografia sísmica [2] e problemas que envolvem imagens obtidas pela resolução de problemas inversos em geral. Os artefatos podem aparecer também em espectros unidimensionais em geral, conforme mostra o estudo realizado através de simulações numéricas deste Capítulo e também em secções de choque experimentais (Capítulo 5).

Os espectros resultantes de problemas inversos em geral são correlacionados. No caso de correlações negativas entre pontos vizinhos, conforme resultados do presente trabalho, os espectros apresentam oscilações, e nestas situações são aplicados procedimentos de regularização (Tikhonov e RMV) para a atenuação das oscilações, que geram correlações positivas entre os pontos vizinhos do espectro regularizado. Quanto mais regularizado o espectro, maior é o coeficiente de correlação, no caso da RMV (Tabela. 4.5), no caso da regularização de Tikhonov a correlação aumenta com o parâmetro de regularização, conforme mostra a tabela 4.7, calculada para um espectro simulado através da convolução de um núcleo gaussiano com uma gaussiana.

ρ	-0.9911	0.8820	0.9204	0.9551	0.9719	0.9823	0.9906
μ	0.000	0.0030	0.0060	0.0150	0.0300	0.0570	0.1320

Tabela 4.7: Coeficientes de correlação em função de μ

O surgimento de artefatos está ligado à correlações positivas entre pontos vizinhos, geradas em procedimentos de regularização. No Apêndice A é apresentada uma justificativa

para o surgimento de artefatos com base em cálculos de probabilidades para dados com correlações positivas. De fato pôde-se verificar através de simulações numéricas (Tabela 4.8) que em espectros resultantes de Problemas Inversos onde o coeficiente de correlação entre os pontos vizinhos é alto (0.8-1.0), em geral existem artefatos. E um dos méritos do procedimento proposto (MQ-RMV) consiste na possibilidade de identificação dos artefatos conforme os demostraram os resultados das simulações (seção 4.5).

Com o objetivo de obter artefatos resultantes de problemas inversos, aplicou-se a regularização de Tikhonov e o procedimento proposto (MQ-RMV) em alguns casos numéricos, com sinal simulado dado por:

$$\mathbf{d}_S = \mathbf{k}\mathbf{m}_S + \epsilon \ , \tag{4.15}$$

onde ϵ é o vetor de erros dados por uma distribuição de Poisson, e $\mathbf{k}$ é o núcleo gaussiano dado por,

$$k_{ij} = \frac{A_1}{\sqrt{2\pi}\sigma_1} e^{-\frac{(i-j)^2}{2\sigma_1^2}} \ , \tag{4.16}$$

para distribuição m_{Si} utilizou-se em alguns casos uma gaussiana,

$$m_{Si} = \frac{A_2}{\sqrt{2\pi}\sigma_2} e^{-\frac{(i-x_o)^2}{2\sigma_2^2}} \ , \tag{4.17}$$

e em outros casos duas gaussianas (dubleto),

$$m_{Si} = \frac{A_2}{\sqrt{2\pi}\sigma_2} e^{-\frac{(i-x_o)^2}{2\sigma_2^2}} + \frac{A_3}{\sqrt{2\pi}\sigma_3} e^{-\frac{(i-x_{2o})^2}{2\sigma_3^2}} \ . \tag{4.18}$$

As distribuições $\mathbf{m}_S$ foram construídas com os seguites parâmetros: os gráficos G1 e G2 com uma gaussiana, $A_1 = 8\,10^2$, $x_o = 50$. G3 com duas gaussianas, $A_2 = 8\,10^2$,

$A3 = 2\,10^2$ contagens, $x_o = 50$, $x_{2o} = 70$. G4 com $A_2 = 10^3$, $A3 = 2\,10^2$, $x_o = 50$, $x_{2o} = 70$. G5 com $A_2 = 8\,10^2$, $A3 = 2\,10^2$, $x_o = 50$, $x_{2o} = 20$. E G6 com $A_2 = 10^3$, $A3 = 2\,10^2$, $x_o = 50$, $x_{2o} = 20$. Em todos os espectros $\mathbf{d}_S$ utilizou-se um fundo constante de 300 contagens, $\sigma_1 = 1.5$, $\sigma_2 = 5$ canais e para os casos de dubleto $\sigma_3 = 5$ canais (A_2 e $A3$ estão em contagens, x_o e x_{2o} estão em canais) .

A tabela a seguir apresenta os resultados das simulações numéricas .

MMQ-RMV				Tikhonov ($\mathbf{L}1$)			
NR	$P(\chi^2_S)$	ρ	Fig.4.8	μ	$P(\chi^2_{TS})$	ρ	Fig.4.8
5	0.81	0.8091	G1	0.01	0.93	0.9517	G2
6	0.23	0.8105	G3	0.01	0.36	0.9301	G4
6	0.67	0.8104	G5	0.01	0.71	0.9292	G6

Tabela 4.8: Artefatos nos procedimentos de MQ-RMV e Tikhonov($\mathbf{L}1$)

Deve-se lembrar que na tabela 4.8 NR, corresponde ao número de regularizações, $P(\chi^2_S)$ e $P(\chi^2_{TS})$ correspondem aos resultados de testes de χ^2 da gaussiana $\mathbf{m}_S$ com os espectros obtidos respectivamente por MQ-RMV e regularização de Tikhonov; μ é o parâmetro de regularização e ρ corresponde ao coeficiente de correlação de pontos vizinhos no centro do espectro.

Todos os casos (figura 4.8), apesar de serem espectros considerados sem distorção, ou aceitáveis ($P(\chi^2_S)$ e $P(\chi^2_{TS})$ entre 0.05-0.95) apresentam artefatos, e observa-se correlações positivas e altas. Os espectros correspondentes ao procedimento de Tikhonov têm valores de ρ maiores que os de MQ-RMV. O espectro G1 (MQ-RMV), com uma gaussiana, apresenta artefatos á direita e á esquerda do pico central. G2 (Tikhonov) apresenta artefato á direta do pico. Os espectros G3, G4 e G5, simulações com duas gaussianas, têm picos compatíveis (visualmente) com as duas gaussianas e também artefatos. O espectro G6 é um caso interessante, pois, apesar da simulação de duas gaussianas, apresenta apenas

um pico compatível com uma gaussiana, e no lugar da segunda gaussiana não existe estrutura compativel com um pico, entretanto, surgem artefatos em outras posições do espectro.

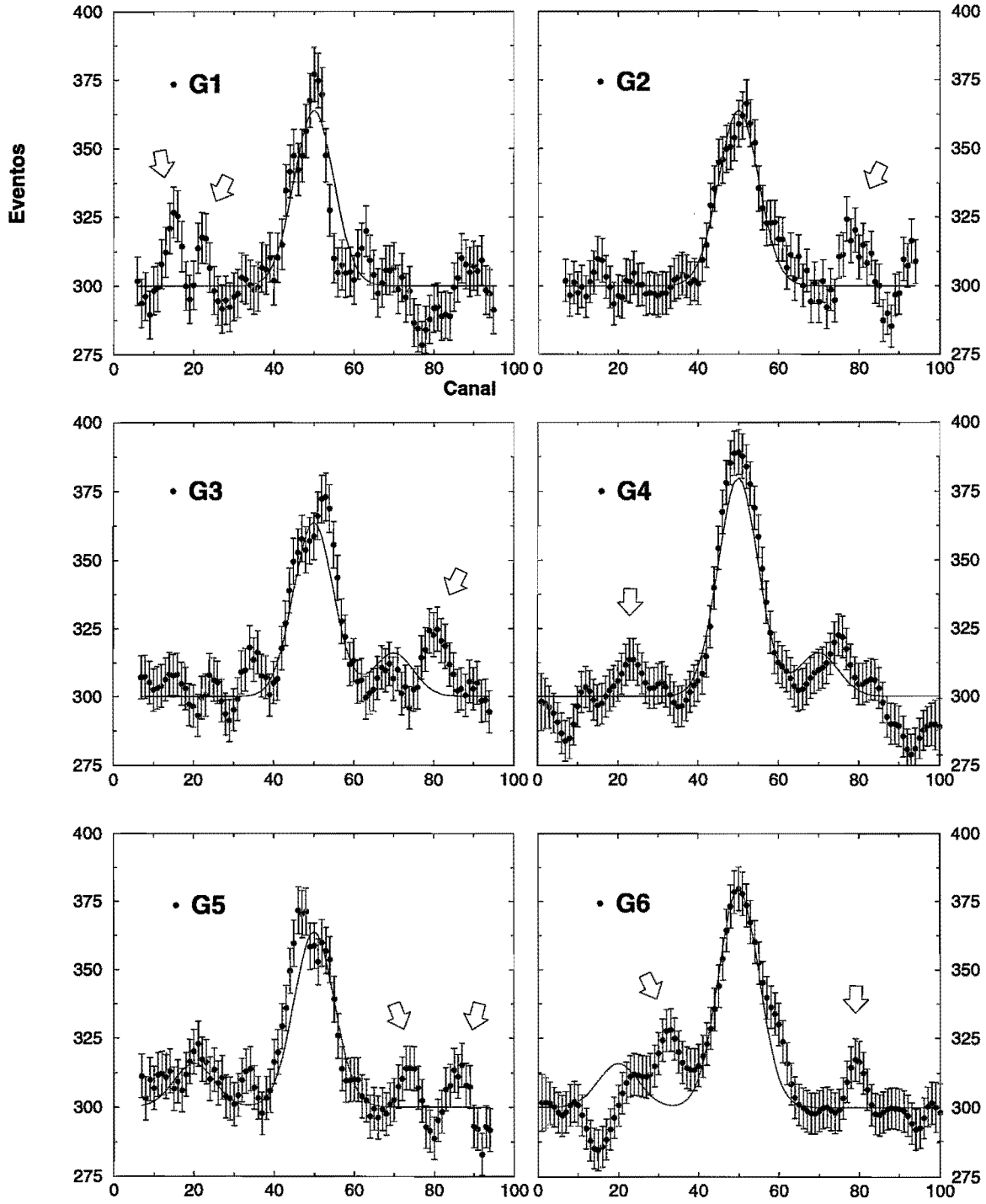


Figura 4.8: Artefatos em espectros obtidos pelas regularizações de Tikhonov (G2,G4 e G6) e Mínima Variância (G1,G3 e G5). As setas indicam os artefatos e a linha sólida

4.6 Discussão

O procedimento de mínimos quadrados para resolução de problemas inversos, apresenta em geral, espectros com grandes oscilações, conforme mostraram as simulações númericas. Na interpretação do presente trabalho, as oscilações são naturais, no sentido de que são decorrentes de correlações negativas entre pontos vizinhos. Se as correlações forem consideradas corretamente, é possível ajustar uma função suave aos pontos mesmo que oscilantes, ou seja, o espectro oscilante pode ser representado por uma função suave. Entretanto existem condições para a realização concreta do ajuste: deve-se saber qual função a ser ajustada (condição necessária) e ter boas estimativas iniciais [c] dos parâmetros para que não ocorram problemas de convergência nem de tempo de computação elevado. Em alguns casos, nos espectros com muita oscilação , é praticamente impossível a escolha da função a ser ajustada, assim como a estimativa inicial dos parâmetros. Sendo assim, a RMV pode ser utilizada para a redução das oscilações (conforme mostraram as simulações numéricas), facilitando a escolha da função a ser ajustada bem como, as "estimativas iniciais". A RMV também pode ser utilizada nos casos onde não se realizam ajustes nos espectros obtidos pela resolução do problema inverso, a informação é retirada diretamente dos espectros. Deve-se lembrar que, de acordo com as simulações numéricas realizadas neste Capítulo, deve-se trabalhar nas condições onde não ocorre a distorção do espectro. O procedimento de compactação, utilizado em condições de não-distorção, assim como a RMV, também mostrou-se muito eficiente em reduzir as oscilações. As grandezas apresentadas, como número de condição (*cond*), amplificação relativa de incertezas (ARI) e coeficiente de correlação (ρ) se mostraram eficientes para a quantificação das oscilações em problemas inversos.

A associação entre artefatos e correlações positivas entre pontos vizinhos pôde ser confirmada pelas simulações numéricas apresentadas (Tabela 4.8 e Figura 4.8) e justificada pela formulação do cálculo de probabilidades apresentada no Apêndice A. O procedimento

[c] São as estimativas necessárias, utilizadas como *start* no programa de ajuste.

de MQ-RMV mostrou-se eficiente na identificação de artefatos quando se tem um modelo físico[d] para o espectro obtido por este procedimento.

