Um estudo de sensibilidade da fatoração
PMF – *Positive Matrix Factorization* –
em relação às medidas de incerteza
das variáveis

Renato Ciani

DISSERTAÇÃO APRESENTADA
AO
INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA
DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
PARA
OBTENÇÃO DO TÍTULO
DE
MESTRE EM CIÊNCIAS

Programa: Mestrado em Estatística
Orientador: Prof. Dra. Lúcia Pereira Barroso

Durante o desenvolvimento deste trabalho o autor recebeu auxílio financeiro da CAPES

São Paulo, Setembro de 2016

Um estudo de sensibilidade da fatoraço~o
PMF – *Positive Matrix Factorization* –
em relaço~o às medidas de incerteza
das variáveis

Esta vers~ao da dissertaço~o contém as correço~es e alteraço~es sugeridas pela Comiss~ao Julgadora durante a defesa da vers~ao original do trabalho, realizada em 21/09/2016. Uma cópia da vers~ao original está disponível no Instituto de Matemática e Estatística da Universidade de São Paulo.

Comiss~ao Julgadora:

- Prof^a. Dr^a. Lúcia Pereira Barroso (orientadora) - IME-USP
- Prof^a. Dr^a. Maria de Fátima Andrade - IAG-USP
- Prof^a. Dr^a. Carmen Diva Saldiva de André - IME

Agradecimentos

Agradeço à Professora Lúcia Pereira Barroso por ter aceitado me orientar, por sugerir o tema e ter sempre feito sugestões criativas durante o desenvolvimento deste trabalho. E por ter tido muita paciência, principalmente nos últimos meses.

Agradeço à Professora Carmen Diva Saldiva de André e à Professora Maria de Fátima Andrade por aceitar compor a banca, e pelas críticas e sugestões feitas para o aprimoramento deste trabalho.

Agradeço ao Professor Fábio Prates Machado por ter me orientado mesmo antes de começar o programa de mestrado. Por ter me encorajado a estudar para admissão, e posteriormente por me orientar durante o período em que cursei as disciplinas.

Agradeço pela ajuda e boa vontade das pessoas que eu conheci no IME enquanto estudava para a prova de admissão e que foram fundamentais para que eu tivesse êxito neste curso: ao Ivan Bernardo pela ajuda com as listas intermináveis no início do curso, ao Júlio Trecenti pela monitoria em Probabilidade e Inferência, ao Helton, Maicon, Marcos e Francisco, por estarem sempre dispostos a compartilhar seus conhecimentos no período em que cursamos as disciplinas do programa.

Agradeço ao Professor Luis Gustavo Esteves pela dedicação e pela enorme disposição em tirar dúvidas depois das aulas.

Agradeço novamente à Professora Maria de Fátima Andrade por sempre indicar onde e como obter informações sobre a área de estudo de poluição atmosférica que foi a área de aplicação do método estudado neste trabalho. Agradeço ao Professor Américo Kerr pelos esclarecimentos sobre o funcionamento do método EDXRF e pelas indicações de artigos e livros.

Agradeço à todas as pessoas que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho cujos nomes não foram citados aqui: o pessoal do laboratório do Ed. Milênio do Instituto de Física da USP, e os alunos de pós-graduação da área de Física Atmosférica e Meteorologia com quem tive a oportunidade de conversar e esclarecer dúvidas.

Agradeço à minha família pelo apoio que tive durante o período deste curso.

Resumo

A fatoração PMF – *Positive Matrix Factorization* – é um método de resolução de problemas em que variáveis observadas conjuntamente são modeladas como a combinação linear de fatores potenciais, representada pela multiplicação de duas matrizes. Este método tem sido utilizado principalmente em áreas de estudo em que as variáveis observadas são sempre não negativas, e quando é aplicada uma modelagem fatorial ao problema. Assume-se a premissa de que são resultantes da multiplicação de duas matrizes com entradas não negativas, ou seja, os fatores potenciais, e os poderadores da combinação linear são desconhecidos, e têm valores não negativos. Neste método além da possibilidade de restringir a busca dos valores das matrizes da fatoração a valores não negativos, também é possível incluir a medida de incerteza relacionada a cada observação no processo de obtenção da fatoração como um modo de reduzir o efeito indesejado que valores *outliers* podem causar no resultado.

Neste trabalho é feito um estudo de sensibilidade da fatoração PMF em relação a algumas medidas de incertezas presentes na literatura, utilizando o *software* EPA PMF 5.0 com ME-2. Para realizar este estudo foi desenvolvida uma metodologia de simulação de base de dados a partir de perfis de fontes emissoras conhecidas incluindo valores *outliers*, e aplicação sequencial da fatoração PMF com o *software* ME-2 nas bases de dados simuladas.

Palavras-chave: EPA, Incerteza, ME-2, PMF, Simulação.

Abstract

The PMF factorization - Positive Matrix Factorization - is a problem solving method in which jointly observed variables are modeled as a linear combination of potential factors, represented by the multiplication of two matrices. This method has been used primarily in study areas in which the observed variables are always non negative, and when it is applied a factor modeling in the problem. It is made the assumption that the variables in study come from the two matrices multiplication both having non negative components, i.e., the potential factors, and the linear combination values are unknown, and all of them have non negative values. In this method, besides the possibility of constraining the search of the matrix factorization values on non negative values, it is also possible to include the uncertainty measure related to each observation on factorization process as a way to reduce the undesired effect which outliers can cause to the outcome.

This paper presents a study of the sensitivity of the factorization PMF over some uncertainties measures present in literature, using EMP PMF 5.0 with ME-2 software. To carry out this study was developed a methodology of database simulation from known emitting sources profiles including outliers values, and a sequential application of PMF factorization with ME-2 software in simulated databases.

Keywords: EPA, ME-2, PMF, Simulation, Uncertainty.

Sumário

Lista de Abreviaturas	ix
Lista de Figuras	xi
Lista de Tabelas	xix
1 Introdução	1
1.1 Objetivos	1
2 Conceitos	3
2.1 O Modelo PMF	4
2.1.1 A Função de perda	4
2.1.2 Incertezas das medições	4
2.1.3 Fatores: identificação e interpretação	4
2.2 Considerações sobre a aplicação do modelo PMF	5
2.2.1 Métodos para obtenção da fatoração PMF	5
2.2.2 Preparação dos dados	5
2.2.3 Outliers e $Q_{robusto}$	6
2.3 Considerações sobre métodos de medição de concentração de espécies químicas no contexto de análise de poluentes	7
2.3.1 Elementos traçadores	7
2.3.2 Incertezas analíticas	9
2.3.3 Limites de Detecção	11
3 Os programas EPA PMF 5.0 e ME-2	13
3.1 Recursos do EPA PMF 5.0	13
3.1.1 Model Data	13
3.1.2 Base Model/ Base Model Results	16
3.1.3 Base Model / Error Estimates	20
3.1.4 Base Model / Base Model Displacement Results	20
3.1.5 Base Model / Base Model Bootstrap Results	22
3.1.6 Base Model / BS-DISP Results	23
3.1.7 Rotational Tools	24

4	Simulação de base de dados	27
4.1	Modelo receptor	27
4.2	Perfis de fontes	28
4.3	Distribuições de probabilidade utilizadas na simulação	29
4.4	Implementação computacional	31
4.5	Metodologia	31
5	Aplicação da fatoração PMF com <i>software</i> ME-2	35
5.1	Configurações do <i>software</i> ME-2	35
5.2	Execução do <i>software</i> ME-2	36
5.3	Identificação de fatores	37
5.4	Metodologia de consolidação dos resultados	38
6	Resultados	41
6.1	Propostas de definição de incertezas	41
6.2	Resultados de aplicações de diferentes propostas de definição de incertezas	43
7	Conclusões e trabalhos futuros	71
A	Códigos	73
A.1	Implementação Computacional - SAS	73
A.2	Implementação Computacional - C	78
B	Gráficos	97
B.1	Exemplo de séries de tempo simuladas sem <i>outliers</i>	97
B.2	Exemplo de séries de tempo simuladas com <i>outliers</i> - Exponencial com média 1,5	99
B.3	Exemplo de séries de tempo simuladas com <i>outliers</i> - Exponencial média 3	101
B.4	Exemplo de séries de tempo simuladas com <i>outliers</i> - Exponencial média 9	103
B.5	Exemplo de incertezas para uma mesma base simulada sem <i>outliers</i>	105
B.6	Exemplo de incertezas para uma mesma base simulada com <i>outliers</i> - Exponencial com média 1,5	107
B.7	Exemplo de incertezas para uma mesma base simulada com <i>outliers</i> - Exponencial com média 3	109
B.8	Exemplo de incertezas para uma mesma base simulada com <i>outliers</i> - Exponencial com média 9	111
	Referências Bibliográficas	113

Lista de Abreviaturas

CMB	<i>Chemical Mass Balance</i>
EDXRF	<i>Energy Dispersive X-Ray Fluorescence</i>
EPA	<i>US Environmental Protection Agency</i>
LFA	Laboratório de Física Atmosférica da USP
PMF	<i>Positive Matriz Factorization</i>
ME-2	<i>Multilinear Engine 2</i>

Lista de Figuras

2.1	Menu SPECIATE - EPA Fonte: https://cfpub.epa.gov/si/speciate/	8
2.2	Perfil SPECIATE - Light Duty Vehicles - Composite - Fonte: https://cfpub.epa.gov/si/speciate/	9
2.3	Incidencia de raio X característico fonte: http://www.handheldxrf.com.au/technology_handheld_xrf.php	10
2.4	EDXRF fonte: http://www.horiba.com/scientific/products/x-ray-fluorescence-analysis/tutorial/xrf-spectroscopy/	10
2.5	Sensibilidade elementar em função dos elementos químicos contidos nos padrões fabricados pela MicroMatter Arana (2014)	12
2.6	WinQxas – Espectro típico gerado por EDX. Fonte: Oyama (2010)	12
3.1	Matriz com parâmetros para calcular incertezas segundo formula pré definida em EPA PMF 5.0	14
3.2	Interface de entrada de dados EPA PMF 5.0 Fonte: Norris <i>et al.</i> (2014)	14
3.3	Interface de análise da qualidade dos dados EPA PMF 5.0 Fonte: Norris <i>et al.</i> (2014)	15
3.4	<i>Concentration Scatter Plot</i> e <i>Concentration Time Series</i> EPA PMF 5.0 Fonte: Norris <i>et al.</i> (2014)	16
3.5	<i>Menu Base Model Runs</i>	16
3.6	<i>Residual Analysis</i> e <i>Obs/Pred Scatter</i> EPA PMF 5.0	17
3.7	<i>Obs/Pred Time Series</i> EPA PMF 5.0	17
3.8	<i>Profiles/Contributions</i> EPA PMF 5.0 Fonte: Norris <i>et al.</i> (2014)	18
3.9	<i>Profile Contribution</i> EPA PMF 5.0 Fonte: Norris <i>et al.</i> (2014)	18
3.10	<i>G-Space Plot</i> EPA PMF 5.0	19
3.11	<i>Factor Contributions</i> EPA PMF 5.0	19
3.12	<i>Diagnostics</i> EPA PMF 5.0	20
3.13	<i>Base Model DISP Box Plots</i> EPA PMF 5.0	21
3.14	<i>Base Model DISP Summary</i> EPA PMF 5.0 Fonte: Norris <i>et al.</i> (2014)	22
3.15	<i>Base Model Bootstrap Boxplots</i> EPA PMF 5.0	23
3.16	<i>Base Model Bootstrap Summary</i> EPA PMF 5.0	23
3.17	<i>Base Model BS-DISP Summary</i> EPA PMF 5.0 Fonte: Norris <i>et al.</i> (2014)	24
3.18	<i>Rotational Tools / Fpeak/ Profiles/Contributions</i> EPA PMF 5.0 Fonte: Norris <i>et al.</i> (2014)	25
3.19	<i>Rotational Tools / Fpeak / Model Runs</i> EPA PMF 5.0 Fonte: Norris <i>et al.</i> (2014)	26
5.1	Arquivos para a execução do ME-2 via linha de comando	36

5.2	Execução do ME-2 via linha de comando	37
6.1	Perfis médios em bases sem <i>outliers</i> - Proposta de incertezas definida em Norris <i>et al.</i> (2014)	44
6.2	Desvios padrões em bases sem <i>outliers</i> - Proposta de incertezas definida em Norris <i>et al.</i> (2014)	44
6.3	Perfis médios em bases sem <i>outliers</i> - Proposta de incertezas definida em Polissar <i>et al.</i> (1998)	44
6.4	Desvios padrões em bases sem <i>outliers</i> - Proposta de incertezas definida em Polissar <i>et al.</i> (1998)	44
6.5	Perfis médios em bases sem <i>outliers</i> - Proposta de incertezas definida em Ito <i>et al.</i> (2004)	45
6.6	Desvios padrões em bases sem <i>outliers</i> - Proposta de incertezas definida em Ito <i>et al.</i> (2004)	45
6.7	Perfis médios em bases sem <i>outliers</i> - Proposta de incertezas definida em Chueinta <i>et al.</i> (2000)	45
6.8	Desvios padrões em bases sem <i>outliers</i> - Proposta de incertezas definida em Chueinta <i>et al.</i> (2000)	45
6.9	Perfis médios em bases sem <i>outliers</i> - Proposta de incertezas de 5% do valor da medição	46
6.10	Desvios padrões em bases sem outliers - Proposta de incertezas de 5% do valor da medição	46
6.11	Perfis médios em bases sem outliers - Proposta de incertezas de 10% do valor da medição	46
6.12	Desvios padrões em bases sem outliers - Proposta de incertezas de 10% do valor da medição	46
6.13	Perfis médios em bases sem outliers - Proposta de incertezas de 20% do valor da medição	47
6.14	Desvios padrões em bases sem outliers - Proposta de incertezas de 20% do valor da medição	47
6.15	Perfis médios em bases sem outliers - Análise Fatorial Ortogonal - CP- Rotação Varimax	47
6.16	Desvios padrões em bases sem outliers - Análise Fatorial Ortogonal - CP- Rotação Varimax	47
6.17	Gráfico comparativo para o Perfil 1	48
6.18	Gráfico comparativo para o Perfil 2	48
6.19	Gráfico comparativo para o Perfil 3	49
6.20	Gráfico comparativo para o Perfil 4	49
6.21	Gráfico comparativo para o Perfil 5	50
6.22	Gráfico comparativo para o Perfil 6	50
6.23	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas definida em Norris <i>et al.</i> (2014)	50
6.24	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas definida em Norris <i>et al.</i> (2014)	50
6.25	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas definida em Polissar <i>et al.</i> (1998)	51