É interessante salientar que foi abordado apenas o problema dos artefatos provenientes do processamento dos dados. Podem ocorrer artefatos com outras origens, como fenômenos físicos não considerados no modelo, interferência, mal funcionamento ou regulagens inadequadas no sistema de aquisição de dados, entre outros.

A metodologia proposta de simulações numéricas para a verificação das distorções em procedimentos de regularização e compactação pode ser aplicada a problemas inversos que envolvem funções diferentes de gaussianas. Nos estudos de secções de choque para reações fotonucleares e radiação de aniquilação elétron-pósitron em alumínio, apresentados nos capítulos seguintes, utilizaram-se procedimentos análogos ao deste capítulo, onde as funções envolvidas correspondem à soma de gaussianas e parábolas, assim como lorentzianas.

[d] função a ser ajustada no espectro obtido pela resolução do problema inverso

Capítulo 5

Estudo da secção de choque $^{34}S\,(\gamma, xn)$

5.1 Introdução

Secções de choque de reações fotonucleares são importantes [52] para os estudos de modelos físicos como também para aplicações :

- Física e tecnologia de reatores de fissão e fusão.
- Análises de elementos por radiação induzida.
- Produção de radioisótopos para uso científico, industrial ou médico.

Existe na literatura uma grande quantidade de secções de choque fotonucleares medidas por diferentes técnicas experimentais. As primeiras medidas utilizaram fótons de *bremsstrahlung* produzidos através elétrons provenientes aceleradores. Neste caso, como veremos a seguir, a análise dos dados envolve a resolução do problema inverso e, consequentemente as dificuldades (oscilações, artefatos, distorções) estão presentes.

É interessante ressaltar que existe um grande número de secções de choque analisadas pela resolução de problemas inversos e constam na compilação de dados nucleares da

IAEA[a] [52, 53].

Os métodos de resolução do Problema Inverso para a determinação experimental de secções de choque fotonucleares mais utilizados são :

- Método de Penfold-Leiss [54] que basicamente realiza uma combinação linear da solução por inversão direta.
- Método de Cook [55] que utiliza uma condição de suavização para a segunda derivada da solução (corresponde a matriz de estabilização de Phillips-Cap. 4)

Os dados experimentais são relacionados da seguinte maneira:

$$Y(E_{el}) = \int_{E_{limiar}}^{E_{el}} \sigma(E_\gamma) B(E_\gamma, E_{el}) dE_\gamma \ , \tag{5.1}$$

onde E_{el} é a energia dos elétrons do feixe, $Y(E_{el})$ é o *yield* da reaçãoque é a taxa de produção da reação detetada, por exemplo, para reação (γ, xn) pode ser o número de nêutrons detetados em função de E_{el}. E_γ é a energia dos fótons produzidos por *bremsstrahlung* em um alvo, $\sigma(E_\gamma)$ é a secção de choque, e $B(E_\gamma, E_{el})$ é a distribuição de energia dos fótons ou distribuição de *bremsstrahlung*. Deseja-se portanto, obter a secção de choque $(\sigma(E_\gamma))$ para uma reação de interesse (γ, xn), a partir dos dados experimentais e da distribuição de *bremsstrahlung*. Pode-se notar que a equação do *yield* (eq. 5.1) é uma equação integral de Fredholm de primeiro tipo (eq. 2.1), tratando-se portanto de um Problema Inverso.

A equação 5.1 pode ser escrita na forma discreta,

$$\mathbf{Y} = \mathbf{B}\sigma \ . \tag{5.2}$$

[a] Agencia Internacional de Energia Atômica-Viena

O objetivo neste capítulo é a obtenção da secção de choque $^{34}S\,(\gamma, xn)$. O *yield* (dados experimentais) foi fornecido pelo prof. V.V. Varlamov[b], de um experimento que utiliza radiação de *bremsstrahlung* produzidos por um Bétatron [56].

Para a obtenção da secção de choque ($\sigma(E_\gamma)$), utilizou-se o procedimento proposto no presente trabalho MMQ-RMV (Cap. 3) associado com o procedimento de compactação (Secção 4.2). Parte deste estudo, foi apresentado também em trabalho recente [7].

5.2 Simulações

É interessante lembrar que tanto a RMV quanto a compactação podem apresentar resultados com distorções, conforme mostraram as simulações realizadas (Capítulo 4). As distorções dependem do fator de compactação, do número de regularizações, das incertezas dos dados experimentais e também das funções envolvidas, que são, no caso em particular: a distribuição de *bremsstrahlung*, o *yield* e a secção de choque de interesse. No Capítulo 4, para espectros simulados a partir da convolução de gaussianas, foram determinadas as condições para que os espectros não fossem distorcidos. O caso agora é diferente, pois as funções envolvidas são bastante distintas de gaussianas, assim como o número de pontos experimentais.

As condições de não-distorção foram novamente obtidas para o caso específico através de simulações numéricas e, finalmente os dados experimentais foram analizados pelo MQ-RMV nas condições de não-distorção obtidas pelas simulações.

Inicialmente, construiu-se a secção de choque simulada ($\sigma_S(E_\gamma)$) e considerou-se uma distribuição de *bremsstrahlung* $B(E_\gamma, E_{el})$, para a simulação do *yield*, que é dado pela equação,

$$\mathbf{Y}_S = \mathbf{B}\,\sigma_S + \epsilon\ , \tag{5.3}$$

[b] autor de [52, 53]

explicitanto melhor os elementos das matrizes,

$$\begin{bmatrix} Y(E_{el1}) \\ Y(E_{el2}) \\ \vdots \\ Y(E_{elN}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B(E_{el1},E_{\gamma 1}) & B(E_{el1},E_{\gamma 2}) & \cdots & B(E_{el1},E_{\gamma m}) \\ B(E_{el2},E_{\gamma 1}) & B(E_{el2},E_{\gamma 2}) & \cdots & B(E_{el2},E_{\gamma m}) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ B(E_{elN},E_{\gamma 1}) & B(E_{elN},E_{\gamma 2}) & \cdots & B(E_{elN},E_{\gamma m}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_S(E_{\gamma 1}) \\ \sigma_S(E_{\gamma 2}) \\ \vdots \\ \sigma_S(E_{\gamma m}) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \vdots \\ \epsilon_N \end{bmatrix} \tag{5.4}$$

$E_{el\,i}$ é a energia do elétron correspondente ao canal i do espectro de *yield*, $E_{\gamma\,i}$ é a energia do fóton correspondente ao canal i do espectro de secção de choque, ϵ_i é o erro regido por uma distribuição gaussiana.

A distribuição de *bremsstrahlung* é dada pela distribuição de Schiff [57],

$$B(E_{el},E_\gamma) = \frac{1}{E_\gamma^2}\left[\left(\frac{E_\gamma^2+(E_{el}+E_\gamma)^2}{E_{el}^2} - \frac{2(E_{el}+E_\gamma)}{3E_{el}}\right)(ln\ m_o + 1 - \tfrac{2}{b}atan\ b)\right.$$
$$\left. + \frac{(E_{el}+E_\gamma)}{E_{el}}\left(\tfrac{2}{b^2}ln\ (1+b^2) + \tfrac{4(2-b^2)}{sb^2}atan\ b - \tfrac{8}{3b^2} + \tfrac{2}{9}\right)\right], \tag{5.5}$$

$$b = \frac{2\,E_{el}(E_{el}-E_\gamma)\,9}{c\ mi\ E_\gamma},\ c = 111,\ mi = 0.511,$$
$$m_o = \left[\left(\frac{mi\ E_{el}}{2E_{el}(E_{el}-E_\gamma)}\right)^2 + \left(\frac{Z^{\frac{1}{3}}}{c}\right)\right]^{-1},$$

e a secção de choque é dada por uma soma de quatro lorentzianas,

$$\sigma_S(E_\gamma) = \sum_{i=1}^{4} \frac{E_\gamma^2\Gamma_i^2 A_i}{E_\gamma^2\Gamma_i^2 + (E_\gamma^2 - E_{o\gamma i}^2)^2}\ . \tag{5.6}$$

Os parâmetros das lorentzianas simuladas foram determinadas da seguinte maneira: inicialmente foi obtida a solução do problema inverso por MQ-RMV utilizando o *yield* experimental, com um fator de compactação de 3 e 4 e a seguir determinou-se a secção de choque preliminarmente para a obtenção dos parâmetros das lorentzianas, que serviram como estimativas iniciais. Em seguida foram calculados *yields* simulados a partir da equação 5.3 com pequenas variações nas estimativas iniciais dos parâmetros, e posteriormente, escolheram-se os parâmetros que implicaram em uma menor diferença entre os *yields* simulado e experimental. Na figura 5.1 é apresentada a distribuição de bremsstrahlung de Schiff, para diferentes energias de elétrons (E_{el}) e a secção de choque simulada.

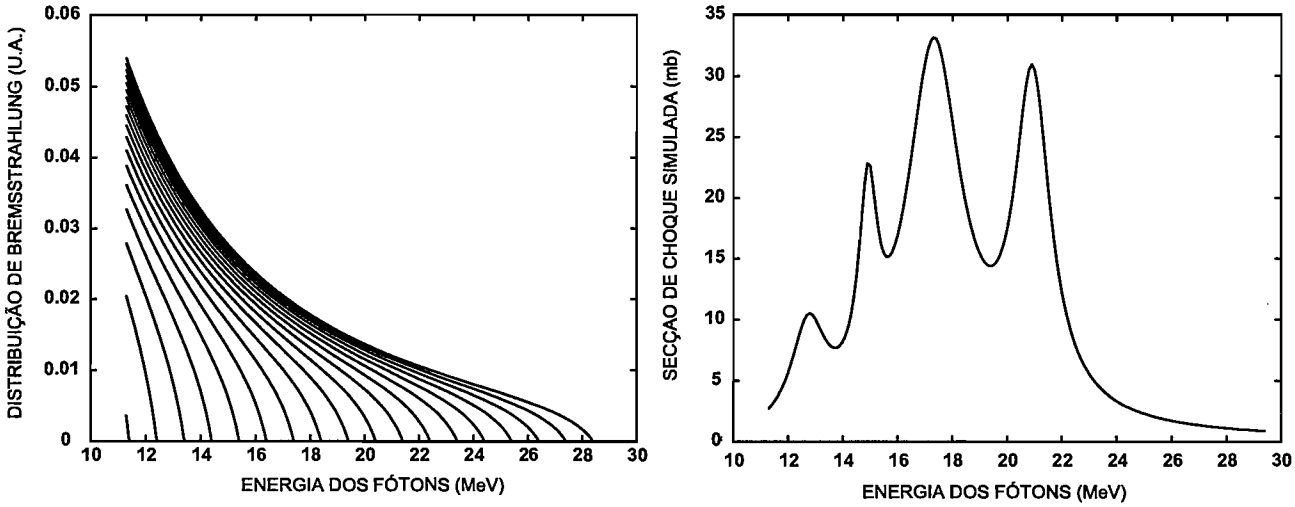


Figura 5.1: Distribuição de *bremsstrahlung* - Secção de choque simulada.

O *yield* simulado (Y_S), assim como o *yield* experimental, tem 182 canais de energia de 11.3 a 29.5 MeV em intervalos de energia constante de 0.1 MeV, apresentado na figura 5.2.

Com a escolha de Y_S e da secção de choque simulada, foram obtidos 25 espectros

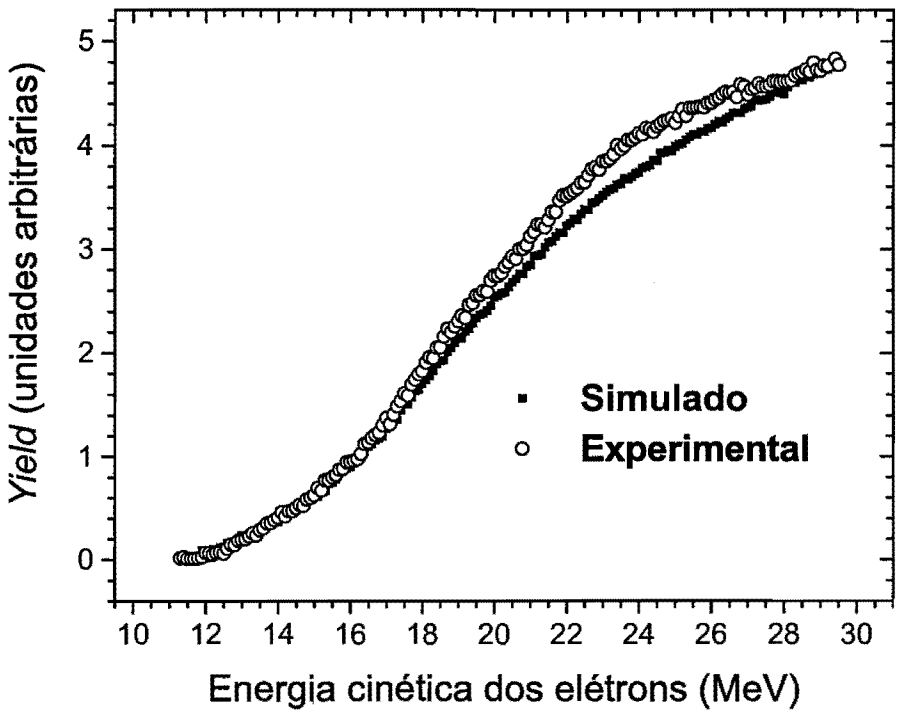


Figura 5.2: *yields* simulado e experimental.

utilizando o MQ-RMV para resolução da equação 5.4, com compactações de 182 para até 60 canais associadas a regularizações de até 4 vezes.

Os espectros resultantes são apresentados na figura 5.3. Os pontos com barras de incertezas correspondem aos espectros obtidos por MQ-RMV e as linhas sólidas correspondem às secções de choque simuladas e ajustadas. Mais adiante alguns destes espectros são apresentados em tamanho maior para uma análise mais detalhada.

Os valores localizados no lado inferior de cada espectro (figura 5.3), correspondem respectivamente a compactação em canais, ao número de regularizações e ao valor de $P(\chi_S^2)$ (resultado do teste de χ^2 da secção de choque simulada com o espectro obtido por MQ-RMV). Lembrando que foi considerado para critério de não-distorção dos espectros (espectros aceitáveis), os casos que tiveram valores de $P(\chi_S^2)$ no intervalo [0.05,0.95]. Por exemplo, no primeiro espectro 182-0 Reg - 22%, corresponde a compactação para 182

canais, zero regularizações e 22% de $P(\chi_S^2)$.

Para a direita do primeiro espectro, aumentam o número de regularizações e para baixo, aumenta o fator de compactação. Observando a figura 5.3, nota-se que o espectro 182-0 Reg. (sem regularização e sem compactação) apresenta grandes oscilações, e se forem realizadas apenas as regularizações (verificar a primeira linha da figura) as oscilações persistem, dificultando a visualização das lorentzianas. O mesmo acontece se for realizado apenas a compactação (primeira coluna). Os espectros localizados no canto inferior direito da figura, com maior número de regularizações associados a compactações maiores, apresentam menores oscilações.

É interessante ressaltar que foram realizados ajustes de lorentzianas a todos os espectros, os resultados não foram apresentados mas todos os ajustes foram aceitáveis ($P(\chi_A^2)$ dentro de [0.05,0.95]). Entretanto, mesmo sendo possível ajustar as lorentzianas, alguns espectros devem ser descartados, pois correspondem a casos de distorção ($P(\chi_S^2)$) fora do intervalo [0.05,0.95].), são os espectros 150-3Reg., 150-4Reg., 120-4Reg., 90-3Reg., 90-4Reg., 60-1 a 4Reg. .

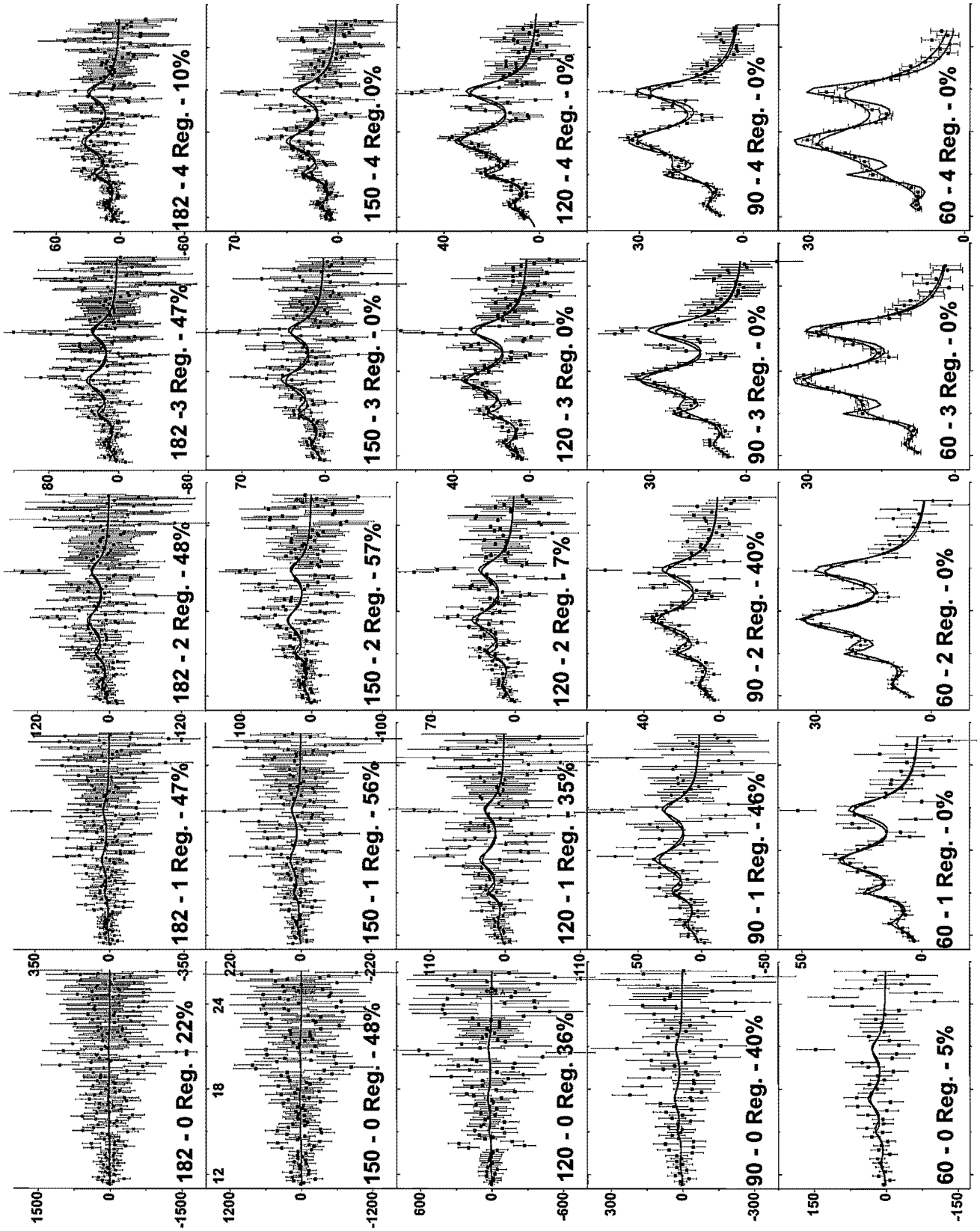


Figura 5.3: Secções de choque obtidas por MQ-RMV através do *yield* simulado, em função de regularizações e compactações.

Vamos analizar em especial, quatro espectros (figura 5.4) reapresentados em tamanho maior.

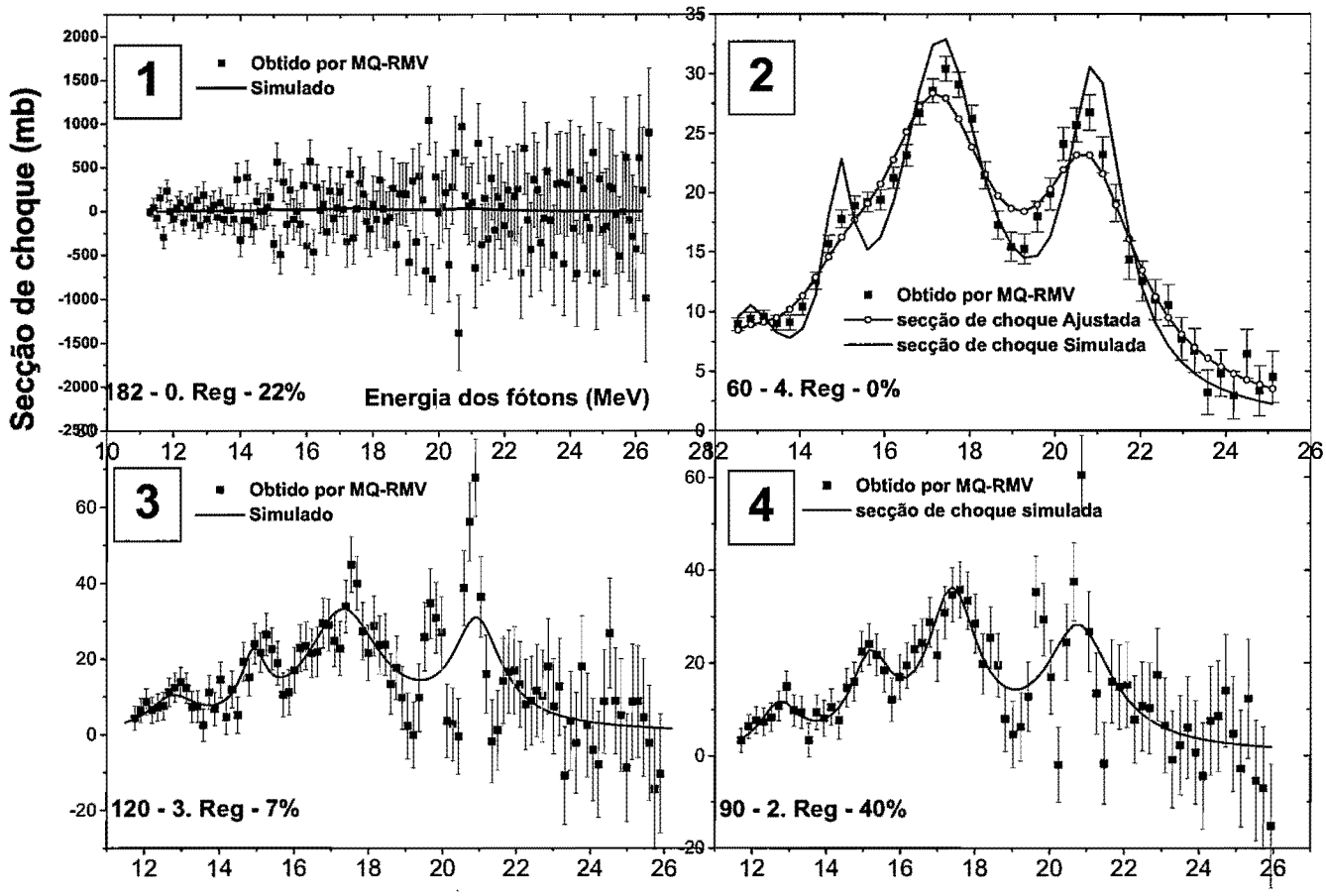


Figura 5.4: secções de choque obtidos através do *yield* simulado por MQ-RMV.

O gráfico 1 corresponde ao espectro sem compactação e sem regularização, conforme dito anteriormente, com grandes oscilações. Nota-se que impossível associar visualmente uma secção de choque (representada por quatro lorentzianas) ao espectro. O gráfico 2 corresponde ao um caso extremo com compactação de 182 para 60 canais (fator 3) e quatro regularizações. Este espectro com variâncias relativamente pequenas (comparado

com o grafico 1), praticamente não apresenta oscilações, entretanto apresenta distorções, basta comparar o espectro com a secção de choque simulada. Observando que os picos ficaram mais largos e com amplitudes menores. Pode-se verificar também, a distorção através da comparação entre a secção de choque ajustada (que representa o espectro) e a secção de choque simulada. O espectro obtido não é aceitavel (distorcido) pois o valor de $P(\chi^2_S)$=0.

Os gráficos 3 e 4, respectivamente, com compactação para 120 canais e 3 regularizações e compactação para 90 canais com 2 regularizações, correspondem aos espectros com as menores oscilações e sem distorção (aceitáveis) ($P(\chi^2_S)$ entre [0.05,0.95]).

Pode-se então, finalmente concluir destas simulações que o *yield* experimental deve ser analizado com compactação para 120 canais e 3 regularizações ou com compactação para 90 canais com 2 regularizações.

5.2.1 Artefatos

O surgimento de artefatos tem sido um problema na determinação de secções de choque fotonucleares através da resolução de problemas inversos, pois os artefatos podem ser confundidos com ressonâncias. A seguir (figura 5.5) apresenta dois casos de artefatos para espectros simulados obtidos por MQ-RMV, onde utilizou-se uma compactação de 182 para 110 canais e 4 regularizações.