6.26	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas definida em Polissar <i>et al.</i> (1998)	51
6.27	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas definida em Ito <i>et al.</i> (2004)	51
6.28	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas definida em Ito <i>et al.</i> (2004)	51
6.29	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas definida em Chueinta <i>et al.</i> (2000)	52
6.30	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas definida em Chueinta <i>et al.</i> (2000)	52
6.31	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas de 5% do valor da medição	52
6.32	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas de 5% do valor da medição	52
6.33	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas de 10% do valor da medição	53
6.34	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas de 10% do valor da medição	53
6.35	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas de 20% do valor da medição	53
6.36	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas de 20% do valor da medição	53
6.37	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Análise Fatorial Ortogonal - CP - Rotação Varimax	54
6.38	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Análise Fatorial Ortogonal - CP - Rotação Varimax	54
6.39	Gráfico comparativo para o Perfil 1	54
6.40	Gráfico comparativo para o Perfil 2	54
6.41	Gráfico comparativo para o Perfil 3	55
6.42	Gráfico comparativo para o Perfil 4	55
6.43	Gráfico comparativo para o Perfil 5	56
6.44	Gráfico comparativo para o Perfil 6	56
6.45	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de incertezas definida em Norris <i>et al.</i> (2014)	56
6.46	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de incertezas definida em Norris <i>et al.</i> (2014)	56
6.47	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de incertezas definida em Polissar <i>et al.</i> (1998)	57
6.48	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de incertezas definida em Polissar <i>et al.</i> (1998)	57
6.49	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de incertezas definida em Ito <i>et al.</i> (2004)	57

6.50	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de incertezas definida em Ito <i>et al.</i> (2004)	57
6.51	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de incertezas definida em Chueinta <i>et al.</i> (2000)	58
6.52	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de incertezas definida em Chueinta <i>et al.</i> (2000)	58
6.53	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de incertezas de 20% do valor da medição	58
6.54	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de incertezas de 20% do valor da medição	58
6.55	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de incertezas de 10% do valor da medição	59
6.56	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de incertezas de 10% do valor da medição	59
6.57	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de incertezas de 20% do valor da medição	59
6.58	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de incertezas de 20% do valor da medição	59
6.59	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Análise Fatorial Ortogonal - CP - Rotação Varimax	60
6.60	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Análise Fatorial Ortogonal - CP - Rotação Varimax	60
6.61	Gráfico comparativo para o Perfil 1	60
6.62	Gráfico comparativo para o Perfil 2	60
6.63	Gráfico comparativo para o Perfil 3	61
6.64	Gráfico comparativo para o Perfil 4	61
6.65	Gráfico comparativo para o Perfil 5	62
6.66	Gráfico comparativo para o Perfil 6	62
6.67	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de incertezas definida em Norris <i>et al.</i> (2014)	62
6.68	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de incertezas definida em Norris <i>et al.</i> (2014)	62
6.69	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de incertezas definida em Polissar <i>et al.</i> (1998)	63
6.70	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de incertezas definida em Polissar <i>et al.</i> (1998)	63
6.71	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de incertezas definida em Ito <i>et al.</i> (2004)	63
6.72	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de incertezas definida em Ito <i>et al.</i> (2004)	63
6.73	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de incertezas definida em Chueinta <i>et al.</i> (2000)	64

6.74	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de incertezas definida em Chueinta <i>et al.</i> (2000)	64
6.75	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de incertezas de 5% do valor da medição	64
6.76	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de incertezas de 5% do valor da medição	64
6.77	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de incertezas de 10% do valor da medição	65
6.78	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de incertezas de 10% do valor da medição	65
6.79	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de incertezas de 20% do valor da medição	65
6.80	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de incertezas de 20% do valor da medição	65
6.81	Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Análise Fatorial Ortogonal - CP - Rotação Varimax	66
6.82	Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Análise Fatorial Ortogonal - CP - Rotação Varimax	66
6.83	Gráfico comparativo para o Perfil 1	66
6.84	Gráfico comparativo para o Perfil 2	66
6.85	Gráfico comparativo para o Perfil 3	67
6.86	Gráfico comparativo para o Perfil 4	67
6.87	Gráfico comparativo para o Perfil 5	68
6.88	Gráfico comparativo para o Perfil 6	68
B.1	séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	97
B.2	séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 2	97
B.3	séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 3	97
B.4	séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 4	98
B.5	séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 5	98
B.6	séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 6	98
B.7	séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 1,5 - Fator 1	99
B.8	séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 1,5 - Fator 2	99
B.9	séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 1,5 - Fator 3	99
B.10	séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 1,5 - Fator 4	100
B.11	séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 1,5 - Fator 5	100
B.12	séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 1,5 - Fator 6	100

B.13 séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 3 - Fator 1	101
B.14 séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 3 - Fator 2	101
B.15 séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 3 - Fator 3	101
B.16 séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 3 - Fator 4	102
B.17 séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 3 - Fator 5	102
B.18 séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 3 - Fator 6	102
B.19 séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 9 - Fator 1	103
B.20 séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 9 - Fator 2	103
B.21 séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 9 - Fator 3	103
B.22 séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 9 - Fator 4	104
B.23 séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 9 - Fator 5	104
B.24 séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 9 - Fator 6	104
B.25 séries de incertezas com proposta ref. Polissar <i>et al.</i> (1998) de emissões simuladas sem outliers segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	105
B.26 séries de incertezas com proposta ref. Chueinta <i>et al.</i> (2000) de emissões simuladas sem outliers segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	105
B.27 séries de incertezas com proposta ref. Ito <i>et al.</i> (2004) de emissões simuladas sem outliers segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	105
B.28 séries de incertezas com proposta ref. Norris <i>et al.</i> (2014) de emissões simuladas sem outliers segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	106
B.29 séries de incertezas com proposta de 5% do valor de emissões simuladas sem outliers segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	106
B.30 séries de incertezas com proposta de 10% do valor de emissões simuladas sem outliers segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	106
B.31 séries de incertezas com proposta de 20% do valor de emissões simuladas sem outliers segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	106
B.32 séries de incertezas com proposta ref. Polissar <i>et al.</i> (1998) de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 1,5 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1 . .	107
B.33 séries de incertezas com proposta ref. Chueinta <i>et al.</i> (2000) de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 1,5 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1 . .	107

B.34 séries de incertezas com proposta ref. Ito <i>et al.</i> (2004) de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 1,5 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	107
B.35 séries de incertezas com proposta ref. Norris <i>et al.</i> (2014) de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 1,5 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	108
B.36 séries de incertezas com proposta de 5% do valor de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 1,5 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	108
B.37 séries de incertezas com proposta de 10% do valor de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 1,5 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	108
B.38 séries de incertezas com proposta de 20% do valor de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 1,5 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	108
B.39 séries de incertezas com proposta ref. Polissar <i>et al.</i> (1998) de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 3 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	109
B.40 séries de incertezas com proposta ref. Chueinta <i>et al.</i> (2000) de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 3 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	109
B.41 séries de incertezas com proposta ref. Ito <i>et al.</i> (2004) de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 3 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	109
B.42 séries de incertezas com proposta ref. Norris <i>et al.</i> (2014) de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 3 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	110
B.43 séries de incertezas com proposta de 5% do valor de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 3 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	110
B.44 séries de incertezas com proposta de 10% do valor de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 3 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	110
B.45 séries de incertezas com proposta de 20% do valor de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 3 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	110
B.46 séries de incertezas com proposta ref. Polissar <i>et al.</i> (1998) de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 9 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	111
B.47 séries de incertezas com proposta ref. Chueinta <i>et al.</i> (2000) de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 9 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	111
B.48 séries de incertezas com proposta ref. Ito <i>et al.</i> (2004) de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 9 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	111
B.49 séries de incertezas com proposta ref. Norris <i>et al.</i> (2014) de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 9 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	112
B.50 séries de incertezas com proposta de 5% do valor de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 9 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	112
B.51 séries de incertezas com proposta de 10% do valor de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 9 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	112
B.52 séries de incertezas com proposta de 20% do valor de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 9 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1	112

Lista de Tabelas

2.1	Fontes identificadas e sua participação para a formação de $MP_{2.5}$, na campanha de inverno de 1997 (Castanho e Artaxo (2001))	7
2.2	Fontes identificadas e sua participação para a formação de $MP_{2.5}$, na campanha de verão de 1998 (Castanho e Artaxo (2001))	8
2.3	Coefficientes de calibração sistema LFA EDXRF(Arana (2014))	11
4.1	Cargas fatoriais rotacionadas, solução com 6 fatores explicando 78,6% da variância da base de dados do estudo de dos Santos <i>et al.</i> (2014)	29
4.2	Matriz com perfis de fontes utilizadas para simulação	29
5.1	Matriz F - PMF	38
5.2	Matriz F - Original	38
5.3	Distâncias entre fatores	38
6.1	Limites de detecção mínimos - ng/m^3	42
6.2	Valores médios de Q Robusto e desvios padrões para propostas de incertezas aplicadas em bases simuladas sem outliers	68
6.3	Valores médios de Q Robusto e desvios padrões para propostas de incertezas aplicadas em bases simuladas com outliers - Dist. Exponencial média 1,5	69
6.4	Valores médios de Q Robusto e desvios padrões para propostas de incertezas aplicadas em bases simuladas com outliers - Dist. Exponencial média 3	69
6.5	Valores médios de Q Robusto e desvios padrões para propostas de incertezas aplicadas em bases simuladas com outliers - Dist. Exponencial média 9	69
6.6	Coefficiente de variação para Q Robusto nos cenários de simulação	69
6.7	Relação de grandeza entre os valores médios de <i>Q-Robusto</i> com base na referência Chueinta <i>et al.</i> (2000) para quatro situações de simulação	70

Capítulo 1

Introdução

No estudo de poluição do ar, uma das formas usadas para a identificação de fontes emissoras de poluentes é o modelo receptor. Este modelo consiste em identificar e quantificar a partir da análise de concentração dos elementos químicos existentes no material particulado retido no receptor – por exemplo um filtro – as diversas fontes emissoras de poluentes existentes em determinada região. O modelo receptor mais utilizado é o CMB (*Chemical Mass Balance*). O modelo CMB consiste em um sistema de equações que representam a conservação de massa entre o que foi emitido e o que foi captado, considerando que não houve reação química entre os elementos emitidos até atingir o receptor (Henry *et al.* (1984)). Para resolver esse sistema, quando não se tem conhecimento sobre os perfis das fontes, nem em que quantidade se apresentam na região estudada, pode-se utilizar, entre outros métodos, modelos multivariados. Neste trabalho será analisado o modelo PMF (*Positive Matrix Factorization*), que tem entre suas características principais a fatoração da matriz de dados no produto de duas matrizes com entradas positivas, e também a possibilidade de inserção de medidas de incertezas para cada elemento, de cada medição, propiciando o controle sobre a influência de dados *outliers* na fatoração.

1.1 Objetivos

O método PMF apresentado em Paatero e Tapper (1994) tem como característica importante, além de manter a restrição de positividade dos dados, a possibilidade de inserir a incerteza relacionada a cada variável medida para cada indivíduo. Neste trabalho será desenvolvido um estudo de sensibilidade do modelo em relação a essas incertezas no contexto de análise de fontes emissoras de poluentes. No Capítulo 2 é feita uma introdução sobre o contexto de estudo de fontes poluentes, emissoras de material particulado, e da motivação do uso do modelo PMF. Em seguida é apresentada a estrutura matemática do modelo PMF. Como a motivação deste trabalho é estudar o comportamento do método conforme são inseridas as incertezas de medição, também há uma seção para discutir sobre os procedimentos de preparação dos dados, e as principais fontes de incertezas. No Capítulo 3 é feito um resumo das principais funcionalidades dos programas EPA PMF 5.0 e ME-2, que foram os utilizados no desenvolvimento deste trabalho. No Capítulo 4 é feita a descrição da metodologia de simulação das bases de dados que foram utilizadas no estudo de sensibilidade da fatoração PMF. No Capítulo 5 são apresentados os detalhes técnicos de como foi feita a aplicação em série da fatoração PMF em cada uma das bases de dados simuladas utilizando o *software* ME-2, bem como a metodologia de identificação de perfis de fontes e de consolidação de resultados. No Capítulo 6 são apresentadas algumas das principais propostas de definição de incertezas presentes na literatura, e os resultados da aplicação da fatoração PMF nas bases de dados simuladas utilizando cada uma das propostas de definição de incertezas citadas. No Capítulo 7 são feitas algumas discussões sobre os resultados e apresentadas propostas para estudos futuros.