A figura 5.6 apresenta duas secções de choque obtidas pela resolução de problemas inversos, que estão no atlas de secções de choque da IAEA [53], da esquerda para a direita tem-se as secções de choque relativas repectivamente as reações: $^{52}Cr\ (\gamma, p)$+$^{52}Cr\ (\gamma, n$+$p)$ e $^{208}\,Pb(\gamma, xn)$. Pode-se observar, nos dois espectros um grande número de picos, alguns destes, provavelmente são artefatos gerados por regularizações.

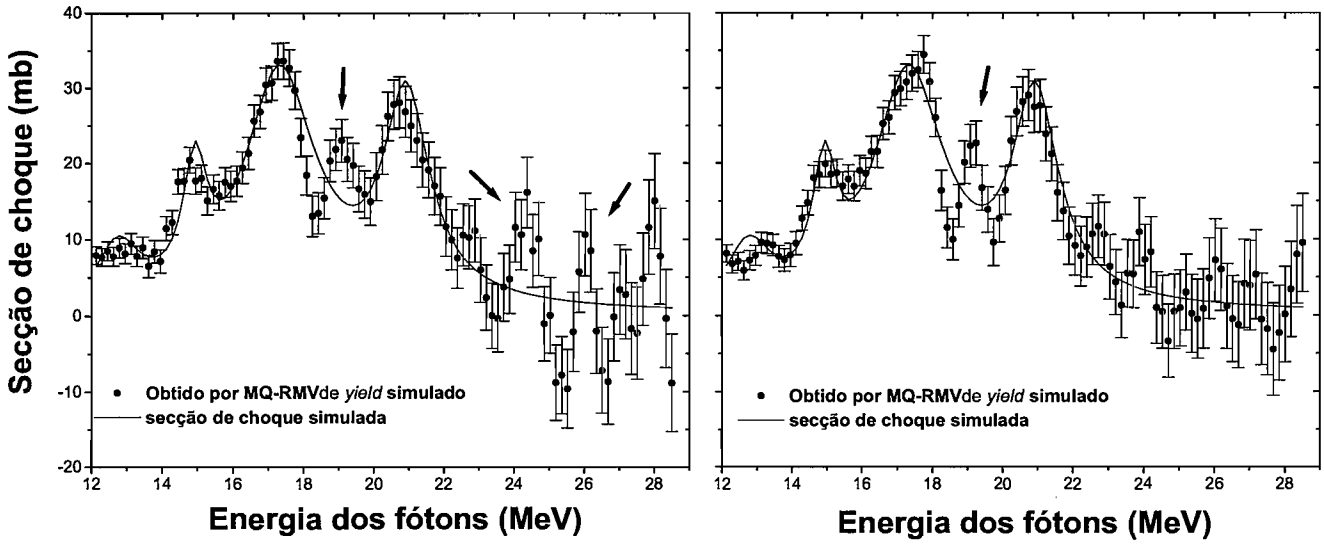


Figura 5.5: Artefatos em secções de choque obtidas por MQ-RMV através de *yields* simulados (as setas indicam os artefatos).

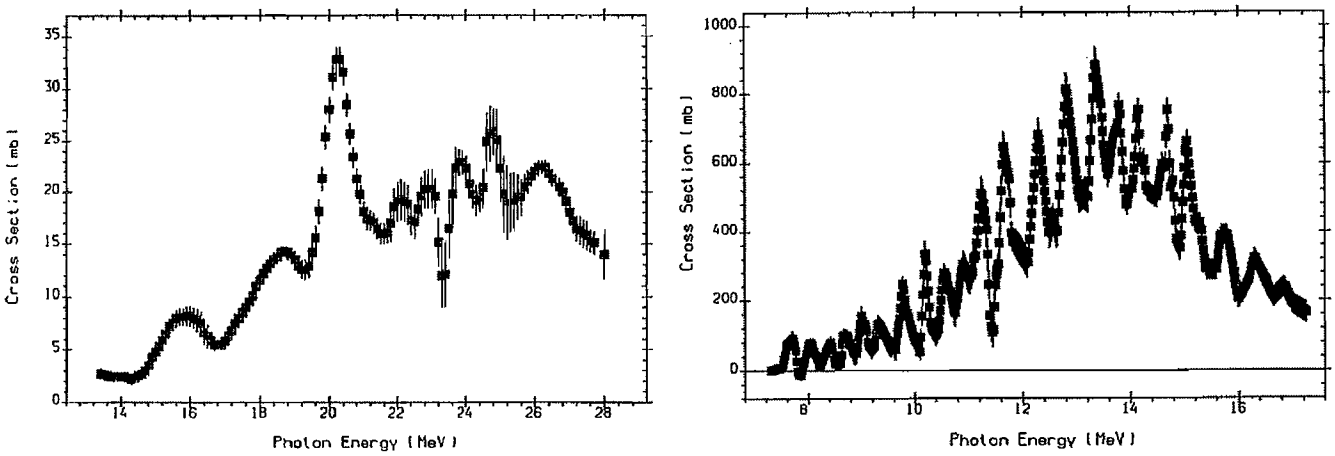


Figura 5.6: Possíveis artefatos em secções de choque experimentais.

5.3 Análise dos dados experimentais

Aplicou-se o procedimento de MQ-RMV para o *yield* experimental, utilizando a distribuição de *bremsstrahlung* de Schiff. A figura 5.7 apresenta o espectro obtido sem compactação e regularização (182 - 0 Reg.) e conforme o esperado, apresenta grandes oscilações. A figura apresenta também o espectro obtido com duas regularizações e compactação para 90 canais, que, de acordo com as simulações correspondem às condições de não distorção.

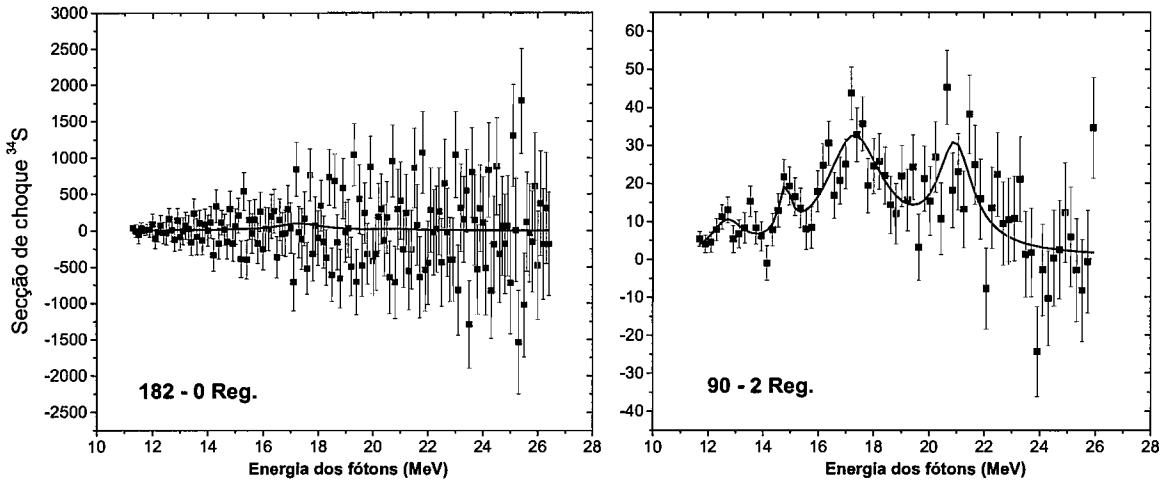


Figura 5.7: Secções de choque ^{34}S obtidos por MQ-RMV.

Foi possível realizar um ajuste da função secção de choque considerada (4 lorentzianas), com um resultado aceitável ($P(\chi^2_S)$=9%), os parâmetros resultantes (eq. 5.6) são apresentados na tabela 5.1.

O gráfico de cima da figura 5.8 apresenta a secção de choque obtida por Assafiri *et al.* [56] que utiliza o método de Penfold-Leiss [54], e a secção de choque obtida pelo presente trabalho (MQ-RMV). Oberva-se que qualitativamente, os dois resultados são compatíveis, ambos apresentam picos de ressonâncias em energias de 17 e 21 MeV. O gráfico de baixo apresenta a função secção de choque ajustada ao resultado de MQ-RMV e novamente o

i	$A_i(mb)$	$E_{o\gamma i}(MeV)$	$\Gamma_i(MeV)$
1	27.5(2.2)	20.88(7)	1.6(2)
2	31.0(1.7)	17.36(7)	2.3(3)
3	8.9(2.4)	15.06(8)	1.3(3)
4	7.5(1.3)	12.67(15)	2.0(9)

Tabela 5.1: Parâmetros ajustados na secção de choque ^{34}S

resultado de Assafiri *et al.*.

5.4 Discussão

A redução das oscilações causada pelos procedimentos de compactação e regularização, verificado pelas simulações numéricas para convolução de gaussianas (Cap. 4), também foi confirmada no estudo de secções de choque fotonucleares, tanto nas simulações numéricas quanto na análise da secção de choque do $^{34}S\,(\gamma, xn)$. Para a redução das oscilações, neste caso em particular, foi necessário associar os procedimentos de compactação e regularização. As simulações numéricas apresentaram indicaram a compactação de 182 para 90 canais (fator 2) e duas regularizacoes como condição de não distorção do espectro.

Foi confirmada também a possibilidade de aparecimento de artefatos e distorções na análise de dados de experimentos para o estudo de secções de choque fotonucleares. A secção de choque obtida pelo presente trabalho é qualitativamente compatível com o resultado de Assafiri, apresentando duas ressonâcias em 17 e 21 MeV. O método proposto no presente trabalho, diferentemente da maioria dos procedimentos propostos para resolução de problemas inversos, permite realizar ajustes de funções (no caso em particular lorentzianas) necessários para estimar grandezas físicas, como no caso de secções de choque fotonucleares, posições, amplitudes e larguras de ressonâncias assim como secções de choque integradas. A secção de choque obtida pelo procedimento de MQ-RMV permite

também o teste de qualidade de ajuste, necessário para testes quantitativos de modelos físicos.

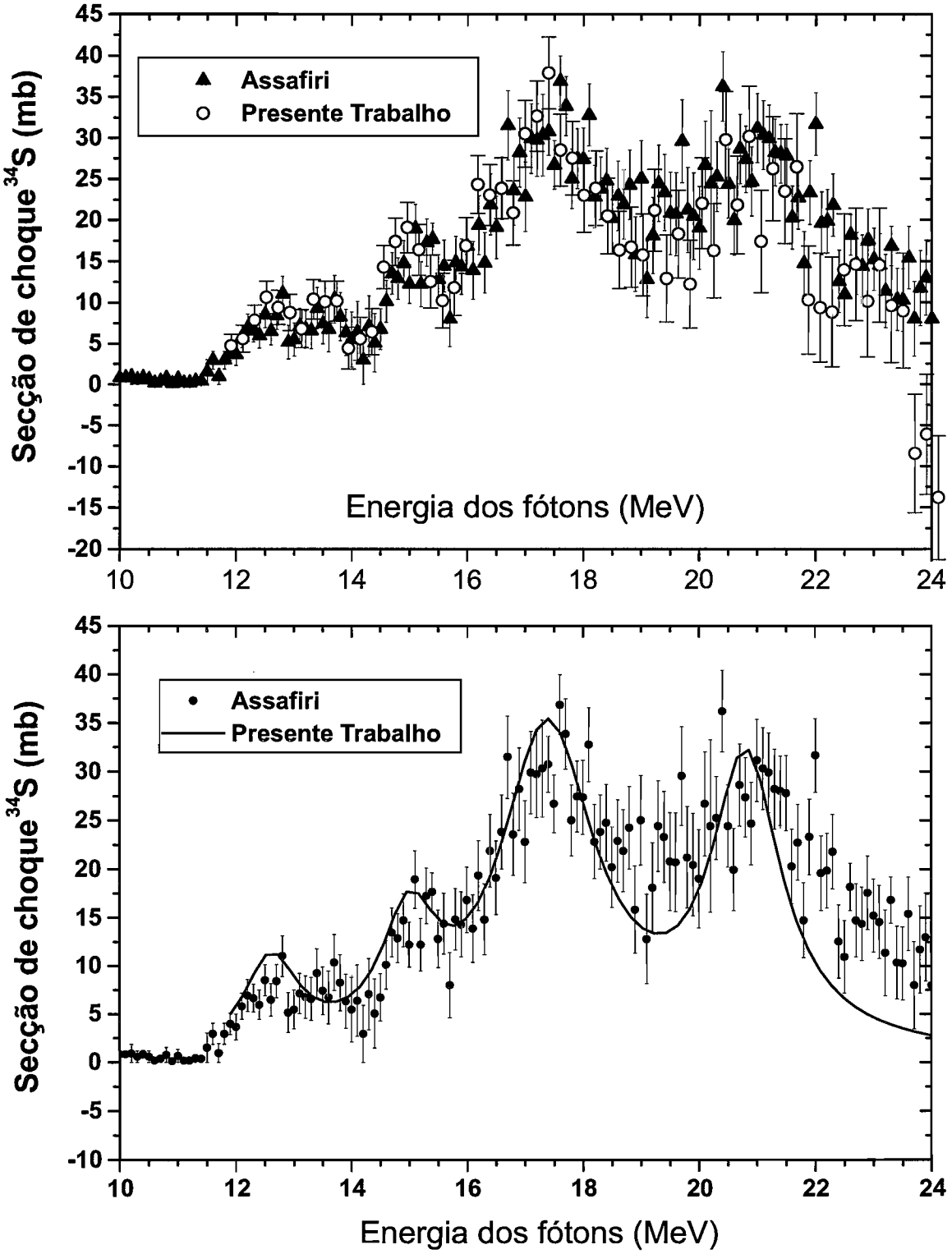


Figura 5.8: Secções de choque $^{34}S\,(\gamma, xn)$ obtidos por MQ-RMV.