Capítulo 2

Conceitos

Consideremos X uma matriz de dados, em que cada linha representa uma observação, e cada coluna representa uma espécie química. Tais dados provêm de medições que geralmente são feitas através de um dispositivo receptor durante um determinado período – um dia por exemplo. O modelo receptor CMB consiste em um sistema de equações lineares que expressa a concentração dos elementos no receptor como uma soma de produtos entre os perfis das fontes (*source profiles*) e as contribuições das fontes (*source contributions*). Os perfis das fontes representam as proporções de massa ou concentração relativas a cada elemento emitido pela fonte, e as contribuições das fontes, a massa ou concentração emitida pela fonte que ele representa. Em outras palavras, o CMB representa cada observação com suas respectivas concentrações, como uma mistura de perfis de fontes, em que a contribuição de cada perfil na mistura é ponderada pela emissão de material que a fonte correspondente teve no período de medição. Podemos representar uma situação com m observações e n espécies químicas, e p fontes, usando a seguinte notação matricial:

$$X_{(m \times n)} = G_{(m \times p)} F_{(p \times n)}, \quad (2.1)$$

em que cada linha da matriz F representa um perfil de fonte, e as m linhas da matriz G representam as contribuições de cada fonte – em suas colunas – para as m observações.

Quando os perfis das fontes presentes são conhecidos, ou seja, a matriz F é conhecida, o problema é aproximar a matriz G , isto é, obter as contribuições em massa ou concentração de cada fonte em cada medição. Para isso pode-se usar diversos métodos, como o método de mínimos quadrados. Em [Henry *et al.* \(1984\)](#) é feita uma sumarização de possíveis abordagens de solução para esta situação. Quando não se conhece o número de fontes presentes, e nem quais são, temos um problema multivariado, em que as matrizes G e F são desconhecidas.

Existem diversas formas de se estimar as matrizes G e F . Duas formas muito conhecidas são a decomposição em valores singulares (SVD) e a Análise Fatorial ortogonal. Porém, estas duas formas de fatoração geram matrizes G e F com entradas não necessariamente não negativas. Quando o estudo em questão trata de medições de concentrações, quantidades negativas nem sempre têm algum significado (pode-se dizer que houve algum tipo de drenagem, mas em muitas situações esta possibilidade não existe).

Considerando tal restrição, um método que tem sido bastante utilizado em problemas de análises de poluentes nos quais se procura estimar as matrizes G e F do modelo CMB (2.1) apresentado acima, é o PMF, proposto em [Paatero e Tapper \(1994\)](#). Porém, ao estimar as matrizes G e F , consideramos que pode haver erros oriundos do método de estimação, e para incluir tais erros no modelo reescrevemos a equação (2.1) como,

$$X_{(m \times n)} = G_{(m \times p)} F_{(p \times n)} + E_{(m \times n)}, \quad (2.2)$$

incluindo a matriz E como a representação dos erros de estimação.

2.1 O Modelo PMF

PMF é uma ferramenta de análise fatorial que decompõe uma matriz de dados amostrais positivos no produto de duas matrizes. No contexto de análise de poluentes, podemos interpretar como uma matriz que caracteriza os perfis das fontes, e outra que caracteriza as contribuições em concentração em massa total de material particulado de cada fonte em cada período de medição. Estes perfis posteriormente precisam ser interpretados de acordo com os conhecimentos que se tem sobre a composição química do material emitido por fontes que existem na região de coleta. A seguir serão apresentadas algumas características mais gerais sobre o modelo e na seção seguinte detalhes sobre aspectos práticos.

2.1.1 A Função de perda

A aproximação dos valores de F e G é obtida através da minimização de uma função de perda. Nesta função impõe-se a restrição de não negatividade¹ aos elementos das matrizes, e inserem-se as incertezas (pesos) que estão relacionadas aos erros de medição. A função de perda é definida como:

$$Q = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \left[\frac{x_{ij} - \sum_{k=1}^p g_{ik} f_{kj}}{u_{ij}} \right]^2, \quad (2.3)$$

com $g_{ik} \geq 0$ e $f_{kj} \geq 0$

em que u_{ij} é a incerteza relativa ao elemento j na medição i . No caso da análise de elementos químicos, as incertezas u_{ij} podem variar de elemento para elemento, pois dependem do método de análise e do limite de detecção dos aparelhos utilizados. Há também o caso de valores faltantes, em que se define um método para fazer imputação e um método para obter a incerteza (peso) relativa a esse valor obtido artificialmente.

2.1.2 Incertezas das medições

A matriz com as incertezas u_{ij} deve ser definida como uma entrada do modelo. Existem diversos métodos para se obter a matriz de incertezas: um valor fixo para determinado elemento, ou uma fração da concentração, ou fórmulas que envolvam algum outro parâmetro e o limite de detecção dos equipamentos utilizados (Reff *et al.* (2007)). Como a estrutura da função de perda permite a inserção individual das incertezas para cada elemento da matriz de dados X , é possível definir estratégias para tratar dados *outliers*, pois quanto maior o valor da incerteza em relação à medição, menor influência o valor da medição terá no processo de minimização da função de perda, e consequentemente menor influência na definição dos valores das matrizes F e G .

2.1.3 Fatores: identificação e interpretação

O número de fatores, ou o posto p do modelo (2.2) geralmente é definido após diversas tentativas, até que se chegue a uma solução com fatores que contenham perfis de fontes que tenham algum sentido do ponto de vista físico. Ou seja, tendo conhecimento prévio do perfil de fontes emissoras de poluentes – proporção entre elementos químicos emitidos, ou quais são preponderantes em determinadas fontes – identificar entre as colunas de F quais seriam equivalentes às fontes conhecidas. Diferentemente do modelo fatorial baseado na covariância dos dados, no modelo PMF não existe hierarquia entre os fatores, que também não são necessariamente ortogonais. Segundo Paatero e Tapper (1994), em ciências físicas os fatores raramente são ortogonais, embora no contexto de análise de poluentes seja comum assumir que as fontes emissoras sejam independentes, e dessa forma, utilizar a Análise Fatorial Ortogonal, como foi feito em dos Santos *et al.* (2014). Assim

¹Notemos que embora o nome da fatoração seja Fatoração em Matrizes Positivas ou *Positive Matrix Factorization* em inglês, a restrição na definição do modelo é de não negatividade (vide Paatero e Tapper (1994)).

como no modelo de análise fatorial, em que o número de fatores retidos geralmente depende de uma estratégia – no caso, analisam-se os autovalores da matriz de correlação, e os fatores relacionados com os autovalores maiores que 1 são retidos, ou a análise do *scree plot* com os autovalores – alguns autores também definem uma estratégia para se ter um palpite inicial sobre o número de fatores no modelo PMF. Uma estratégia que é citada em [Reff et al. \(2007\)](#), é analisar o valor de Q em (2.3). Procura-se definir inicialmente o número de fatores de maneira que ao se obter um valor de mínimo para a função de perda (2.3), este seja aproximadamente $m.n$. Entretanto, veremos mais adiante que conforme mudamos o método usado para calcular as incertezas das medições, esse número tem uma variação muito grande, de modo que a eficácia de tal estratégia se torna questionável.

2.2 Considerações sobre a aplicação do modelo PMF

Embora o objetivo deste trabalho seja a análise do comportamento do modelo de acordo com os dados inseridos, alguns detalhes sobre questões práticas são importantes para facilitar o entendimento da aplicação do modelo. Detalhes sobre os métodos numéricos e *softwares* disponíveis para realizar os cálculos e a análise prévia dos dados serão discutidos nesta seção.

2.2.1 Métodos para obtenção da fatoração PMF

O modelo PMF é totalmente determinístico. Se não existissem os erros atribuídos às medições, as matrizes G e F determinariam a matriz X ($X = GF$) "correta". Porém, considerando que existam os erros de medição E , a matriz X que obteremos ($X = GF + E$) será uma aproximação da matriz que seria a matriz "correta". Existem diversos métodos numéricos para a minimização da função de perda (2.3), e segundo [Ramadan et al. \(2003\)](#), conforme o algoritmo usado é possível obter resultados diferentes. Esses métodos dependem de um ponto inicial, que pode fazer o algoritmo chegar a um ponto de mínimo local, não definindo assim a fatoração GF que gera a melhor aproximação de X . É importante notar, que a função de perda pode não ter apenas um ponto de mínimo local, o que pode levar a diversos resultados dependendo do ponto inicial escolhido. Segundo [Norris et al. \(2014\)](#) seção 1.1, o procedimento recomendado para aumentar a chance de se obter o ponto de mínimo global da função de perda, é aplicar o método 20 vezes para se obter uma solução inicial e 100 vezes para uma solução final, sempre iniciando o método em um ponto diferente.

O *software* utilizado neste estudo é o EPA PMF 5.0, desenvolvido pela U.S Environment Protection Agency, ([Norris et al. \(2014\)](#) e [Norris et al. \(2009\)](#)), que utiliza o software Multilinear Engine - ME-2, desenvolvido por Pentti Paatero em [Paatero \(1999\)](#) para o cálculo da fatoração GF .

No contexto de análise de poluentes, a fatoração apresentada até aqui é comumente referida como PMF (*Positive Matrix Factorization*), mas também é conhecida em outros contextos como por exemplo, bioinformática ([Wang et al. \(2006\)](#)) e classificação de documentos ([Shahnaz et al. \(2006\)](#)) por NMF (*Non-negative matrix factorization*). Em ([Lee e Seung \(1999\)](#)) foi apresentado um algoritmo muito usado para se obter a fatoração em estudo, onde também são apresentadas referências sobre aplicações. Embora existam diversos tipos de problemas para os quais é possível aplicar essa fatoração, em poucos as incertezas relacionadas às medições são inseridas no modelo. Em [Wang et al. \(2006\)](#) é apresentada uma modificação do algoritmo proposto em [Lee e Seung \(1999\)](#) para se considerar as incertezas no algoritmo de aproximação das matrizes G e F .

2.2.2 Preparação dos dados

Inicialmente, todas as variáveis – elementos químicos – da base de dados coletada são consideradas, e em seguida é feita uma análise para decidir quais variáveis serão utilizadas no modelo. A escolha das variáveis e as incertezas associadas a elas dependem do objetivo do estudo e da qualidade dos dados. A seleção prévia das variáveis pode facilitar a interpretação da solução final do modelo. Geralmente alguns itens são analisados previamente, listamos alguns dos principais descrevendo os seus objetivos:

- *Relevância das variáveis (espécies químicas)*: verificar se há associação entre as variáveis, e se determinada variável é indicativa de algumas das fontes de interesse no estudo;
- *Duplicação das medidas*: verificar a presença de espécies redundantes, como enxofre e sulfatos (que contém enxofre);
- *Dados faltantes*: como o modelo requer que todos os dados da matriz sejam preenchidos, é preciso definir de antemão como tratar os casos de dados faltantes. Três propostas podem ser consideradas:
 1. Excluir a observação na qual a medida da variável não está disponível. Esse procedimento é feito quando espécies químicas de grande importância, ou muitas espécies estão faltando para uma determinada observação;
 2. Retirar a espécie da análise. Isso geralmente é feito quando um percentual grande de dados não estão disponíveis para tal espécie;
 3. Definir uma estratégia de inserção artificial para os dados faltantes, e associar a estes dados artificiais incertezas grandes. As estratégias mais comuns de imputação são usar a média aritmética, geométrica ou ainda a mediana da variável;
- *Dados abaixo do limite de detecção*: cada espécie química pode ter um limite de detecção diferente, que depende do método utilizado para medir a concentração. Veremos adiante alguns detalhes sobre determinação dos limites de detecção. Assim como no caso de dados faltantes, medidas abaixo do limite de detecção são substituídos ou manipulados de acordo com alguma estratégia de imputação que está relacionada com o método adotado para determinar as incertezas de cada espécie química;
- *Qualidade dos dados*: analisar as incertezas se não são muito grandes em relação às medidas das variáveis (*signal-to-noise ratio*), ou se há contaminação nas medidas dos elementos. Espécies com resíduos escalonados $((x_{ij} - g_{ik}f_{kj})/u_{ij})$ com valores muito grandes ou distribuídos de uma forma não normal, ou com grandes desvios, são indícios de um ajuste pobre para a espécie química.

Maiores detalhes podem ser encontrados em [Reff *et al.* \(2007\)](#) e [Polissar *et al.* \(1998\)](#).

2.2.3 Outliers e $Q_{robusto}$

Na Seção 2.1.2, falamos sobre a possibilidade de definir estratégias para tratar dados *outliers*, controlando sua importância ou peso na definição do resultado. Apesar de as matrizes de medições e a matriz com suas respectivas incertezas poderem ser manipuladas antes de serem inseridas no modelo, um controle é implementado durante processo de minimização da função de perda. Determina-se um parâmetro α que é chamado de distância-outlier, em que é determinado o tamanho máximo do resíduo escalonado. Seja o resíduo:

$$e_{ij} = x_{ij} - g_{ik}f_{kj}. \quad (2.4)$$

Uma função de perda alternativa é definida da seguinte forma:

$$Q_{robusto} = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \left(\frac{e_{ij}}{h_{ij}u_{ij}} \right)^2, \quad (2.5)$$

em que

$$\text{se } |e_{ij}/u_{ij}| > \alpha \quad \text{então} \quad h_{ij} = |e_{ij}/u_{ij}|/\alpha$$

$$h_{ij} = 1 \quad \text{caso contrário.}$$

No modo robusto o algoritmo minimizará a função $Q_{robusto}$ ao invés da Q .