Capítulo 6

Radiação de aniquilação $e^- - e^+$

6.1 Introdução

O procedimento proposto para a resolução de problemas inversos foi utilizado no estudo da radiação de aniquilação elétron-pósitron no alumínio. As funções envolvidas, são diferentes das simulações realizadas para gaussianas e do estudo da secção de choque do ^{34}S (Caps. 4 e 5). A análise dos dados necessita um ajuste de funções ao espectro obtido pela resolução do problema inverso, que não é trivial como veremos a seguir. Nesta situação, é imprescindível a matriz de correlações geradas pela resolução do problema inverso. Parte dos resultados desta seção também foram apresentados em [8, 50]. A radiação de aniquilação elétron-pósitron é útil para o estudo eletrônico de materiais [58, 59, 60, 61]. A partir das energias dos fótons de aniquilação detetados, pode-se determinar distribuições de momento de elétrons do caroço e da banda de condução.

6.2 Experimento

Os dados analizados no presente trabalho são parte dos dados experimentais de um experimento realizado no Instituto de Física da USP [58]. O arranjo experimental consistiu

em dois detetores HPGe a 180° separados por 15cm, com eletrônica de coincidência. Utilizou-se um fonte de $10\mu\ Ci$ de ^{22}Na envolvida por dois discos de alumínio com 2mm de espessura cada, suficiente para frear praticamente todos os pósitrons. Para a calibração em energia dos espectros multicanais, utilizou-se uma fonte de ^{192}Ir medida simultaneamente com a fonte de ^{22}Na.

Os pósitrons provenientes da fonte de ^{22}Na aniquilam com elétrons do alumínio, que emite preferencialmente dois fótons a 180° e são detetados pelo sistema de aquisição de dados que registra o número de coincidências detetadas em função da energia. Os fótons detetados não são monoenergéticos, obedecendo a uma certa distribuição que depende da energia dos elétrons do material em estudo. O objetivo deste experimento é a obtenção da distribuição de energia dos elétrons $\sigma(E_{el})$. Entretanto os dados experimentais estão relacionados com $\sigma(E_{el})$ de acordo com a equação integral de Fredholm,

$$D(E_d) = \int R(E_d\,, E_{el})\,\sigma(E_{el})\,dE_{el}\ , \tag{6.1}$$

- E_d é a energia detetada.
- E_{el} é a energia dos elétrons aniquilados no material em estudo.
- $D(E_d)$ é a radiação de aniquilação $e^+ - e^-$, são os dados experimentais.
- $R(E_d\,, E_{el})$ é a função resposta do sistema de deteção, que depende dos detetores e eletrônica associada.
- $\sigma(E_{el})$ é a distribuição de energia dos elétrons do material em estudo (a ser determinada pela resolução do Problema Inverso).

A função resposta para os dados experimentais em estudo é gaussiana, pois foram realizadas anteriormente nos dados experimentais, correções númericas para a eliminação de partes não gaussianas. Sendo assim a equação 6.1, corresponde a uma equação de convolução.

A distribuição de energia dos elétrons de aniquilacao é dada pelo seguinte modelo [58, 61]: a aniquilação nos elétrons (2s e 2p) do caroço é representado por duas gaussianas,

$$G1(DE) = \frac{A_1}{\sqrt{2\pi}\sigma_1} e^{\frac{-DE^2}{2\sigma_1^2}} , \tag{6.2}$$

$$G2(DE) = \frac{A_2}{\sqrt{2\pi}\sigma_2} e^{\frac{-DE^2}{2\sigma_2^2}} , \tag{6.3}$$

onde DE corresponde a diferença de energia em relação a energia central de aniquilação (511 keV). A aniquilação nos elétrons da banda de condução é representada por três parábolas,

$$Pi(DE) = \sum_{i=1}^{3} Ap_i(DE - \alpha_i)(DE + \alpha_i) , \tag{6.4}$$

$$Pi(DE) = 0 \qquad \text{para} \qquad |DE| > \alpha_i$$

onde α_i correspondem aos parâmetros de corte de Fermi. A distribuição de aniquilação é dada pela soma das gaussianas e parábolas,

$$\sigma(DE) = G1(DE) + G2(DE) + P1(DE) + P2(DE) + P3(DE) . \tag{6.5}$$

Em princípio é possível fazer a deconvolução dos dados, pois a função resposta é conhecida. Posteriormente pode-se realizar o ajuste e obter os parâmetros. Como primeira tentativa, foi realizada a deconvolução dos dados experimentais pelo MQ-RMV com zero regularizaçõese como era de se esperar, obteve-se um espectro com grandes oscilações sendo praticamente impossível estimar os valores iniciais dos parâmetros que são necessários para o programa[a] que realiza o ajuste. Posteriormente realizou-se duas regularizações e os valores iniciais dos parâmetros foram determinados empiricamente por comparação com o espectro obtido por MQ-RMV. A seguir a figura 6.1 apresenta a distribuição de

[a] Programa desenvolvido em Matlab

aniquilação elétron-pósitron simulada representada pela soma de duas gaussianas e três parábolas. É interessante salientar que o eixo das ordenadas está na escala logaritimica que ressalta as diferenças , se o gráfico estivesse na escala linear, não seria possível a visualização de todas as funções.

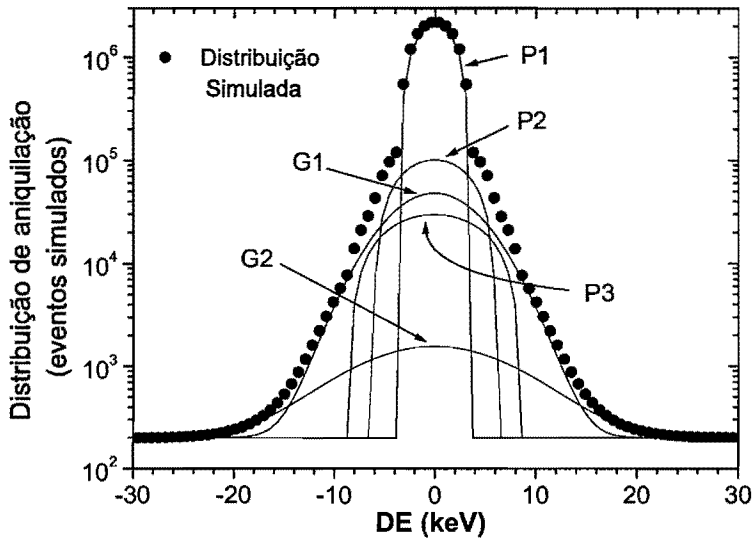


Figura 6.1: Distribuição de aniquilação Simulada.

A figura 6.2 apresenta a radiação de aniquilação simulada (espectro simulado), resultante da convolução da distribuição de aniquilação simulada σ_S (dada pela soma de duas gaussianas e três parábolas simuladas), com a função resposta dada por,

$$R(DE) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_R} e^{\frac{DE^2}{2\sigma_R^2}} , \tag{6.6}$$

acrescentado de um erro gaussiano. σ_R é o desvio padrão da função resposta (relacionado com a resolução dos detetores e com a resolução da eletrônica associada). A figura apresenta também os dados experimentais medidos, pode-se observar uma boa concordância entre os dois espectros.

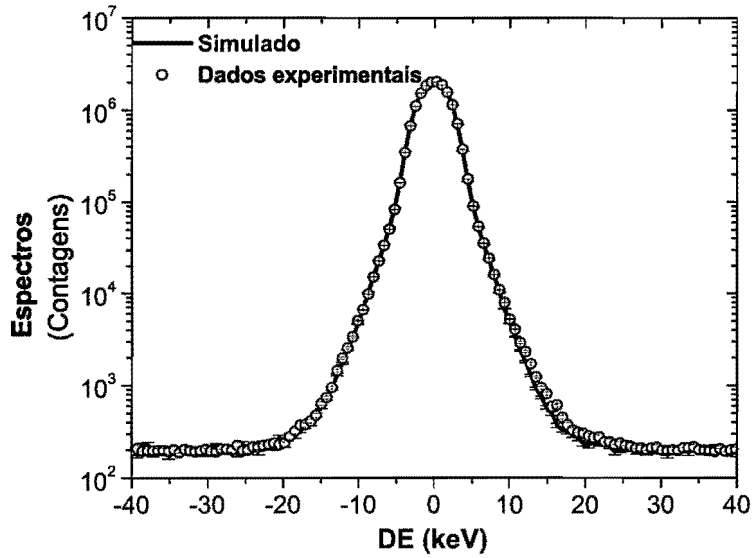


Figura 6.2: Espectros (Simulado e experimental).

A figura 6.3 apresenta as distribuições de aniquilação obtidas pelo procedimento MQ-RMV aplicado ao espectro simulado, apresenta também as funções ajustadas aos espectros. Foram somadas constantes de $5 \cdot 10^5$ no espectro 0 Reg e 200 no espectro 1 Reg., para obter resultados positivos necessários para apresentação na escala logaritimica.

O espectro com zero regularizações apresentou um $\chi^2_S = 200$ (χ^2 da distribuição simulada) para 189 graus de liberdade e $P(\chi^2_S) = 28\%$, ou seja, apesar das oscilações um resultado aceitável. O espectro com uma regularização apresenta uma redução nas oscilações, entretanto o resultado do ajuste foi de $\chi^2_S = 702$ para 187 graus de liberdade e $P(\chi^2) < 10^{-16}$, um resultado não aceitável, ou seja, neste caso ocorre a distroção do espectro. É interessante salientar que as simulações mostraram que para a realização do ajuste são necessárias estimativas iniciais bem próximas (diferença menor que 8%) dos parâmetros simulados, pois caso contrário podem ocorrer problemas de convergência, devido a particularidade da distribuição de aniquilação e das correlações entre pontos.