2.3 Considerações sobre métodos de medição de concentração de espécies químicas no contexto de análise de poluentes

Com o objetivo de entender como se formam as incertezas durante o processo de coleta e medição, para posteriormente fazer um estudo de sensibilidade do método PMF, parte deste trabalho foi dedicado ao estudo das metodologias analíticas usadas para obtenção dos dados. Nesta seção será feito um resumo destes processos.

Começamos descrevendo os tipos de materiais particulados atmosféricos estudados, que geralmente são de dois grupos: o de diâmetro aerodinâmico entre 2.5 e 10 μm chamado de material particulado grosso, e o de diâmetro aerodinâmico inferior a 2.5 μm , chamado de material particulado fino. O interesse nesses dois tipos existe por serem inaláveis, e consequentemente por serem potenciais causadores de problemas de saúde. No trabalho de [dos Santos Junior \(2015\)](#) é feita uma descrição mais detalhada sobre as propriedades físicas e químicas de aerossóis atmosféricos, e dos processos de emissão destes na atmosfera. Os amostradores são filtros que são acoplados a uma bomba de sucção, que durante um determinado período de tempo, geralmente de 24 horas, filtra um volume determinado de ar. Uma amostra de controle de amostradores sem uso geralmente é separada – do mesmo lote dos que serão usados na amostragem – para poder medir a contaminação destes filtros que ainda estão em “branco”, – pois isso afeta a medição – e posteriormente subtrair a média da concentração dos elementos presentes no amostrador em “branco” das amostras finais. Nem todas as espécies químicas são medidas através de um mesmo método, ou equipamento. Neste trabalho nos restringiremos à descrição do método de Fluorescência de Raios-X(EDXRF), pois através dele é possível quantificar grande parte dos elementos químicos de interesse na análise de poluentes. No trabalho de [Oyama \(2010\)](#) há uma descrição detalhada sobre outros métodos de quantificação de espécies químicas. Há também casos em que as medições são feitas com dois ou três filtros num mesmo local de interesse. Após a análise, considera-se o desvio da medição entre eles como mais uma medida de incerteza do processo, geralmente relacionada ao processo de manipulação dos amostradores e fatores de campo.

2.3.1 Elementos traçadores

Como dito na Seção 2.2.2, sobre o tratamento dos dados, um dos fatores a se considerar é a relevância das variáveis medidas. A caracterização de uma fonte emissora de poluente se dá pela identificação de determinados elementos químicos que ela emite conjuntamente, e em proporções específicas. Esse conjunto de informações é chamado de assinatura da fonte, ou perfil da fonte. Os elementos químicos dos componentes desta assinatura, são chamados de traçadores. Seguem abaixo alguns exemplos extraídos da compilação feita no trabalho de [Oyama \(2010\)](#) de estudos realizados em São Paulo:

Tabela 2.1: Fontes identificadas e sua participação para a formação de $MP_{2.5}$, na campanha de inverno de 1997 ([Castanho e Artaxo \(2001\)](#))

Fator	Elementos-Traço	Fonte Identificada	Participação(%)
1	Al, Si, Ca, Ti e Fe	Solo	20
2	Cu, BC e Pb	Emissões Veiculares	28
3	S, $MP_{2.5}$ e K	Sulfatos	23
4	V e Ni	Queima de óleo combustível	18
5	Zn, Pb, e Mn	Emissões Industriais	5
6	Ti, Ca, Mn, e Fe	Solo 2	5

Tabela 2.2: Fontes identificadas e sua participação para a formação de $MP_{2.5}$, na campanha de verão de 1998 (Castanho e Artaxo (2001))

Fator	Elementos-Traço	Fonte Identificada	Participação(%)
1	Ca, Ti, Si e Fe	Solo	30
2	Zn, Mn e Pb	Emissões Industriais	6
3	S, $MP_{2.5}$ e K	Sulfatos	17
4	BC e Cu	Emissões Veiculares	24
5	Ni e Mn	Queima de óleo combustível	21

Nas Tabelas 2.1 e 2.2, nas colunas “Elementos-Traço” estão agrupados os elementos químicos presentes nas amostras que foram utilizadas para identificar cada tipo de fonte presente no local de estudo. Notemos que um mesmo tipo de fonte, como por exemplo “solo”, pode ter elementos traçadores diferentes dependendo das características da região onde é realizado o estudo.

A agência de proteção ambiental dos Estados Unidos, EPA (*Environment Protection Agency*), mantém em seu *website* uma base de dados com um inventário de diversos perfis de fontes já identificados nos EUA. Esta base de dados se chama “SPECIATE”, e atualmente está na versão 4.4. São possíveis consultas *online*, com filtro por categoria de fontes de poluentes, como por exemplo, por compostos orgânicos voláteis (VOC – *Volatile Organic Compound*), por perfis de fontes em materiais particulados (PM – *Particulate Matter*), ou fazer a busca por uma espécie química específica nas diversas fontes poluentes que ela possa compor (Figura 2.1). Também é possível fazer *download* do banco de dados inteiro no formato MS Access, caso seja necessário manipular essas bases de dados.

Figura 2.1: Menu SPECIATE - EPA Fonte: <https://cfpub.epa.gov/si/speciate/>

A Figura 2.2 mostra o perfil de *Light Duty Vehicles*, com os percentuais em massa de cada espécie química desta fonte, bem como a incerteza relacionada a cada espécie medida.

Browse Details				
Profile Information				
Number	3123010 Add to Cart			
Name	Light Duty Vehicles - Composite			
Master Pollutant	PM			
Region				
Controls	Uncontrolled			
Notes	Developed from profiles 31101 and 31201.			
Test Year				
Entry Date	Jan 05, 1989			
Version	SPECIATE 3.2			
Particle Size Range	0 µm to 10 µm			
Name	Weight %	Uncertainty %	Analytical Method	Uncertainty Method
Aluminum (Al)	0.054	0.009	Not Available	N/A
Bromine Atom (Br)	2.733	0.458	Not Available	N/A
Calcium (Ca)	0.057	0.009	Not Available	N/A
Chlorine atom (Cl)	1.8	0.301	Not Available	N/A
Copper (Cu)	0.009	0.002	Not Available	N/A
Elemental Carbon (EC)	5.933	0.994	Not Available	N/A
Iron (Fe)	0.12	0.02	Not Available	N/A
Lead (Pb) [HAPS]	7.033	1.178	Not Available	N/A
Manganese (Mn) [HAPS]	0.005	0.001	Not Available	N/A
Nickel (Ni) [HAPS]	0.005	0.001	Not Available	N/A
Organic carbon (OC)	23.733	3.975	Not Available	N/A
Phosphorus (P) [HAPS]	0	-99	Not Available	N/A
Potassium (K)	0.015	0.002	Not Available	N/A
Silicon (Si)	0.195	0.033	Not Available	N/A
Sulfate (SO4=)	16.737	2.803	Not Available	N/A
Zinc (Zn)	0.034	0.006	Not Available	N/A

[EPA Home](#) | [Privacy and Security Notice](#) | [Contact Us](#)

Figura 2.2: Perfil SPECIATE - Light Duty Vehicles - Composite - Fonte: <https://cfpub.epa.gov/si/speciate/>

Embora seja uma base de dados com muita informação, em muitos casos os métodos analíticos usados para a medição das espécies e a metodologia para auferir a incerteza não estão disponíveis, como podemos notar na Figura 2.2. Ainda sobre o “SPECIATE”, em alguns perfis a soma do percentual das massas das espécies químicas não somam 100, pois conforme dito anteriormente, pode haver repetição de um mesmo elemento químico em duas espécies químicas que foram medidas usando métodos diferentes, o que gera redundância. A documentação completa desta base de dados pode ser encontrada em Kosusko (2014).

2.3.2 Incertezas analíticas

A literatura se refere à incerteza analítica como toda medida de incerteza que é relacionada ao dispositivo, ou método de medição da concentração de uma espécie química. Para um mesmo método, como é o caso de Fluorescência de Raios-X (EDXRF – do inglês *Energy Dispersive X-ray Fluorescence*), a incerteza pode variar de elemento para elemento. Como grande parte dos elementos químicos usados para identificar as fontes de poluentes podem ser medidos através do método EDXRF, nesta seção apresentaremos alguns aspectos técnicos deste método, e algumas fontes de incertezas relacionadas a ele.

Existe uma extensa teoria sobre os raios X, e suas interações com a matéria. O que vamos expor é apenas a ideia básica de parte desta teoria, baseada na síntese feita por Arana (2014), que tem relação com o método em questão, com o objetivo de identificar como as incertezas de medição podem surgir.

Os raios X são ondas eletromagnéticas, assim como os raios de luz visíveis, carregadas por partículas chamadas fótons, que possuem energia da mesma ordem de magnitude das energias de ligação dos elétrons nas camadas internas de um átomo. Quando os raios X incidem sobre a matéria um dos resultados é a fluorescência, que é de interesse do método EDXRF. A fluorescência depende da espessura, densidade e composição do material e também da energia dos raios X incidentes.

O raios X podem ser ajustados para ter a energia característica da camada atômica de interesse

de um determinado elemento. Ao ser direcionado à amostra contendo o elemento químico de interesse, o fóton pode ser absorvido por um elétron da camada interna do átomo, e este será expulso deixando o átomo em uma situação de instabilidade. A situação de estabilidade é retomada quando um elétron de uma camada mais externa, este com mais energia, assume a posição do primeiro elétron, que foi expulso. A energia excedente deste elétron mais externo pode ser dissipada em forma de fluorescência, ou seja, um raio X característico do elemento, como ilustrado na Figura 2.3. É importante notar que nem sempre esse processo é preciso.

Figura 2.3: Incidência de raio X característico fonte:
http://www.handheldxrf.com.au/technology_handheld_xrf.php

Conforme vemos na Figura 2.4, os raios X emitidos são captados por um detector que faz a contagem dos fótons emitidos em um período de tempo fixo, e a partir dessa contagem é possível medir a quantidade de cada elemento químico presente na amostra. É importante notar que não são todos os elementos químicos que o método EDXRF é capaz de medir.

Figura 2.4: EDXRF fonte:
<http://www.horiba.com/scientific/products/x-ray-fluorescence-analysis/tutorial/xrf-spectroscopy/>

Baseando-se em quantidades conhecidas de elementos químicos em um recorte com área determinada do filtro amostrador (padrões), obtêm-se pontos com valores registrados pelo detector, em contagens de fótons, de acordo com a quantidade do elemento presente no padrão. Aqui vale notar, que mesmo essas quantidades conhecidas apresentam uma determinada incerteza.

Então é feito o ajuste de uma reta sobre estes pontos, obtendo-se um gráfico com a concentração por área no eixo x, e no eixo y, o valor da intensidade em contagens por segundo. Na Tabela 2.3 é apresentado um exemplo dos valores de calibração do dispositivo de EDXRF, do Laboratório de Física Atmosférica da Universidade de São Paulo (LFA/IFUSP) obtidos para o trabalho de Arana (2014).

Notemos que os valores da coluna *Incerteza Relativa* da Tabela 2.3 são obtidos a partir da

Tabela 2.3: *Coefficientes de calibração sistema LFA EDXRF(Arana (2014))*

Elemento	Coefficientes de calibração(cps mA ng ⁻¹ cm ²)	Incerteza relativa(%)
Na	7,18E-05 ± 2,59E-06	3,61
Mg	1,39E-04 ± 3,66E-06	2,63
Al	1,79E-04 ± 4,84E-06	2,70
Si	3,48E-04 ± 1,32E-05	3,79
P	4,86E-04 ± 2,29E-05	4,71
S	1,60E-03 ± 4,04E-05	2,53
Cl	2,54E-03 ± 1,02E-04	4,02
K	4,70E-03 ± 8,38E-05	1,78
Ca	1,99E-03 ± 5,47E-05	2,75
Ti	1,42E-03 ± 2,93E-05	2,06
V	1,80E-03 ± 4,50E-05	2,50
Cr	2,50E-03 ± 6,27E-05	2,51
Mn	4,34E-03 ± 1,25E-04	2,88
Fe	5,35E-03 ± 1,27E-04	2,37
Ni	8,23E-03 ± 2,06E-04	2,50
Cu	9,22E-03 ± 1,89E-04	2,05
Zn	1,16E-02 ± 3,02E-04	2,60
Br	7,93E-03 ± 2,81E-04	3,54
Rb	1,04E-02 ± 1,48E-05	0,14
Pb	2,20E-03 ± 4,49E-05	2,04

margem de variação proveniente do ajuste dos coeficientes de calibração, em que cada valor de incerteza relativa é a porcentagem da margem em relação ao coeficiente. Essa medida de incerteza é tomada como incerteza analítica do método de medição.

2.3.3 Limites de Detecção

No processo de medição dos elementos, é preciso considerar a quantidade mínima que os métodos podem detectar. Como o método EDXRF é usado para detectar a maioria dos elementos traçadores – partir do número atômico 11, elemento Na – e por ele apresentar a peculiaridade de ter variação de elemento a elemento, tanto nas incertezas quanto no limite de detecção mínimo, vamos nos ater a continuar a descrição deste método.

O limite de detecção no método EDXRF depende diretamente do ruído que o dispositivo produz quando o ajuste da medição para um determinado elemento é feita a partir de um filtro em branco. A medida deste ruído é também chamada de *background*, fundo ou *continuum*. Portanto, o limite de detecção pode variar de acordo com a amostra de controle de filtros em branco.

Existem diferentes abordagens para calcular o limite de detecção a partir do *background*. No trabalho de Arana (2014) foi calculado como sendo 3 vezes a raiz quadrada da razão do *background*, r_b , pelo tempo, t_b , de medição aplicado em cada elemento em particular:

$$LD = \frac{3}{S} \sqrt{\frac{r_b}{t_b}}, \quad (2.6)$$

em que S é a sensibilidade resultante do número de contagens por segundo, Figura 2.5.

Uma outra maneira para se aproximar o limite de detecção, é obter um número suficientemente grande de amostras, e fazer uma análise gráfica. Medindo algumas vezes uma mesma observação, espera-se uma variação de resultados. Conforme a concentração diminui, e se aproxima do limite de detecção, os desvios tendem a se estabilizar, determinando assim um parâmetro para estimar o limite de detecção.

Figura 2.5: Sensibilidade elementar em função dos elementos químicos contidos nos padrões fabricados pela MicroMatter Arana (2014)

Em Gieken e Markowicz (2002), Capítulo 5, é feita uma discussão mais detalhada sobre a aproximação do limite de detecção, levando em conta detalhes do procedimento.

A Figura 2.6 apresenta um exemplo de espectro ajustado pelo programa WinQxas, ilustrando os picos de contagem acima do *background*.

Figura 2.6: WinQxas – Espectro típico gerado por EDX. Fonte: Oyama (2010)

Capítulo 3

Os programas EPA PMF 5.0 e ME-2

Como dito na Seção 2.2.1, o *software* usado para o estudo da fatoração PMF foi o EPA PMF 5.0, que por sua vez usa o *software* Multilinear Engine 2 – ME-2. Ambos operam no ambiente do sistema operacional Microsoft Windows. Basicamente, todos os resultados do program da EPA, são calculados pelo ME-2. Porém, o ME-2 é um programa em que suas configurações são feitas via arquivos de *script*. O arquivo de entrada tem de ser montado com um formato específico em texto, e os arquivos de saída também são arquivos de texto, sem gráficos, ou outros recursos visuais que facilitem a interpretação dos resultados pelo usuário. Toda a execução é feita via linha de comando. Esse modo de operação torna a sua utilização pouco prática.

O EPA PMF 5.0 é uma interface gráfica que faz com que a operação fique mais ágil. A definição da entrada das matrizes de dados pode ser feita apontando para planilhas eletrônicas, e os resultados também são montados em planilhas eletrônicas. Há uma gama de recursos gráficos para análise prévia e preparação dos dados (Menu *Model Data*), como dito na Seção 2.2.2, cujos detalhes vamos expor mais adiante. Para a análise dos resultados (Menu *Base Model*), também existem diversos recursos, como gráficos que facilitam a identificação dos perfis das fontes, a visualização do comportamento da série de tempo do modelo predito, e histogramas com a distribuição dos resíduos por variável. O ME-2 implementa também recursos para a análise da qualidade da solução, como reamostragens (*bootstrap*) de um subconjunto dos dados, e recursos para exploração de ambiguidades rotacionais, que não serão explorados neste trabalho, embora mais adiante façamos uma breve exposição destes recursos que acompanham a interface EPA PMF 5.0.

3.1 Recursos do EPA PMF 5.0

Nesta seção será feita a exposição de alguns dos recursos do EPA PMF 5.0 com o objetivo de ilustrar as funções que ele indiretamente opera do motor de fatoração ME-2 (Multilinear Engine 2).

3.1.1 Model Data

A interface inicial, “Model Data”, Figura 3.2 é a de entrada de dados, onde o usuário define as planilhas com as matrizes de dados e incertezas. No lugar da matriz de incertezas também é possível inserir parâmetros para que as incertezas sejam calculadas como uma função – pré-definida pelo programa – dos valores das medidas e do limite de detecção u_{ij} de cada espécie química (equação 3.1),

$$u_{ij} = \begin{cases} (5/6) \times LD_j & \text{se } x_{ij} < LD_j, \\ \sqrt{(Perc_j \times x_{ij})^2 + (0,5 \times LD_j)^2} & \text{se } x_{ij} \geq LD_j, \end{cases} \quad (3.1)$$

em que LD_j é o limite de detecção da j -ésima espécie química, e $Perc_j$ é a porcentagem da medição da j -ésima espécie química. A Figura 3.1, ilustra a forma como os parâmetros devem ser definidos na planilha que é inserida no lugar da matriz de incertezas. A primeira linha deve conter o nome

das espécies químicas medidas, na segunda linha os respectivos limites de detecção (LD_j). A terceira linha deve conter a porcentagem da medição ($Perc_j$) da respectiva espécie química, conforme descrito em (3.1).

	A	B	C	D	E
1	BOD ₅	TSS	NH ₃	TP	Cd
2	5	20	5	0.2	0.00005
3	10	10	10	10	10
4					

Figura 3.1: Matriz com parâmetros para calcular incertezas segundo formula pré definida em EPA PMF 5.0

Nesta interface também é possível definir um número marcador para dados faltantes e optar pelas duas estratégias de tratamento para estes: excluir toda a observação da análise ou fazer a imputação com a mediana da variável para a qual o dado está faltando. Estão disponíveis também outros recursos, como o tipo de arquivo de saída, o nome padrão deste, e ao se optar por mais de uma execução do método variando o ponto inicial, escrever apenas a execução com o menor valor de mínimo para a função de perda dentre todas as execuções no arquivo de saída, ou todos os resultados não apenas o de menor valor.

Figura 3.2: Interface de entrada de dados EPA PMF 5.0 Fonte: Norris et al. (2014)

Após os dados serem inseridos, algumas estatísticas descritivas e modos gráficos são disponibilizados, juntamente com alguns recursos para manipular os dados antes de aplicar a fatoração. Na Figura 3.3, são exibidas as espécies químicas inseridas para a análise. Entre as estatísticas descritivas, vale notar o S/N - *Signal to Noise Ratio*. Essa estatística fornece uma medida de quanto de ruído as medições de uma determinada espécie química é composta (considerando as incertezas dadas a cada observação). O cálculo desta quantidade para uma variável é feito da maneira a seguir.

Seja:

$$d_{ij} = \left(\frac{x_{ij} - u_{ij}}{u_{ij}} \right) \quad \text{se } x_{ij} > u_{ij}$$

$$d_{ij} = 0 \quad \text{se } x_{ij} \leq u_{ij}. \quad (3.2)$$

Usando (3.2) calculamos:

$$\left(\frac{S}{N}\right)_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^m d_{ij}. \quad (3.3)$$

Pela equação (3.2) podemos ver que quanto mais próximo de x_{ij} a sua incerteza u_{ij} estiver, mais próxima de zero a contribuição de x_{ij} será em seu S/N . Segundo [Norris et al. \(2014\)](#), espécies com S/N maiores que 1 tem um “bom” sinal. Na Figura 3.3, podemos ver opções *Bad*, *Weak* e *Strong*. Por padrão o programa define todas como *Strong*, e cabe ao usuário, conforme julgue necessário mudar esta marcação para cada variável, afetando assim o valor das incertezas originalmente atribuídas a cada observação da variável. Quando a marcação é alterada para *Weak*, o programa *triplica* a incerteza original, quando é alterada para *Bad*, a variável é *excluída* da amostra. A opção *Total Variable (Defaults to Weak)* é usada quando a massa total do material particulado é inserido no modelo como uma espécie química. Esta opção automaticamente muda a variável selecionada para tipo *Weak*. A discussão sobre a aplicação desta opção foge ao escopo deste trabalho, mais informações podem ser encontradas na seção *Data Preparation* de [Reff et al. \(2007\)](#). Há ainda a opção *Extra Modeling Uncertainty (0-100%)*, que se atribuída uma porcentagem acima de zero, soma a todas as incertezas de todas as variáveis, uma porcentagem da medição de cada variável, como na equação (3.4) abaixo:

$$u(\text{total})_{ij} = u_{ij} + x_{ij} * \text{percentual} \quad (3.4)$$

Figura 3.3: Interface de análise da qualidade dos dados EPA PMF 5.0 Fonte: [Norris et al. \(2014\)](#)

Recursos gráficos com a possibilidade de cruzamento de variáveis para análise de correlação ou observação da série de tempo das variáveis para verificação de eventos aberrantes (e a possibilidade de exclusão destes períodos) estão disponíveis em *Concentration Scatter Plot* e *Concentration Time Series*, Figura 3.4.

Figura 3.4: Concentration Scatter Plot e Concentration Time Series EPA PMF 5.0 Fonte: Norris et al. (2014)

Base Model/ Base Model Runs

Após realizar a análise preliminar dos dados, em *Base Model/Base Model Runs*, Figura 3.5, é possível ajustar os três parâmetros que são necessários para executar a fatoração: o número de rodadas de fatoração que o usuário deseja realizar variando o ponto inicial do algoritmo, o número de fatores, ou seja, p em (2.3), deixar que o programa escolha aleatoriamente um número inicial para as sementes do algoritmo, ou fixar um em particular com o propósito de repetir o experimento.

Figura 3.5: Menu Base Model Runs

3.1.2 Base Model/ Base Model Results

Os resultados são disponibilizados após a execução do processo na opção *Base Model Results* à direita de *Base Model Runs*. Ao selecionar esse menu é possível analisar o histograma da distribuição

dos resíduos de cada variável, escalonados pelas incertezas destas, e também a distribuição geral dos resíduos escalonados na opção *Residual Analysis*, Figura 3.6 à esquerda. Na opção *Obs/Pred Scatter Plot*, é possível verificar a dispersão dos resultados em relação aos dados inseridos. O programa ajusta um modelo de regressão, fornece as estatísticas da regressão, e exibe um gráfico um-para-um e a reta da regressão para facilitar a percepção de ajuste do modelo, Figura 3.6 à direita.

Figura 3.6: *Residual Analysis e Obs/Pred Scatter EPA PMF 5.0*

A opção *Obs/Pred Time Series* apresenta o gráfico da série de tempo predita pelo modelo para cada variável, e a compara com a original, para que o pesquisador possa verificar a aderência do resultado do modelo, Figura 3.7.

Figura 3.7: *Obs/Pred Time Series EPA PMF 5.0*

Em *Profiles/Contributions* é possível identificar o perfil do fator selecionado na seção superior, marcada com (1). As barras em azul representam a concentração de cada espécie no fator selecionado, a medida está em notação científica no eixo esquerdo do gráfico, os quadrados em vermelho representam, da massa total de cada espécie química, o quanto em porcentagem esta massa está distribuída no fator selecionado. Neste menu também há um gráfico na seção inferior, marcada com (2), da série de tempo das contribuições de cada fator. Notemos que esta série está normalizada pela média, portanto terá média um, Figura (3.8).

Figura 3.8: Profiles/Contributions EPA PMF 5.0 Fonte: Norris et al. (2014)

No menu *Factor Fingerprints* o pesquisador pode analisar quanto em porcentagem de massa de cada espécie química está distribuída entre os fatores, Figura 3.9.

Figura 3.9: Profile Contribution EPA PMF 5.0 Fonte: Norris et al. (2014)

No menu *G-Space Plot* o pesquisador pode analisar a relação entre as contribuições de dois fatores, Figura 3.10. Também segundo Norris et al. (2014), quanto mais amostras com contribuições com valor zero, menos ambiguidade existe na solução, assim neste gráfico é possível averiguar essa hipótese.

Figura 3.10: *G-Space Plot EPA PMF 5.0*

No menu *Factor Contribution* é exibido um gráfico de setores, Figura 3.11, para cada espécie química da análise. Neste gráfico o pesquisador pode analisar a contribuição de cada fator na massa/concentração total medida de cada espécie química.

Figura 3.11: *Factor Contributions EPA PMF 5.0*

O último menu da seção *Base Model Results* é o *Diagnostics*, onde o pesquisador pode encontrar estatísticas e comparativos entre os resultados de cada execução, Figura 3.12.

Figura 3.12: Diagnostics EPA PMF 5.0

3.1.3 Base Model / Error Estimates

Na Figura 3.5, podemos encontrar a seção *Error Estimation*, onde o pesquisador pode executar os módulos *Base Model Displacement Method* (DISP), *Base Model Bootstrap Method* (BS) e *Base Model BS-DISP Method* que é uma combinação dos dois anteriores. Esses métodos podem ser utilizados para que o pesquisador faça uma verificação da qualidade dos dados inseridos, analisando a variabilidade de soluções que esses métodos geram fazendo relaxamento do valor de Q , no caso do método DISP, e reamostragens aleatórias de blocos dos dados inseridos no caso BS, de modo que algumas observações se repitam e outras sejam descartadas nessa “nova” amostra.

3.1.4 Base Model / Base Model Displacement Results

O método DISP explora possíveis ambiguidades da solução. Este método pode ser aplicado após obter as matrizes G e F e o respectivo valor Q -mínimo para a função de perda (2.3), resultantes da fatoração de uma matriz de dados X . A proposta do método é fixar uma determinada entrada na matriz F e minimizar a função (2.3) com esta restrição – aceitando que o novo valor de Q -mínimo terá acréscimos – e analisar o comportamento das matrizes novas G e F . Executando este procedimento, existe a possibilidade de haver intercâmbio entre as posições iniciais dos fatores, e a ocorrência ou não destes intercâmbios segundo Norris *et al.* (2014), seção 5.7, é um indicador de estabilidade da solução do PMF.

Para executar o método DISP, basta escolher o “run” desejado na seção *Error Estimation*, *Base Model Displacement Method*, Figura 3.5. Ao final da execução, o menu *Base Model DISP Results* aparecerá ao lado de *Base Model Results*. Este método consiste em encontrar os valores máximos e mínimos para cada elemento f_{kj} da matriz F , que representa o perfil de cada fonte, de modo que o valor de Q -mínimo obtido inicialmente para o “run” selecionado, aumente no máximo de um certo valor pré-determinado.