Os parâmetros resultantes do ajuste do espectro com 0 Reg do espectro simulado foram

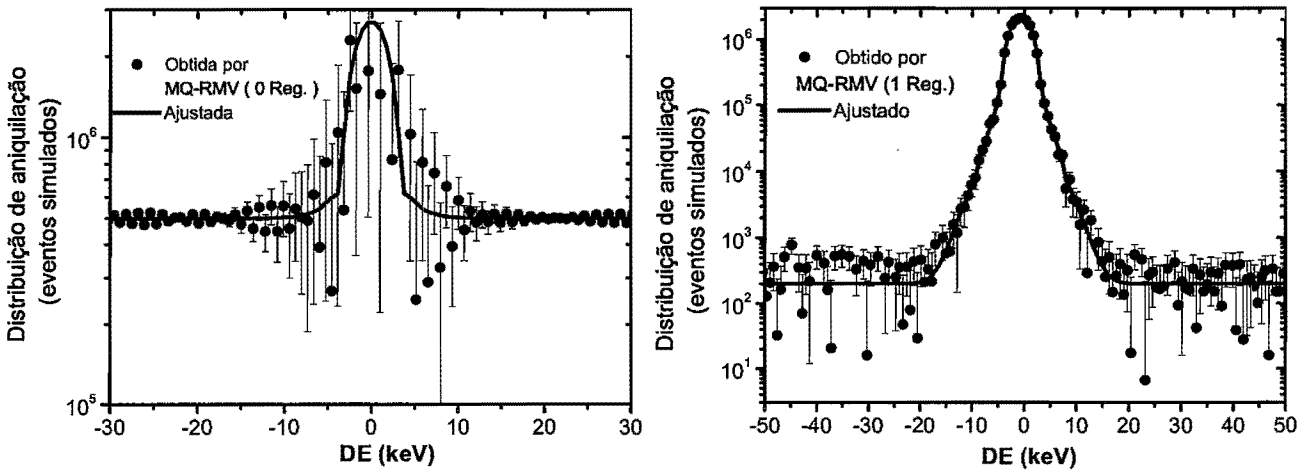


Figura 6.3: Distribuições de aniquilação (0 e 1 Reg.) obtidas por MQ-RMV a partir de espectro simulado.

utilizados como estimativas iniciais para o ajuste da distribuição de aniquilação elétron-pósitron no espectro experimental. A tabela 6.1 apresenta os parâmetros resultantes da aplicação do MQ-RMV e ajustes realizados nos espectros simulado (0 Reg.) e experimental (0 Reg. e 1 Reg.). Apesar das simulações mostrarem que o espectro com uma regularização é distorcido, os resultados apresentados na tabela, para 0 e 1 Reg. (espectro experimental) não apresentam grandes diferenças , a menos da função P3, os resultados são estatisticamente compatíveis. A figura 6.4 apresenta a distribuição de aniquilação para 0 e 1 Reg. obtida através da radiação de aniquilação experimental, pode-se obervar um comportamento análogo à simulação, onde ocorre a redução das oscilações com a regularização. Foram somadas constantes de $2 \cdot 10^6$ e $4 \cdot 10^3$ nos espectros de 0 e 1 Reg. para fins de visualização.

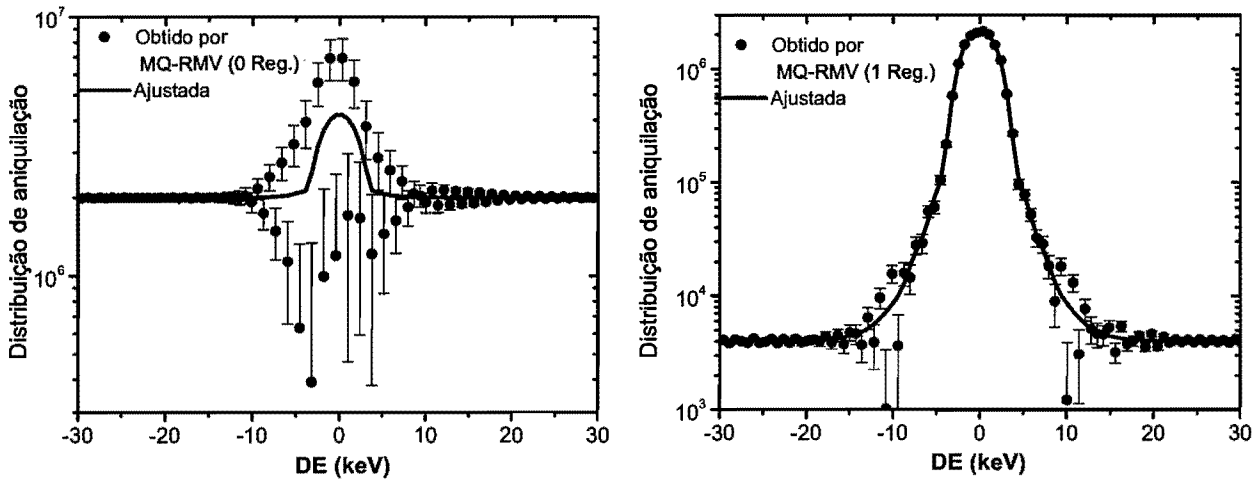


Figura 6.4: Distribuições de aniquilação (0 e 1 Reg.) obtidas por MQ-RMV a partir de espectro de radiação de aniquilação experimental.

Parâmetros	Sim. (0 Reg.)	Experim. (0 Reg.)	Experim. (1 Reg)
A_1 (eventos)	$7.6(1)\,10^5$	$7.7(1)\,10^5$	$7.7(1)\,10^5$
σ_1 (keV)	4.41(4)	4.49(5)	4.47(4)
A_2 (eventos)	$3.0(7)\,10^4$	$3.9(6)\,10^4$	$4.3(7)\,10^4$
σ_1 (keV)	8.0(5)	8.4(3)	8.1(3)
Ap_1 (keV)	$7.9553(84)\,10^4$	$7.9554(87)\,10^4$	$7.9413(70)\,10^4$
α_1 (keV)	3.500(2)	3.482(2)	3.484(1)
Ap_2 (keV)	$1.345(27)\,10^3$	$1.624(31)\,10^3$	$1.642(17)\,10^3$
α_2 (keV)	6.08(2)	5.95(2)	5.94(1)
Ap_3 (keV)	194.4627(5)	194.4253(3)	194.4613(3)
α_3 (keV)	8.5554(4)	8.5392(2)	8.5556(2)

Tabela 6.1: Parâmetros ajustados nas distribuições de aniquilação elétron-pósitron

Com os parâmetros apresentados na tabela 6.1 calculoram-se as áreas de cada função (gaussianas e parábolas) da distribuição de aniquilação. De acordo com o modelo considerado [58, 61], a soma das áreas das parábolas normalizadas pela área total da distribuição de aniquilação, corresponde ao percentual de aniquilação com elétrons da banda de condução, e as áreas das gaussianas correspondem a aniquilação com os elétrons ligados das camadas 2s e 2p. Na tabela 6.2 são apresentados os percentuais de aniquilação e os parâmetros de corte de Fermi em unidades de $10^{-3} m_o c^2$, obtidos pelo presente trabalho. Na tabela 6.1 são apresentados também, resultados de outros autores presentes na literatura.

Aniquilação		
banda de condução	elétrons 2p	elétrons 2s
94.49(1)% [*]	4.70(7)% [*]	0.27(4)% [*]
94.06% [62]	4.81% [62]	1.13 % [62]
Parâmetros de corte de Fermi		
α_1	α_2	α_3
16.7109(5) [*]	11.64(4) [*]	6.816(5) [*]
20 [59]	13 [59]	6.7 [59]

Tabela 6.2: [*] - Resultados do presente trabalho; [62], [59] - Resultados da literatura.

6.3 Discussão

A obtenção das grandezas físicas no estudo da radiação de aniquilação elétron-pósitron exigiu um ajuste não trivial na distribuição obtida pela resolução do problema inverso. O procedimento proposto (MQ-RMV) mostrou-se muito eficiente, pois ele fornece as correlações geradas na obtenção da distribuição de aniquilação, sem as quais seria impossível realizar o ajuste de três parábolas e duas gaussianas centradas no mesmo ponto. O pro-

cedimento de regularização foi muito eficiente em reduzir as oscilações com também em ajudar na obtenção das estimativas iniciais dos parâmetros para a realização do ajuste. Foi possível obter os percentuais de aniquilação, onde conclui-se que a aniquilação ocorre basicamente com os elétrons da banda de condução (95%). Obteve-se também os parâmetros de corte de Fermi.

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
3857
SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO
INSTITUTO DE FÍSICA

Capítulo 7

Conclusões e possíveis desdobramentos futuros

7.1 Conclusões

- A revisão dos métodos existentes mostrou-se importante para o entendimento do Problema Inverso. Onde pôde-se concluir que basicamente todos os procedimentos propostos são desenvolvidos de maneira a reduzir o comportamento oscilatório. Pode-se observar na literatura que os resultados em geral não contém oscilações. O presente trabalho, interpreta as oscilações como naturais, no sentido de poderem ser explicadas pelas correlações negativas entre pontos vizinhos geradas pela resolução do problema inverso.

- O espectro, mesmo que oscilante, pode ser representado por uma função suave, que pode ser ajustada ao espectro oscilante sem maiores problemas, desde que as correlações geradas sejam consideradas nos cálculos. Ou seja, em vez de "olharmos" o espectro resultante podemos "olhar" para a função suave e o mais importante: pode-se obter grandezas físicas a partir de parâmetros da função ajustada.

- Em geral, nos procedimentos para resolução de problemas inversos presentes na literatura, não se observam discussões sobre correlações geradas nem funções ajustadas nos espectros, mesmo porque não seria possível a realização de ajustes sem as correlações geradas.

- O presente trabalho verificou que procedimentos de regularização com o objetivo de reduzir as oscilações podem implicar em distorções e aparecimento de artefatos.

- A RMV mostrou-se bastante eficiente em reduzir oscilações, mas assim como os métodos de regularização em geral, pode provocar distorções e artefatos. Entretanto, o método proposto permite a realização de simulações numéricas para verificar as condições de não-distorção.

- O procedimento proposto (MQ-RMV) mostrou-se eficiente em interpretar os artefatos que podem ser explicados pelas grandes correlações positivas entre pontos vizinhos, gerados por procedimentos de regularização. Quando existe um modelo físico (uma função a ser ajustada) o MQ-RMV permite identificar os artefatos indesejáveis.

- As simulações numéricas em diferentes situações mostraram a aplicabilidade do procedimento proposto, as condições de não distorção e o aparecimento de artefatos, sendo que estes, dependem muito de cada caso em particular (número de dados experimentais, variâncias relativas, e funções envolvidas).

- O procedimento proposto mostrou-se eficiente e viável no estudo de secções de choque fotonucleares, foi possível obter a secção de choque do ^{34}S (γ, xn) e ajustar quatro lorentzianas. As simulações mostraram que existe a possibilidade de aparecimento de artefatos em situações análogas ao caso estudado.

- O MQ-RMV também mostrou-se eficiente no estudo da radiação de aniquilação elétron-pósitron. Onde foi possível obter resultados como percentuais de aniquilação e corte de Fermi, decorrentes de um ajuste realizado aos dados altamente correla-

cionados. Estes resultados dificilmente seriam obtidos por outros métodos de resolução de Problemas Inversos que não consideram as correlações geradas.

7.2 Possíveis desdobramentos futuros

Um desdobramento do presente trabalho seria a aplicação do procedimento proposto em reconstrução de imagens, entretanto existem algumas barreiras, dentre outras, que devem ser vencidas. Em princípio nada impediria a utilização do procedimento de mínimos quadrados (sem a RMV) para espectros multidimensionais (imagens) e a realização de ajustes às imagens com pontos oscilantes, entretanto existe o problema prático (tempo de computação e convergência) do ajuste de pontos altamente correlacionados, que podem chegar à milhões de pontos. Outro problema é o modelamento da imagem, ou seja, a função a ser ajustada. Por exemplo: Qual seria a função que descreve os ossos do tórax ? Este problema poderia ser resolvido em princípio dividindo a função por partes, representandas com funções mais simples. Mesmo assim poderiam (ou não) persistir as dificuldades de tempo de computação e convergência dos ajustes.

Mais interessante no caso de imagens com o propósito de reduzir as oscilações, seria associar o MQ com procedimentos de Compactação e Regularização por Mínima Variância, utilizando também a realização de ajustes para obtenção de imagens mais precisas e com a possibilidade de identificação dos artefatos. Outro desdobramento interessante seria o desenvolvimento de um algoritmo para a identificação automática de artefatos com base nas correlações dos pontos.

O procedimento de MQ-RMV poderia ser útilizado em problemas bidimensionais onde existem modelos que descrevem a solução do problema inverso, como o caso de distribuições bidimensionais de radiação de aniquilação elétron-pósitron em materiais.