Seja a notação $Q(f_{kj} = d)$ a menor soma de quadrados em (2.3), restringindo o elemento f_{kj} a um valor d viável. Minimizando a função (2.3) para todas outras componentes de G e F com essa restrição, o valor Q -disp obtido será maior que o Q -mínimo obtido inicialmente, assumindo que a solução associada a Q -mínimo é um valor de mínimo global. A diferença $dQ = Q(f_{kj} = d) - Q$ -mínimo é determinada de antemão, sendo uma restrição para o modelo. Então, o método buscará valores máximos e mínimos para d , tal que o valor dQ não exceda o valor pré-determinado citado anteriormente. No *software* EPA PMF 5.0, é feito o cálculo para quatro valores de $dQ = 4, 8, 16$ e

32. Detalhes sobre a implementação do método foge ao escopo deste estudo e podem ser encontrados em [Paatero et al. \(2014\)](#).

Após a execução do método, dois menus são disponibilizados, *DISP Box Plots*, Figura 3.13, onde é apresentado um gráfico indicando a variação máxima e mínima de cada espécie química do modelo, em relação ao valor da solução encontrada para o “run” selecionado, e o menu *DISP Summary* que discutiremos a seguir. Na Figura 3.13, os quadrados em azul representam a solução inicial, e as barras em amarelo indicam o quanto foi possível variar o valor da espécie no fator selecionado (d^{max} e d^{min}). No software EPA PMF 5.0, somente é apresentada em forma de gráfico, Figura 3.13, a solução para o valor $dQ = 4$, que segundo [Norris et al. \(2014\)](#), provê os intervalos mais robustos para a maioria dos conjuntos de dados analisados. As soluções para os valores de $dQ = 4, 8, 16$ e 32 estão em arquivos de texto na pasta de saída dos resultados definida pelo usuário, com os sufixos *_DISPres1, *_DISPres2, *_DISPres3, e *_DISPres4, respectivamente para os valores 4, 8, 16 e 32 de dQ . Mais detalhes sobre os formatos de saída podem ser encontrados em [Norris et al. \(2014\)](#).

Figura 3.13: Base Model DISP Box Plots EPA PMF 5.0

O menu *DISP Summary*, Figura 3.14, apresenta uma tabela que contém dois números na primeira linha. Na primeira posição é um indicador de erro, 0 se a execução ocorreu sem problemas, 6 ou 9 é indicação de que a execução foi abortada. Na segunda posição é, caso tenha acontecido, o valor da diminuição no valor de $Q_{\text{mínimo}}$ durante a execução de alguma das fases do método. Embora tenhamos assumido que a solução base escolhida seja relativa a um ponto de mínimo global, [Norris et al. \(2014\)](#), seção 5.7, sugere que pode ocorrer uma pequena diminuição no valor após execução do método, e recomenda caso o valor da diminuição seja maior do que 1% do valor de $Q_{\text{mínimo}}$, que a solução analisada não seja considerada como uma solução final, e que o pesquisador procure eventos anômalos na série de tempo dos dados, ou que considere a possibilidade de aumentar ou diminuir o número de fatores, ou até mesmo excluir espécies da amostra, e refazer a análise.

Após a execução do método, considerando as restrições citadas anteriormente, a solução obtida pode apresentar troca de posição entre os fatores em relação à solução base selecionada. Em [Norris et al. \(2014\)](#) não há uma explicação de como a identificação dos fatores obtidos após a execução do método é feita em relação à solução base. [Paatero et al. \(2014\)](#) sugere que a identificação

pode ser feita aplicando correlação cruzada entre os fatores, ou uma análise baseada em regressão. No menu *DISP Summary* abaixo da primeira linha, há uma matriz cujas linhas se referem às execuções do método, para cada valor de $dQ = 4, 8, 16$ e 32 , respectivamente, e os valores nas colunas se referem às quantidades de trocas entre os fatores que ocorreram durante as execuções – cada coluna está relacionada a um fator obtido inicialmente. A Figura 3.17 mostra um caso em que não houve intercâmbio entre os fatores - solução com 7 fatores –, para todos os valores dQ em que o método foi executado. Norris *et al.* (2014), seção 5.7, sugere que se houver intercâmbios de fatores para o valor de $dQ = 4$ a solução não deve ser usada.

Figura 3.14: Base Model DISP Summary EPA PMF 5.0 Fonte: Norris *et al.* (2014)

3.1.5 Base Model / Base Model Bootstrap Results

O método BS pode ser usado para avaliar efeitos de blocos da amostra com dados desproporcionais geralmente relacionados a eventos sazonais, que podem causar viés na solução do modelo. O método consiste em reamostragens aleatórias dos dados originais feitas por blocos sequenciais da amostra original. O propósito de sortear blocos sequenciais é preservar a correlação serial das informações. São então sorteados blocos de mesmo tamanho, até que seja composta uma nova amostra com o mesmo tamanho da original. Os parâmetros necessários para executar este método são: o "run" com a melhor solução, tamanho dos blocos das reamostragens, a quantidade de novas amostras (*bootstrap*) que se deseja ter na análise, e o valor da correlação mínima para a identificação posterior dos fatores.

Após a nova amostra ser composta, e a fatoração ser executada, os fatores podem mudar de ordem, ou alguns podem nem mesmo ser identificados novamente. Para cada novo resultado o programa compara os fatores resultantes com os fatores do resultado base, usando a correlação de Pearson como medida de parença. Os novos fatores que apresentarem correlação menor que a mínima definida são marcados como não identificados. O resultado do método é apresentado em *Boxplots* demonstrando a variabilidade obtida entre as novas amostras, Figura 3.15. As estatísticas sobre os resultados, e quantas vezes cada fator da solução base foi identificado podem ser encontradas no submenu *Bootstrap Summary*, Figura 3.16.

Figura 3.15: Base Model Bootstrap Boxplots EPA PMF 5.0

Figura 3.16: Base Model Bootstrap Summary EPA PMF 5.0

3.1.6 Base Model / BS-DISP Results

Após executar o método BS é possível executar o método BS-DISP, que é uma combinação do BS com o DISP. Esta combinação é feita da seguinte maneira, cada nova amostra obtida na execução prévia do BS é submetida à execução do método DISP, mas agora com os seguintes valores de $dQ = 0,5; 1; 2$ e 4 . Os resultados destas combinações permitem diversas análises e questionamentos sobre a qualidade da solução base. Porém, segundo Norris *et al.* (2014), Seção 5.9, o ponto chave

do resultado destas combinações é analisar os intercâmbios dos fatores que ocorrem nas diversas execuções do método, sugerindo que se há muitas trocas, a solução base não está bem definida. O menu *BS-DISP Summary*, Figura 3.17, que é disponibilizado ao término da execução do método, contém uma matriz cujas linhas se referem às execuções do método, para cada valor de $dQ = 0,5; 1; 2$ e 4 , respectivamente. As colunas são as quantidades de trocas entre os fatores que ocorreram durante as execuções. A Figura 3.17 é um caso de intercâmbio entre os fatores 4 e 6, para todos os valores dQ , considerando cada execução do método, no caso de uma solução de 7 fatores.

Figura 3.17: Base Model BS-DISP Summary EPA PMF 5.0 Fonte: Norris et al. (2014)

3.1.7 Rotational Tools

Além dos métodos DISP, BS e BS-DISP que descrevemos nas seções anteriores, que podem ser usados para avaliar a qualidade dos dados e da solução, o *software* EPA PMF 5.0 possui uma ferramenta chamada *Fpeak* para analisar as ambiguidades que podem existir na solução escolhida, diferentemente do método DISP, desta vez aplicando transformações lineares que não alteram muito o valor de Q -mínimo obtido para o solução ótima.

A restrição de não negatividade em (2.3) não é suficiente para garantir a unicidade da solução. Para um par de matrizes GF multiplicadas, é possível obter um par de matrizes G^*F^* tais que $G^* = GT$ e $F^* = T^{-1}F$, com T sendo uma matriz $p \times p$, onde p é o número de fatores, com um mesmo valor de Q -mínimo. As matrizes G^* e F^* são chamadas de matrizes rotacionadas. Se não é possível aplicar uma rotação, a solução é única. Entretanto, é possível aplicar uma transformação linear que se “aproxime” de uma rotação, considerando a restrição de não negatividade para os elementos de G^* e F^* , mas permitindo que o valor de Q -mínimo aumente. Uma discussão mais detalhada sobre a aplicação de rotações neste contexto pode ser encontrada em Paatero et al. (2002).

Quanto mais elementos com valor zero na matriz que representa os perfis das fontes, no caso a matriz F , Figura 3.18, mais fácil é de se identificar os perfis do resultado frente aos já conhecidos pelo pesquisador. Um dos objetivos deste método é forçar uma solução, mesmo que aumentando o valor de Q -mínimo de um valor aceitável, com o propósito de se obter uma solução, mesmo que não seja a ótima para o modelo, mas que facilite a percepção do pesquisador no trabalho de identificação das fontes existentes na solução base.

Figura 3.18: *Rotational Tools / Fpeak/ Profiles/Contributions EPA PMF 5.0* Fonte: *Norris et al. (2014)*

Para executar o Fpeak, é preciso definir a “força” com que o método irá executar a transformação nas matrizes G e F , referentes ao “run” ótimo. Para isso, no menu *Rotational Tools/Fpeak Rotation & Notes/Model Runs*, Figura 3.19, há a opção *Selected Fpeak Runs*, onde é possível inserir até cinco valores para analisar simultaneamente os seus resultados. Não há limites para estes valores, porém, em *Norris et al. (2014)*, seção 6.1, é recomendado que sejam utilizados inicialmente valores entre -5 e 5 . Valores positivos, forçam o aparecimento de valores próximos de zero na matriz F^* , e valores negativos forçam valores próximos de zero na matriz G^* . Ainda em *Norris et al. (2014)*, é recomendado que se considere soluções em que o valor de $Q\text{-robusto}$ não aumente mais do que 5%. O sumário dos valores para cada valor de Fpeak pode ser encontrado à direita, na seção destacada em vermelho na Figura 3.19.

Figura 3.19: *Rotational Tools / Fpeak / Model Runs EPA PMF 5.0* Fonte: Norris et al. (2014)

Capítulo 4

Simulação de base de dados

Como foi dito na Seção 1.1, o propósito deste trabalho é fazer um estudo de sensibilidade do método PMF. Para realizar este estudo, simularemos algumas bases de dados representando as medições de elementos químicos presentes no material particulado captado na atmosfera, seguindo um modelo receptor com uma estrutura de perfis de fontes conhecidas, para posteriormente aplicar a fatoração PMF testando diferentes propostas de definição de incertezas que estão presentes na literatura, com o objetivo de comparar os resultados da fatoração com a estrutura original usada para gerar os dados. Neste capítulo descreveremos a metodologia usada para fazer a simulação das bases de dados bem como a implementação computacional.

4.1 Modelo receptor

Consideremos novamente a equação (2.2), com a matriz F conhecida, representando em suas colunas os perfis das p fontes existentes no sistema. Consideremos também que haja um resíduo E para cada medição, representando a informação não captada pelo modelo.

$$X_{(m \times n)} = G_{(m \times p)}F_{(p \times n)} + E_{(m \times n)} \quad (4.1)$$

A ideia básica da simulação consiste em gerar as entradas da matriz G , em que cada coluna representa as contribuições em massa de cada uma das p fontes, em um determinado período de medição, ou seja, uma observação.

Cada elemento das colunas da matriz G é considerado como uma variável aleatória, positiva, que representa a massa, ou mais precisamente, a concentração do material particulado na atmosfera, que foi emitido por cada fonte presente no período da medição. Existem estudos que procuram modelar a distribuição de probabilidade que melhor se ajusta à concentração de material particulado na atmosfera em períodos determinados. Como podemos ver em Kan e Chen (2004) e em Rumburg *et al.* (2001), distribuições de probabilidade como lognormal, gama, weibull, entre outras, são testadas. Por questão de simplicidade, neste estudo utilizaremos a distribuição lognormal para simular os valores relativos à concentração de material particulado emitido por cada fonte. Também consideraremos os elementos da matriz E , de resíduos, como variáveis aleatórias, e para gerar os seus elementos utilizaremos a distribuição normal.

Considerando que temos cada elemento da matriz F em (4.1) como uma informação para a simulação, definimos previamente a estrutura de perfil de fontes segundo o modelo receptor, onde f_{kj} é conhecido, e representa a porcentagem em massa do material particulado emitido pela fonte k , que é relativa à espécie química j . Portanto para simular uma medição x_{ij} de uma espécie química j , em um ambiente com p fontes, basta gerar aleatoriamente um vetor g com p elementos que representam a massa emitida por cada uma das p fontes em um determinado período de medição,

um resíduo e_{ij} , e efetuar a seguinte operação da equação (4.2), conforme o modelo receptor,

$$x_{ij} = \sum_{k=1}^p g_{ik} f_{kj} + e_{ij}. \quad (4.2)$$

4.2 Perfis de fontes

Como foi dito na seção anterior, sobre o modelo receptor, a matriz F de perfis de fontes é uma informação prévia para a simulação, assim como os parâmetros das distribuições de probabilidades utilizadas para gerar os valores para a simulação. Os perfis de fontes de emissão de material particulado podem variar conforme a região onde a fonte está localizada, ou conforme varia o tipo de combustível que a alimenta. Tomemos como exemplo emissões veiculares, que podem ter perfis diferentes dependendo do país onde são medidas, pois a composição dos combustíveis também podem variar de país para país. Portanto, na determinação do conjunto de perfis para a simulação, não tivemos a pretensão de chegar à composição de um conjunto que refletisse com total exatidão uma situação real, mas que também não fosse uma estrutura “simples” do ponto de vista prático, e que não pudesse ser comparado à realidade. Tomamos como base, o trabalho de [dos Santos et al. \(2014\)](#), em que foi feito um estudo de identificação da quantidade e fontes e de seus respectivos perfis na cidade de Recife, entre os anos de 2007 e 2008.

Em [dos Santos et al. \(2014\)](#), para identificação e quantificação dos fatores relativos aos perfis de fontes, foi aplicada a Análise Fatorial com rotação Varimax, e também o método PMF. A Tabela 4.1, contém a matriz de cargas fatoriais da Análise Fatorial aplicada, com uma solução de seis fatores, que explicam 78,6% da variância dos dados. As cargas fatoriais em negrito são as cargas relativas aos elementos traçadores de cada fonte, como foi comentado na Seção 2.3.1. Para este trabalho, vamos tomar como base esse cenário do estudo feito em [dos Santos et al. \(2014\)](#). Consideraremos os seis perfis de fontes, tomaremos como elementos traçadores os elementos com as cargas fatoriais em negrito. Por questões de simplicidade, consideraremos as cargas fatoriais dos elementos traçadores para definir a porcentagem em massa da composição do elemento no perfil de fonte hipotético que vamos considerar na simulação. Para facilitar o entendimento, consideremos o Fator 1 na Tabela 4.1, para o qual temos os seguintes valores, 0,976; 0,967; 0,963; 0,668; 0,596, em que a soma é 4,17, respectivamente para os elementos traçadores Si, Ti, Al, Fe e Ca. Considerando como medida de distribuição da porcentagem de massa a porcentagem que cada carga fatorial representa da soma, obtemos 0,2341; 0,2319; 0,2309; 0,1602; 0,1429 respectivamente para Si, Ti, Al, Fe e Ca. Estendendo este procedimento a todos os fatores da Tabela 4.1, obtemos a matriz F representada na Tabela 4.2, da equação (2.2), de perfis de fontes que utilizaremos para realizar parte das simulações deste estudo. Reiteramos que esta abordagem é apenas uma simplificação para obtermos porcentagens que representem a distribuição de massa das espécies químicas, não é um procedimento preciso para obter perfis de fontes que representam a realidade com exatidão a partir de cargas fatoriais. Em [dos Santos et al. \(2014\)](#) é utilizada a técnica de fatores absolutos, que considera a variância e a carga fatorial da massa total para ponderar as cargas fatoriais originais como uma forma de ter uma relação mais precisa entre as cargas fatoriais e o peso do elemento químico na caracterização do fator. A Tabela 4.1, foi utilizada apenas como uma motivação, e uma referência para basear a simulação que será feita mais adiante.

Tabela 4.1: Cargas fatoriais rotacionadas, solução com 6 fatores explicando 78,6% da variância da base de dados do estudo de *dos Santos et al. (2014)*

	Fator 1	Fator 2	Fator 3	Fator 4	Fator 5	Fator 6
Elemento	Solo	Veículos	Queima de Biomassa	Cloro	<i>Spray</i> Marinho	Níquel
Si	0,976	0,067	0,051	-0,043	0,018	-0,077
Ti	0,967	0,081	0,088	-0,05	0,018	-0,056
Al	0,963	0,053	0,047	-0,107	0,022	-0,08
Fe	0,668	0,652	0,046	0,066	-0,078	-0,11
Ca	0,596	0,049	0,263	0,474	-0,19	-0,031
Zn	-0,043	0,903	-0,044	0,052	-0,116	-0,167
Mn	0,194	0,846	0	0,091	-0,126	-0,172
Pb	-0,029	0,803	0,098	0,054	-0,179	0,13
Cr	0,163	0,551	-0,027	0,04	0,212	0,195
BC	0,098	0,491	0,321	0,344	-0,285	-0,062
Br	-0,101	-0,099	0,869	-0,023	0,02	0,066
S	0,404	0,073	0,773	-0,133	0,074	-0,15
K	0,464	0,294	0,624	0,225	-0,207	0,083
Cl	-0,074	-0,056	-0,092	0,917	0,034	0,002
Cu	-0,083	0,284	0,059	0,709	0,041	0,138
Mg	0,078	-0,172	-0,071	-0,059	0,802	0,236
Na	-0,3	-0,118	0,524	0,278	0,584	-0,127
Ni	-0,198	-0,051	-0,002	0,116	0,176	0,889
Massa Total	0,391	0,28	0,537	0,49	0,222	0,085
% da variância explicada	23,1	18,3	13,3	11,2	7,1	5,6

Tabela 4.2: Matriz com perfis de fontes utilizadas para simulação

Elemento	Fator 1	Fator 2	Fator 3	Fator 4	Fator 5	Fator 6
Si	0,2341	0	0	0	0	0
Ti	0,2319	0	0	0	0	0
Al	0,2309	0	0	0	0	0
Fe	0,1602	0	0	0	0	0
Ca	0,1429	0	0	0	0	0
Zn	0	0,2513	0	0	0	0
Mn	0	0,2354	0	0	0	0
Pb	0	0,2234	0	0	0	0
Cr	0	0,1533	0	0	0	0
BC	0	0,1366	0	0	0	0
Br	0	0	0,3835	0	0	0
S	0	0	0,3411	0	0	0
K	0	0	0,2754	0	0	0
Cl	0	0	0	0,5640	0	0
Cu	0	0	0	0,4360	0	0
Mg	0	0	0	0	0,5786	0
Na	0	0	0	0	0,4214	0
Ni	0	0	0	0	0	1

4.3 Distribuições de probabilidade utilizadas na simulação

Assim como foi dito na seção anterior sobre modelo receptor em simulação, utilizaremos a distribuição lognormal para simular as contribuições das fontes, e a distribuição normal para simular o resíduo no modelo. Nesta seção vamos fazer uma breve descrição sobre as distribuições de probabilidades utilizadas e os valores utilizados nos seus parâmetros.

A distribuição normal provavelmente é a distribuição mais conhecida e importante da estatística,

pela gama de fenômenos que ela descreve em diversas áreas do conhecimento. Sua função densidade de probabilidade é da forma apresentada na equação (4.3):

$$f(x, \mu, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}, \quad -\infty < x < \infty, \quad \sigma > 0. \quad (4.3)$$

Denotamos uma variável aleatória X que segue a distribuição normal com média μ e variância σ^2 por $X \sim N(\mu, \sigma^2)$.

A distribuição lognormal está relacionada com a distribuição normal da seguinte maneira: se a variável aleatória Y tem distribuição lognormal, então $X = \ln(Y)$ tem distribuição normal. É comum que os *softwares* de estatística tenham uma função que gere uma variável aleatória da distribuição normal com a média e variância desejada. Para a distribuição lognormal, não é tão comum ter disponível a implementação de uma função que gere uma variável aleatória de tal distribuição. Podemos obter uma variável aleatória da distribuição lognormal com a média e variância desejada, se conseguirmos gerar uma da distribuição normal. Para os parâmetros média e variância temos as seguintes relações entre as duas distribuições:

$$\mu = \ln\left(\frac{m^2}{\sqrt{v+m^2}}\right), \quad \sigma^2 = \ln\left(1 + \frac{v}{m^2}\right), \quad (4.4)$$

em que m e v em (4.4), são a média e variância da distribuição lognormal desejada, e μ e σ , são a média e variância da distribuição normal que poderemos gerar diretamente. Invertendo as funções em (4.4), obtemos os valores de μ e σ^2 necessários para gerar uma variável aleatória lognormal com média m e variância v desejadas. Seja:

$$\phi = \sqrt{v+m^2}. \quad (4.5)$$

As equações em (4.4) podem ser escritas da seguinte forma:

$$\mu = \ln\left(\frac{m^2}{\phi}\right), \quad \sigma^2 = \ln\left(\frac{\phi^2}{m^2}\right), \quad (4.6)$$

evitando replicar cálculos no processo de implementação computacional.

Utilizamos também a distribuição exponencial – que é uma distribuição de valores positivos – para simular valores *outliers*. Sua função densidade de probabilidade é apresentada na equação (4.7), com parâmetro de escala β , média β e variância β^2 :

$$f(x; \beta) = \begin{cases} \frac{1}{\beta} e^{-\frac{1}{\beta}x} & x \geq 0, \\ 0 & x < 0. \end{cases} \quad (4.7)$$

Nem sempre os *softwares* de estatística disponibilizam a geração de variáveis aleatórias segundo a distribuição exponencial com o parâmetro de escala escolhido pelo usuário, mas apenas com o parâmetro de escala unitário. Porém, podemos utilizar a seguinte transformação $Y = \beta X$, em que X é uma variável aleatória com distribuição exponencial e parâmetro de escala unitário, e Y uma variável com distribuição exponencial com parâmetro de escala β .

Também foi utilizada a distribuição uniforme para sortear em quais amostras, e em quais variáveis os *outliers* deveriam ser inseridos. Sua distribuição de probabilidade é da forma apresentada na equação (4.8), com os parâmetros a e b sendo os limites para os valores da distribuição, e a média $\frac{1}{2}(a+b)$ e variância $\frac{1}{12}(b-a)^2$ dependendo de a e b .

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a} & \text{se } a \leq x \leq b, \\ 0 & \text{c.c.} \end{cases} \quad (4.8)$$

4.4 Implementação computacional

Para realizar a simulação foi utilizado o *software* SAS 9.2, com a interface Enterprise Guide 4.1. A escolha deste *software* foi devida não só às suas funções estatísticas, mas também aos seus recursos computacionais, como a execução de *macros* e a possibilidade de programação em linguagem SQL, que facilitam a manipulação e a consulta a bases de dados. Os códigos utilizados nas simulações e nos procedimentos de manipulação de base de dados estão integralmente no Apêndice A.1. Na próxima seção, em que explicaremos a metodologia da simulação das bases de dados, vamos expor alguns trechos com breves explicações para facilitar o entendimento do procedimento.

4.5 Metodologia

Para testar a fatoração PMF, utilizamos o conjunto de perfis de fontes da Tabela 4.2. Geramos mil amostras, cada uma com trezentas “observações”, em quatro situações diferentes: uma sem valores *outliers*, outras três com *outliers* distribuídos aleatoriamente em aproximadamente metade das 300 “observações”, sorteados uniformemente entre as dezoito variáveis – ou seja, a “observação” escolhida para ter *outlier*, terá um valor somado a uma de suas dezoito variáveis –, e cada uma dessas três situações com *outliers*, tendo valores gerados seguindo a distribuição exponencial com médias 1,5; 3 e 9 respectivamente. Conforme descrevemos na Seção 4.1, considerando que temos a matriz dos perfis de fontes, geramos os elementos g_{ik} , e os elementos e_{ij} de (4.2). Os elementos g_{ik} , conforme descrito em (4.1) seguem distribuição lognormal e os elementos e_{ij} , a distribuição normal. Para o conjunto de perfis da Tabela 4.2, tomamos média da emissão hipotética de material particulado de cada fonte como sendo $1,5 \mu\text{g}/\text{m}^3$ e a variância como 1. Para uma situação com 6 fontes, teremos a média de $9 \mu\text{g}/\text{m}^3$ de material particulado emitido. Esses valores foram escolhidos com o propósito de não se distanciar de uma situação real – em dos Santos *et al.* (2014) as medições foram $7,8 \mu\text{g}/\text{m}^3$ no período total do estudo.

A implementação da simulação das contribuições de seis fontes pode ser verificada abaixo, para o caso de uma “observação”.

```

1      mean = 1.5; variance = 1;
2      phi = sqrt(variance + mean**2);
3      mu   = log(mean**2/phi);
4      sigma = sqrt(log(phi**2/mean**2));
5
6      x1 = rand('Normal', mu, sigma);
7      g1 = exp(x1);
8      x2 = rand('Normal', mu, sigma);
9      g2 = exp(x2);
10     x3 = rand('Normal', mu, sigma);
11     g3 = exp(x3);
12     x4 = rand('Normal', mu, sigma);
13     g4 = exp(x4);
14     x5 = rand('Normal', mu, sigma);
15     g5 = exp(x5);
16     x6 = rand('Normal', mu, sigma);
17     g6 = exp(x6);

```

Na Tabela 4.2 temos dezoito variáveis “observadas”. Para cada variável no modelo, temos uma quantidade que representa o ruído, ou seja, os elementos e_{ij} de (4.2). A implementação da simulação destes valores foi feita conforme descrito a seguir.

```

1      eps1 = rand( 'Normal' , 0 , 0.005 );
2      eps2 = rand( 'Normal' , 0 , 0.005 );
3      eps3 = rand( 'Normal' , 0 , 0.005 );
4      eps4 = rand( 'Normal' , 0 , 0.005 );
5      eps5 = rand( 'Normal' , 0 , 0.005 );
6      eps6 = rand( 'Normal' , 0 , 0.005 );
7      eps7 = rand( 'Normal' , 0 , 0.005 );
8      eps8 = rand( 'Normal' , 0 , 0.005 );
9      eps9 = rand( 'Normal' , 0 , 0.005 );
10     eps10 = rand( 'Normal' , 0 , 0.005 );
11     eps11 = rand( 'Normal' , 0 , 0.005 );
12     eps12 = rand( 'Normal' , 0 , 0.005 );
13     eps13 = rand( 'Normal' , 0 , 0.005 );
14     eps14 = rand( 'Normal' , 0 , 0.005 );
15     eps15 = rand( 'Normal' , 0 , 0.005 );
16     eps16 = rand( 'Normal' , 0 , 0.005 );
17     eps17 = rand( 'Normal' , 0 , 0.005 );
18     eps18 = rand( 'Normal' , 0 , 0.005 );

```

Notemos que as observações neste contexto representam concentrações, que são valores positivos. Os elementos e_{ij} gerados segundo a distribuição normal, terão distribuição simétrica em torno da média, que é zero neste caso. Entretanto, conforme aumentamos a variância, podemos ter valores e_{ij} negativos muito distantes de zero, de modo que quando somados à composição $g_{ik}f_{kj}$ resultará em uma observação com valor negativo. Para reduzir a possibilidade de termos um valor negativo, foi escolhida uma variância com valor pequeno. Ainda, para nos certificarmos que não houve nenhum valor negativo na simulação das variáveis, introduzimos uma verificação que pode ser encontrada no Apêndice A.1.