Apêndice A

Interpretação de dois dados correlacionados (Oscilações e Artefatos)

No caso de espectros multicanais cujos dados experimentais são regidos por uma função densidade de probabilidade (fdp) gaussiana, o espectro obtido pela resolução do problema inverso através do procedimento proposto (MQ) será regido por uma fdp multinormal [47]:

$$f(\mathbf{m}) = \frac{e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{m}-\mathbf{m}_0)\mathbf{V}_m^{-1}(\mathbf{m}-\mathbf{m}_0)}}{(2\pi)^{\frac{k}{2}}|\mathbf{V}_m|^{\frac{1}{2}}}, \tag{A.1}$$

lembrando que $\mathbf{m}_0$ é o valor verdadeiro de $\mathbf{m}$, que é a solução do problema inverso por MQ, com dimensão k ,$\mathbf{V}_m$ é a matriz de covariâncias e $|\ \ |$ representa o determinante. Para dois dados correlacionados m_1 e m_2 com matriz de covariancias dada por:

$$\mathbf{V}_m = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \rho\sigma_1\sigma_2 \\ \rho\sigma_1\sigma_2 & \sigma_2^2 \end{bmatrix}, \tag{A.2}$$

pode-se chegar, através da eq. A.1, à fdp conjunta:

$$f(m_1, m_2) = \frac{1}{2\pi\sigma_1\sigma_2\sqrt{(1-\rho^2)}} e^{-\frac{1}{2(1-\rho^2)}\left[\frac{(m_1-m_{o1})^2}{\sigma_1^2} - \frac{2\rho(m_1-m_{o1})(m_2-m_{o2})}{\sigma_1\sigma_2} + \frac{(m_2-m_{o2})^2}{\sigma_2^2}\right]} \tag{A.3}$$

A probabilidade de superestimar m_2 caso m_1 seja superestimado é dada por:

$$P1 = 2 * \int_{m_{o2}}^{\infty} \int_{m_{o1}}^{\infty} f(m_1, m_2)\, dm_1\, dm_2 \ , \tag{A.4}$$

a de subestimar m_2 caso m_1 seja superestimado por,

$$P2 = 2 * \int_{-\infty}^{m_{o2}} \int_{m_{o1}}^{\infty} f(m_1, m_2)\, dm_1\, dm_2 \ , \tag{A.5}$$

a de subestimar m_2 caso m_1 seja subestimado por,

$$P3 = 2 * \int_{-\infty}^{m_{o2}} \int_{-\infty}^{m_{o1}} f(m_1, m_2)\, dm_1\, dm_2 \ , \tag{A.6}$$

e, finalmente, a probabilidade de superestimar m_2 caso m_1 seja subestimado é dada por,

$$P4 = 2 * \int_{m_{o2}}^{\infty} \int_{-\infty}^{m_{o1}} f(m_1, m_2)\, dm_1\, dm_2 \ . \tag{A.7}$$

A.1 Correlação negativa- Oscilação

Vamos considerar inicialmente a situação onde a correlação entre duas grandezas é negativa, por exemplo, o caso de dois pontos vizinhos de um espectro resultante de um problema inverso. A tabela A.1 apresenta resultados contendo as probabilidades, para diferentes de coeficientes de correlação utilizou-se os seguintes valores: $m_{o1} = 200$, $\sigma_1 = \sqrt{m_{o1}}$, $m_{o2} = 205$, $\sigma_2 = \sqrt{m_{o2}}$.

ρ	-0.200	-0.500	-0.800	-0.850	-0.900	-0.950	-0.990	-0.995
P2 e P4	0.564	0.667	0.795	0.823	0.856	0.899	0.955	0.968
P1 e P3	0.436	0.333	0.205	0.177	0.144	0.101	0.045	0.032

Tabela A.1: Probabilidades para diferentes valores de ρ (correlação negativa)

Devido a simetria da função $f(m_1, m_2)$, P1 e P3 são iguais assim como P2 e P4. As probabilidades devem ser analisadas aos pares (P1 e P2) (P3 e P4), por exemplo, se $m1$ for subestimado pode-se calcular P3 e P4, agora, se $m1$ for superestimado, pode-se calcular P1 e P2. Verifica-se que para correlações altas (em valor absoluto), os valores de P4 são maiores que P3, assim como P2 são maiores que P1. Esta situação , em um espectro, resulta em um comportamento oscilatório, pois se m_1 estiver abaixo de seu valor verdadeiro (subestimado), provavelmente (P4) o seu vizinho m_2 estará acima de seu valor verdadeiro (superestimado), bem como o vizinho de m_2, m_3, provavelmente (P2) estará abaixo de seu valor verdadeiro, e assim por diante, resultando em um comportamento oscilatório dos pontos vizinhos.

A.2 Correlação positiva- Artefato

Vamos considerar agora o caso de dois pontos (m_1 e m_2) correlacionados positivamente, representantes, por exemplo, de um espectro regularizado. A tabela A.2 apresenta as probabilidades utilizando os mesmos valores da secção A1.

ρ	0.200	0.500	0.800	0.850	0.900	0.950	0.990	0.995
P2 e P4	0.436	0.333	0.205	0.177	0.144	0.101	0.045	0.032
P1 e P3	0.564	0.667	0.795	0.823	0.856	0.899	0.955	0.968

Tabela A.2: Probabilidades para diferentes valores de ρ (correlação positiva)

Nota-se os valores de P1 e P3 são iguais aos valores de P2 e P4 da Tabela A.1 (caso de correlação negativa) devido a simetria da função $f(m_1, m_2)$.

Para o caso de correlações altas em valor absoluto nota-se que P1 e P2 são maiores que P3 e P4. Ou seja, se um dado m_1 for subestimado provavelmente (P3) o seu vizinho m_2 será subestimado. No caso de m_1 for superestimado, provavelmente (P1) o seu vizinho será também superestimado. Estes resultados permitem a seguinte interpretação : No caso de um espectro com pontos vizinhos correlacionados positivamente, se um dado estiver acima do seu valor verdadeiro (superestimado), o seu vizinho provavelmente (P1) estará também acima do seu valor verdadeiro, o vizinho do vizinho também estará acima do valor verdadeiro e assim por diante, resultando em uma regiao com pontos que sistematicamente estarão acima de seus valores verdadeiros, formando assim uma estrutura. Se um ponto estiver abaixo do seu valor verdadeiro (subestimado) o seu vizinho também provavelmente (P3) estará abaixo de seu valor verdadeiro, o vizinho do vizinho, provavelmente estará abaixo de seu valor verdadeiro e assim por diante, formando novamente uma região com pontos sistematicamente abaixo de seus valores verdadeiros, formando assim uma estrutura. Estas "estruturas"são denominadas de **artefatos**.

Apêndice B

Dedução da solução de Mínimos Quadrados e Regularização de Tikhonov

B.1 A solução de MQ

A condição de mínimos quadrados é dada por,

$$Q = (\mathbf{d} - \mathbf{k}\,\mathbf{m})^t\,\mathbf{V}^{-1}(\mathbf{d} - \mathbf{k}\,\mathbf{m}) \;, \tag{B.1}$$

minimizando em relação a um parâmetro ν, tem-se,

$$\frac{\partial\, Q}{\partial\, m_\nu} = \frac{\partial(\mathbf{k}\,\mathbf{m})^t}{\partial m_\nu}\mathbf{V}^{-1}(\mathbf{d} - \mathbf{k}\,\mathbf{m}) - (\mathbf{d} - \mathbf{k}\,\mathbf{m})^t\,\mathbf{V}^{-1}\frac{\partial(\mathbf{k}\,\mathbf{m})}{\partial m_\nu} \;. \tag{B.2}$$

Vamos analizar o segundo termo da equação B.2, utilizando a propriedade,

$$\mathbf{A}\,\mathbf{B}\,\mathbf{C} \;=\; (\mathbf{C}^t\,\mathbf{B}^t\,\mathbf{A}^t)^t \tag{B.3}$$

e a simetria da matriz $\mathbf{V}^{-1} = (\mathbf{V}^{-1})^t$, o segundo termo da eq. B.2 pode ser escrita como,

$$(\mathbf{d} - \mathbf{k}\,\mathbf{m})^t\,\mathbf{V}^{-1}\frac{\partial(\mathbf{k}\,\mathbf{m})}{\partial m_\nu} = \left[\left(\frac{\partial(\mathbf{k}\,\mathbf{m})}{\partial m_\nu}\right)^t\mathbf{V}^{-1}(\mathbf{d} - \mathbf{k}\,\mathbf{m})\right]^t \;. \tag{B.4}$$

Pode-se retirar a operação de transposto do lado direito, pois, tanto o lado direito como o esquerdo da equação B.18 correspondem a um número escalar. Conclui-se então que os dois termos da equação B.2 são iguais. O resultado da derivada parcial é dada por,

$$\frac{\partial(\mathbf{k}\,\mathbf{m})^t}{\partial m_\nu} = \mathbf{k}_\nu^t \ , \tag{B.5}$$

onde $\mathbf{k}_\nu^t$ corresponde a uma matriz linha, composta pelos elementos da coluna ν da matriz $\mathbf{k}$. Consequentemente,

$$\frac{\partial\, Q}{\partial\, m_\nu} = -2\,\mathbf{k}_\nu^t\,\mathbf{V}^{-1}(\mathbf{d} - \mathbf{k}\,\mathbf{m}) \ , \tag{B.6}$$

considerando todos os parâmetros m_ν tem-se,

$$-2\,\mathbf{k}^t\,\mathbf{V}^{-1}(\mathbf{d} - \mathbf{k}\,\mathbf{m}) = \vec{0} \ , \tag{B.7}$$

onde $\vec{0}$ corresponde a uma matriz coluna com zeros. Separando o termo com $\mathbf{m}$,

$$\mathbf{k}^t\,\mathbf{V}^{-1}\mathbf{d} = \mathbf{k}^t\,\mathbf{V}^{-1}\mathbf{k}\,\mathbf{m} \ , \tag{B.8}$$

e finalmente, isolando $\mathbf{m}$ obtem-se a solução de mínimos quadrados,

$$\mathbf{m} = (\mathbf{k}^t\,\mathbf{V}^{-1}\mathbf{k})^{-1}\mathbf{k}^t\,\mathbf{V}^{-1}\mathbf{d} \ . \tag{B.9}$$

A matriz de covariâncias é definida por,

$$\mathbf{V}_m =< (\mathbf{m} - \mathbf{m}_o)(\mathbf{m} - \mathbf{m}_o)^t > \ , \tag{B.10}$$

utilizando a solução de mínimos quadrados e eq. B.9 e $\mathbf{d} = \mathbf{k}\,\mathbf{m} + \epsilon$ (eq. 3.3), obtêm-se,

$$\mathbf{m} - \mathbf{m}_o = (\mathbf{k}^t\,\mathbf{V}^{-1}\mathbf{k})^{-1}\mathbf{k}^t\,\mathbf{V}^{-1}\mathbf{d}\,\epsilon \ . \tag{B.11}$$

Substituindo a equação acima na eq. B.10 e considerando que as matrizes $\mathbf{V}$ e $\mathbf{k}^t\,\mathbf{V}^{-1}\mathbf{k}$ e suas inversas são simétricas, pode-se obter o resultado,

$$\mathbf{V}_m =< (\mathbf{k}^t\,\mathbf{V}^{-1}\mathbf{k})^{-1}\,\mathbf{k}^t\,\mathbf{V}^{-1}\,\epsilon\,\epsilon^t\,\mathbf{V}^{-1}\mathbf{k}\,(\mathbf{k}^t\,\mathbf{V}^{-1}\mathbf{k})^{-1} > \ , \tag{B.12}$$

como a única variavel aleatória é o vetor ϵ e $< \epsilon\,\epsilon^t >= \mathbf{V}$ (decorre da eq.3.2 Cap.3), pode-se escrever,

$$\mathbf{V}_m = (\mathbf{k}^t\,\mathbf{V}^{-1}\mathbf{k})^{-1}\mathbf{k}^t\,\mathbf{V}^{-1}\,\mathbf{V}\,\mathbf{V}^{-1}\mathbf{k}(\mathbf{k}^t\,\mathbf{V}^{-1}\mathbf{k})^{-1}\ , \tag{B.13}$$

utilizando a eq. B.3 chega-se a,

$$\mathbf{V}_m = (\mathbf{k}^t\,\mathbf{V}^{-1}\,\mathbf{k})^{-1}\ . \tag{B.14}$$

B.2 A solução de Tikhonov

Vamos deduzir a solução no caso de matrizes de estabilização lineares ($\mathbf{L}(\mathbf{m}) = \mathbf{L}\,\mathbf{m}$), que correspondem a grande maioria dos casos, como a condição de suavidade nas derivadas de ordem n da solução . Vamos considerar também os modelos lineares ou linearizáveis ($\mathbf{k}\,(\mathbf{m}) = \mathbf{k}\,\mathbf{m}$).

A condição de Tikhonov, nesta situação é dada por,

$$Q = (\mathbf{d} - \mathbf{k}\,\mathbf{m})^t\,\mathbf{V}^{-1}(\mathbf{d} - \mathbf{k}\,\mathbf{m}) \ + \ \mu(\mathbf{L}\,\mathbf{m})^t\,(\mathbf{L}\,\mathbf{m})\ , \tag{B.15}$$

vamos escrever da seguinte forma,

$$Q = Q_{MQ} + Q_T \tag{B.16}$$

onde Q_{MQ} corresponde a condição clássica de mínimos quadrados e a equação das derivadas em relação aos parâmetros ja foi calculada, vamos calcular portanto em relação a Q_T. Desenvolvendo as expressões analogamente ao caso de mínimos quadrados, pode-se chegar a,

$$\frac{\partial\,Q_T}{\partial\,m_\nu} = 2\,\mu\,\mathbf{L}_\nu^t\,\mathbf{L}_\nu\mathbf{m}_\nu\ . \tag{B.17}$$

Considerando a equação acima e a equação B.6 tem-se,

$$\frac{\partial\,Q}{\partial\,m_\nu} = -2\,\mathbf{k}_\nu^t\,\mathbf{V}^{-1}(\mathbf{d} - \mathbf{k}\,\mathbf{m}) + 2\,\mu\,\mathbf{L}_\nu^t\,\mathbf{L}_\nu\ , \tag{B.18}$$

considerando todos os parâmetros ν, e igualando a equação das derivadas em relação a zero, tem-se,

$$-\mathbf{k}^t\,\mathbf{V}^{-1}(\mathbf{d}-\mathbf{k}\,\mathbf{m})+\,\mu\,\mathbf{L}^t\,\mathbf{L}=\vec{0}\,, \tag{B.19}$$

separando os termos com $\mathbf{m}$,

$$(\mathbf{k}^t\mathbf{V}^{-1}\mathbf{k}\,+\mu\mathbf{L}^t\,\mathbf{L})\mathbf{m}=\mathbf{k}^t\,\mathbf{V}^{-1}\,\mathbf{d} \tag{B.20}$$

e finalmente, isolando $\mathbf{m}$ chega-se a solução de Tikhonov,

$$\mathbf{m}=(\mathbf{k}^t\,\mathbf{V}^{-1}\,\mathbf{k}\,+\mu\mathbf{L}^t\,\mathbf{L})^{-1}\;\;\mathbf{k}^t\,\mathbf{V}^{-1}\,\mathbf{d} \tag{B.21}$$

Bibliografia

[1] P.C. Hansen, " Numerical tools for analysis and solution of Fredholm integral equations of the first kind ", Inverse Problems 8(1992)849.

[2] J. Trampert and R. Snieder, " Model Estimations Biased by Trumcated Expansions: Possible Artifacts in Seismic Tomography ", Science 271(1996)1257.

[3] P.S. Rosenberg, "Scope of the Aids epidemic in the United-States ", Science, 270-5240(1995) 1372.

[4] A. Tarantola, " Inverse Problem Theory "(Elsevier, 1987).

[5] P.A. Jansson, " Deconvolution "(Academic Press, 1984).

[6] , D.L. Snyder, M.I. Miller, L.J. Thomas and D.G. Politte, " Noise and Edge Artifacts in Maximum-Likelihood Reconstructions for Emission Tomography ", IEEE Trans. Med. Imag., 6-3,(1987)228.

[7] O. Helene, C. Takiya and V.R. Vanin, " Variances and covariances in deconvolution of multichannel spectra: $^{34}S\,(\gamma, xn)$ cross section "Braz. J. Phys. 31-1(2001)8.

[8] C. Takiya, O. Helene and E. do Nascimento, " Minimum variance regularization in linear inverse problems "submetido a Nucl. Instr. and Meth. (em processo de revisão).

[9] G. Gindi, M. Lee, A. Rangarajan and G. Zubal, " Bayesian Reconstruction of Functional Images Using Anatomical Information as Priors ", IEEE Trans. Medical Imaging, 12-4(1993)670.

[10] J. Porrill, J.P. Frisby, W.J Adams and D. Buckley, " Robust and optimal use of information in stereo vision ", Nature,397(1999)63.

[11] S.R. Arridge and J.C. Hebden, " Optical imaging in medicine: II. Modelling and reconstruction, Phys. Med. Miol. 42(1997)841.

[12] P.C. Sabatier, " Inverse Problems-an introduction ", Inverse Problems 1-1(1985) Editorial.

[13] R.F. Boisvert, M.J. Donahue, et al. " Mathematics and Measurement ", J. Res. Natl. Stand. Technol. 106(2001)293.

[14] J.P. Kaipio, V. Kolehmainen, M. Vauhkonen, E. Somersalo, " Inverse Problems with structural prior information ", Inverse Problems 15(1999)713.

[15] L. Bouchet, " A comparative study of deconvolution methods for gamma-ray spectra ", Astron. Astrophys. Suppl. Ser. 113(1995)167.

[16] L. Hoffmann, A Shukla, M. Peter, B.Barbiellini and A.A. Manuel , " Linear and non-linear approches to solve the Inverse Problem: applications to positron annihilation experiments ", Nucl. Instr. and Meth. A 335(1993)276.

[17] J.S. Fleming and B.A. Goddarg, " A technique for the Deconvolution of the Renogram ", Phys. Med. Biol. 19-4(1974)546.

[18] A.N. Tikhonov and V.Y. Arsenin, " Solutions of ill-posed problems ", (Halsted Press, 1977).

[19] D.L. Phillips, "A technique for numerical solutions of certain integral equations of first kind ", Journal of the ACM 9-1(1962)84.

[20] A.M. Urmanov, A.V. Gribok, J.W. Hines, R.E. Uhrig, " An information approach to regularization parameter selection under model misspecification ", Inverse Problems 18(2002)1207.

[21] T. Roths, M. Marth, J. Weese, J. Honerkamp, " A generalized regularization method for nonlinear ill-posed problems for nonlinear regularization terms ", Comput. Phys. Commun. 139(2001)279.

[22] J. Cheng and M. Yamamoto, " One new strategy for a priori choice of regularizing parameters Tikhonov's regularization ", Inverse Problems 16(2000)L31.

[23] S.E. Evans and P. B. Stark, " Inverse Problems as statistics ", Inverse Problems 18(2002)R55.

[24] A. Mohammad-Djafari, J.F.Giovannelli, G. Demoment, J. Idier, " Regularization, maximum entropy and probabilistic methods in mass spectroscopy dada processing problems ", Int. J. Mass. Spec. 215(2002)175.

[25] J.A. Scales and L. Tenorio," Prior information and uncertainty in Inverse Problems ", Geophysics 66-2(2001)389.

[26] J.A. Scales, R. Snieder, " To Bayes or not to Bayes ", Geophysics 62-4(1997)1045.

[27] G.D. D'agostini, " A multidimensional unfolding method based on Bayes theorem ", Nucl. Instr. and Meth. A362(1995)487.

[28] E.T. Jaynes, " Prior Information and ambiguity in Inverse Problems ", SIAM-AMS Proceedinds 14(1984)151.

[29] W.P. Gouveia and J.A. Scales, " Resolution of seismic waveform inversion: Bayes versus Occam ", Inverse Problems 13(1997)323.

[30] P.R. Phillips, " Bayesian Statistics, Factor Analysis, and PET Images-Part I: Mathematical Background ", IEEE Trans. Med.

[31] E.T. Jaynes, " Information Theory and Statistical Mechanics ", The Physical Review,106(1957)620.

[32] E.T. Jaynes, " On the Rationale of Maximum-Entropy Methods ", Proceedings of the IEEE Vol.70 NO.9 1982.

[33] F. Ramos, H.F.C. Velho, J.C. Carvalho and N.J. Ferreira, " Novel approches to entropic regularization ", Inverse Problems 15(1999)1139.

[34] V.P. Zhigunov, T.B. Kostkina, A.A Spiridonov, " On estimating distributions with the maximum entropy principle ", Nucl. Instr. and Meth. A273(1988)362.

[35] M. Matzke, " Propagation of uncertainties in unfolding procedures ", Nucl. Instr. and Meth. A476(2002)230.

[36] M.Schmelling " The method of reduced cross-entropy A general approach to unfold probability distributions ", Nucl. Instr. and Meth. A340(1994)400.

[37] Y. Kong and K.G. Lynn, " Deconvolution of positron annihilation γ ray energy spectra with the maximum entropy principle ", Nucl. Instr. and Meth. A302(1991)145.

[38] A. Deppman, J.D.T. Arruda-Neto and M.V. Tavares, " A new and simple method to unfold electroexcitation cross sections at intermediate energies ", Nucl. Intr. and Meth. A 384(1997)516.

[39] O.L. Gonçalez, L.P. Geraldo, R. Semmler, " Measurements of neutron photoproduction cross sections for Th-232 and U-238 using capture gamma rays ", Nucl. Sci. and Eng. 132-1(1999)135.

[40] C.C. Braga, M.S. Dias, " Application of Neural Networks for unfolding neutron spectra measured by means of Bonner Spheres ", Nucl. Instr. and Meth. A 476(2002)252.

[41] A. Tarantola and B. Valette, " Generalized Nonlinear Inverse Problems Solved Using the Least Squares Criterion ", Rev. Geophys. Space Phys. 20-2(1982)219

[42] B. A. Ardekani, M. Braun, B.F. Kannot, H. Lida, " Minimum cross-entropy reconstruction of PET images using anatomica information ", Phys. Med. Biol. 41(1996)2497.

[43] J.A. Scales, R. Snieder, " The Anatomy of Inverse Problems ", Geophysics 65-6(2000)1708.

[44] M. Bertero, C.D. Mol and E.R. Pike, " Linear Inverse Problems with discrete data: Stability and regularization ", Inverse Problems 4(1988)573.

[45] M.K. Ng, R.J. Plemmons, F. Pimentel, " A new approach to constrained total least squares image restoration ", Linear Algebra Appl. 316(2000)237 ".

[46] V.P. Zhigunov, " Improvement of Resolution Function as an Inverse Problem ", Nucl. Instr. and Meth. A216(1983)183.

[47] W.T. Eadie et al. " Statistical Methods in Experimental Physics ", (North Holland, 1971).

[48] G.H. Golub and C.F. Van Loan, " Matrix Computations "(John Hopkings University Press, 1996).

[49] M. G. Kendall and A. Stuart, " The Advanced Theory of Statistics ", (Charles Griffin and Co Ltd., London, 1967), Vol. 2.

[50] C. Takiya, E. do Nascimento, O. Helene et V.R. Vanin, " Etude de l'Annihilation Electron-Positron dans l'Aluminium avec Déconvolution par la Méthode des Moindres Carrés et Regularisation par Variance Minimum ", Journées de spectrométrie gamma et X 2002, INSTN, CEA - Saclay (15-17/10/2002).

[51] F. Kallel, M. Bertrand, " Tissue elasticity reconstruction using pertubation method ", IEEE Trans. Med. Imag. 15-3(1996)299.

[52] P. Oblozinský, M.B. Chadwick, A.I. Blokhin, T.Fukamori, Y.O. Lee, M.N. Martins, V.V. Varlamov, B. Yu, Y. Han, S.F. Mughabghab and Z. Zhang, " Handbook on photonuclear data for applications - Final report of a co-ordinated research project / IAEA-TECDOC-Draft No 3, (2000).

[53] A.V. Varlamov et al.," Atlas of Giant Dipole Resonances ", INCD(NDS)-394/IAEA(1999) (www-nds.iaea.or.at).

[54] A.S. Penfold and J.E. Leiss, " Analysis of Photonuclear Creoss Sections ", Physical Review 114-5(1959)1332.

[55] E. Bramanis,T.K. Deague et al. " The analysis of photonuclear yield curves ", Nucl. Instr. and Meth. 100(1972)59.

[56] Y.I. Assafiri, G.E. Egan M.M. Thompson, "Photoneutron cross section of ^{34}S ", Nucl. Phys. A413(1984)416.

[57] H.W. Koch and J.W. Motz, " Bremsstrahlung Cross Section Formulas and Related Data ", Rev. Mod. Phys. 31-4(1959)921.

[58] E. do Nascimento, O. Helene, C. Takiya and V.R. Vanin, " Complete fit of the two-dimensional electron-positron annihilation radiation in aluminium "submetido ao Physical Review B.

[59] Z. Tang et al., " First-principles calculation of coicidence Doppler broadening of positron annihilation radiation ", Phys. Rev. B, 65(2002)045108.

[60] K.F. Ho, K.P. Ng, C.D. Beling, S. Fung, K.L. Chan and H.W. Tang, " Deconvoluting Double Doppler Spectra ", Materials Sci. Forum 363-365(2001)673.

[61] K. Shizuma, " Analysis of monochromatic gamma-ray and annihilation radiation spectra obtained Ge(Li) dtectors ", Nucl. Instr. and Meth. 150(1978)447.

[62] P.E. Mijnarends et al. " Two-detector Doppler broadening study of enhancement in Al "J. PHYS. CONDENS. MAT. 10-46(1998)10383.