A geração de uma observação com as dezoito variáveis, para os seis perfis da Tabela 4.2, ou seja,

$$X_{(1 \times 18)} = G_{(1 \times 6)}F_{(6 \times 18)} + E_{(1 \times 18)}, \quad (4.9)$$

segue a implementação computacional descrita a seguir.

```

1      Si = g1*0.2341 + g2*0 + g3*0 + g4*0 + g5*0 + g6*0 + eps1 ;
2      Ti = g1*0.2319 + g2*0 + g3*0 + g4*0 + g5*0 + g6*0 + eps2 ;
3      Al = g1*0.2309 + g2*0 + g3*0 + g4*0 + g5*0 + g6*0 + eps3 ;
4      Fe = g1*0.1602 + g2*0 + g3*0 + g4*0 + g5*0 + g6*0 + eps4 ;
5      Ca = g1*0.1429 + g2*0 + g3*0 + g4*0 + g5*0 + g6*0 + eps5 ;
6      Zn = g1*0 + g2*0.2513 + g3*0 + g4*0 + g5*0 + g6*0 + eps6 ;
7      Mn = g1*0 + g2*0.2354 + g3*0 + g4*0 + g5*0 + g6*0 + eps7 ;
8      Pb = g1*0 + g2*0.2234 + g3*0 + g4*0 + g5*0 + g6*0 + eps8 ;
9      Cr = g1*0 + g2*0.1533 + g3*0 + g4*0 + g5*0 + g6*0 + eps9 ;
10     BC = g1*0 + g2*0.1366 + g3*0 + g4*0 + g5*0 + g6*0 + eps10 ;
11     Br = g1*0 + g2*0 + g3*0.3835 + g4*0 + g5*0 + g6*0 + eps11 ;
12     S = g1*0 + g2*0 + g3*0.3411 + g4*0 + g5*0 + g6*0 + eps12 ;
13     K = g1*0 + g2*0 + g3*0.2754 + g4*0 + g5*0 + g6*0 + eps13 ;
14     Cl = g1*0 + g2*0 + g3*0 + g4*0.564 + g5*0 + g6*0 + eps14 ;
15     Cu = g1*0 + g2*0 + g3*0 + g4*0.436 + g5*0 + g6*0 + eps15 ;
16     Mg = g1*0 + g2*0 + g3*0 + g4*0 + g5*0.5786 + g6*0 + eps16 ;
17     Na = g1*0 + g2*0 + g3*0 + g4*0 + g5*0.4214 + g6*0 + eps17 ;
18     Ni = g1*0 + g2*0 + g3*0 + g4*0 + g5*0 + g6*1 + eps18 ;

```

Portanto, ao executar os três blocos de códigos apresentados anteriormente, repetidas vezes, teremos um conjunto de “observações simuladas”. Neste caso geramos trezentas “observações”.

A rotina de inserção de *outliers* em uma “observação” utiliza dois valores gerados segundo a distribuição uniforme, e um segundo a distribuição exponencial. Considerando que estamos fazendo uma sequência de iterações para gerar as trezentas observações, para cada uma devemos decidir se o valor *outlier* será inserido ou não, e um dos valores de distribuição uniforme é usado para este caso. Na linha um e dois do bloco de código a seguir, é onde se escolhe se a “observação” terá *outlier*, gerando uma variável com distribuição uniforme entre 0 e 1, e com 50% de probabilidade de inserimos *outlier*. Nas linhas restantes, é feita uma discretização do segundo valor de distribuição

uniforme para a quantidade de variáveis do modelo, e então é inserido um valor gerado segundo distribuição exponencial na posição do ruído correspondente.

```

1      aux1 = RAND( 'UNIFORM' );
2      if aux1 < 0.5 then
3      do;
4          aux2 = RAND( 'UNIFORM' );
5          aux3 = 18*aux2;
6          aux4 = floor( aux3 );
7          aux5 = aux4 + 1;
8
9          out = 1.5*rand( 'exponential' );
10
11         if aux5=1 then eps1=out;
12         if aux5=2 then eps2=out;
13         if aux5=3 then eps3=out;
14         if aux5=4 then eps4=out;
15         if aux5=5 then eps5=out;
16         if aux5=6 then eps6=out;
17         if aux5=7 then eps7=out;
18         if aux5=8 then eps8=out;
19         if aux5=9 then eps9=out;
20         if aux5=10 then eps10=out;
21         if aux5=11 then eps11=out;
22         if aux5=12 then eps12=out;
23         if aux5=13 then eps13=out;
24         if aux5=14 then eps14=out;
25         if aux5=15 then eps15=out;
26         if aux5=16 then eps16=out;
27         if aux5=17 then eps17=out;
28         if aux5=18 then eps18=out;
29     end;

```

Nos Apêndices [B.1](#), [B.2](#), [B.3](#) e [B.4](#) é possível encontrar gráficos com exemplos de séries de tempo simuladas para cada uma das quatro situações propostas no início desta seção.

Capítulo 5

Aplicação da fatoração PMF com *software* ME-2

Conforme dissemos no Capítulo 3, embora o *software* EPA PMF 5.0 ofereça recursos gráficos que facilitem a operação de inserção e análise de dados, não é viável utilizá-lo para obter a fatoração em série de uma sequência de bases de dados simuladas. Para realizar esta tarefa utilizamos diretamente o motor ME-2. Neste capítulo vamos fazer uma descrição de alguns detalhes técnicos de como executar o motor ME-2 via linha de comando, e de como o aplicamos nas bases de dados simuladas e consolidamos os resultados.

5.1 Configurações do *software* ME-2

Ao realizar a instalação do *software* EPA PMF 5.0, na pasta principal do programa, é possível encontrar os arquivos que são operados indiretamente pela interface gráfica. A versão 5.0 do programa EPA PMF utiliza a versão lançada em 3 de março de 2014. O arquivo executável desta versão, e o arquivo de configuração são respectivamente, *me2gfP4_1345c4.exe* e *PMF_bs_6f8xx_sealed_GUI.ini*, [vide seção 1.2 de Norris *et al.* (2014)]. Embora seja necessário invocar apenas esses dois arquivos na linha de comando, outros arquivos são necessários constar na pasta do arquivo principal para que o programa execute. A Figura 5.1 apresenta de maneira simplificada o conteúdo e a função de cada arquivo necessário para executar o ME-2. Existem dois arquivos que controlam as configurações e funcionalidades do ME-2 que são o *PMF_bs_6f8xx_sealed_GUI.ini* como dito anteriormente, e o *iniParams.txt*. Ambos são arquivos de texto, que podem ser editados em um editor simples, que interpreta de maneira correta, tabulações, espaçamentos e quebras de linhas. O primeiro arquivo contém todas as configurações das funcionalidades implementadas no ME-2. Trata-se de um arquivo extenso, com algumas seções comentadas ¹ identificando a posição no arquivo em que cada funcionalidade pode ser alterada ².

¹As linhas referentes a comentários são iniciadas pelo símbolo %.

²Notemos que como estamos utilizando a versão do ME-2 que acompanha o *software* EPA PMF 5.0, todas as modificações permitidas são as que estão sob a licença do software EPA PMF 5.0. Existem parâmetros e funcionalidades em que não são permitidas alterações, e tais seções estão identificadas através de comentários. No site <http://www.helsinki.fi/~paatero/PMF/> é possível fazer *download* de outra versão, e obter informações sobre licenciamento do software.

Figura 5.1: Arquivos para a execução do ME-2 via linha de comando

O arquivo `iniParams.txt` é um arquivo simplificado, em que as configurações que nele forem definidas sobrescreverão as configurações definidas no arquivo `PMF_bs_6f8xx_sealed_GUI.ini`. Podemos notar na Figura 5.1, por exemplo, a posição onde é possível alterar o número de observações, de variáveis e de fatores, 53, 10 e 5, respectivamente. A semente da execução pode ser definida, logo abaixo do comentário³ `seed1`, e o número de “rodadas”, logo abaixo do comentário `numtasks`. Também é possível definir o nome dos arquivos de entrada e saída, que vamos comentar a seguir, no caso da figura `'PMFData.txt'`, é o nome do arquivo de entrada, e `'PMF_ab_base'` o arquivo de saída. A matriz com as observações e as suas respectivas incertezas associadas devem estar na mesma pasta do arquivo executável, e com o nome definido no arquivo `iniParams.txt`. As observações devem estar dispostas nas linhas e as variáveis nas colunas separadas por vírgulas. A matriz de incertezas deve estar disposta da mesma forma, mas logo abaixo da matriz de observações, como se estivessem empilhadas. Ao executar o programa, o arquivo com a chave do produto será verificado e como ilustrado na figura, este arquivo é o `me2key.key`, que também é instalado juntamente com o EPA PMF 5.0.

5.2 Execução do software ME-2

Para executar o programa, é necessário abrir o console de comando e acessar a pasta onde os arquivos foram copiados, digitar o nome do arquivo executável seguido do nome do arquivo de configuração principal, como ilustrado na Figura 5.2.

³As linhas de comentário neste arquivo são iniciadas com `/`.

Figura 5.2: Execução do ME-2 via linha de comando

Após executar o ME-2 com as configurações desejadas, na mesma pasta teremos os arquivos com os resultados da fatoração. Dois arquivos são de interesse neste estudo, o arquivo com as matrizes da fatoração, que tem o nome de acordo com o que foi definido no arquivo de configuração – no caso do exemplo da Figura 5.1, o arquivo será `PMF_ab_base.dat` – e o arquivo `PMFreport.txt` que contém o valores de Q -robusto de cada “run” executado, que é utilizado para identificar o “run” ótimo. Na Figura 5.2 é exibida parte do conteúdo do arquivo de saída – em uma situação com 5 fatores e 10 variáveis – onde está destacada a seção que contém a matriz F transposta. Logo acima do bloco da matriz F transposta está a matriz G . O delimitador do bloco de uma fatoração é a linha com zeros abaixo do bloco da matriz F transposta. Haverá a quantidade de blocos com este formato de maneira empilhada conforme o número de “runs” definido no arquivo de configuração. É importante destacar que após finalizar a execução, o arquivo `iniParams.txt` é apagado da pasta pelo programa; para a próxima execução é necessário refazer o arquivo. O programa EPA PMF 5.0 utiliza uma cópia, `iniParams_copy.txt` como modelo, e que também será utilizada no procedimento descrito na próxima seção.

5.3 Identificação de fatores

Após executar a fatoração o pesquisador tem a tarefa de identificar os perfis contidos na matriz F . Neste trabalho, como os perfis são conhecidos, foi aplicada uma metodologia para identificar os perfis resultantes em relação aos utilizados para gerar as bases de dados, Tabela 4.2.

Foi calculado um indicador de proximidade de cada perfil resultante da fatoração a cada perfil usado para gerar a base de dados, resultando em uma matriz quadrada $p \times p$ com p sendo a quantidade de perfis, com as “distâncias” entre os perfis. Esta distância é definida pela soma dos quadrados das diferenças de cada variável de dois perfis comparados. Matematicamente podemos

expressar da seguinte maneira a distância entre dois perfis f^1 e f^2 com m variáveis:

$$distancia(f1, f2) = \sum_{i=1}^m (f1_i - f2_i)^2. \quad (5.1)$$

Consideremos por exemplo as matrizes apresentadas nas Tabelas 5.1 e 5.2, em que temos, respectivamente, os perfis resultantes da fatoração e os perfis utilizados para simular uma base de dados.

Tabela 5.1: *Matriz F - PMF*

Variável	Perfil 1	Perfil 2	Perfil 3
v1	9,56%	16,71%	16,17%
v2	32,77%	27,59%	32,29%
v3	28,83%	27,85%	25,77%
v4	28,84%	27,84%	25,78%

Tabela 5.2: *Matriz F - Original*

Variável	Perfil 1	Perfil 2	Perfil 3
v1	12,50%	3,80%	10,00%
v2	37,50%	19,20%	20,00%
v3	5,00%	38,50%	30,00%
v4	25,00%	38,50%	40,00%

Calculadas as distâncias conforme a equação (5.1), e considerando todas as combinações entre os perfis das Tabelas 5.1 e 5.2, teremos a seguinte matriz de distâncias:

Tabela 5.3: *Distâncias entre fatores*

		Original		
		1	2	3
PMF	1	0,006036546	0,040148109	0,028935084
	2	0,013205395	0,046074824	0,025510681
	3	0,004182771	0,064409241	0,040910678

Após ter a matriz com as distâncias, é necessário identificar as menores distâncias conforme a disponibilidade de perfis. Por exemplo, na Tabela 5.3, a menor distância está na posição (3,1), o que identifica o perfil PMF 3 com o perfil Original 1. As posições disponíveis para identificação após o primeiro passo são as relativas aos perfis PMF 1 e 2 e Original 2 e 3, ou seja, apenas é possível considerar as distâncias nas posições (1,2), (1,3), (2,2) e (2,3). Neste conjunto restante, a menor distância está na posição (2,3), o que vincula o perfil PMF 2 ao Original 3, restando apenas a posição disponível (1,2) na matriz, o que identifica o perfil PMF 1 ao Original 2.

5.4 Metodologia de consolidação dos resultados

Cada matriz de observações simuladas, que foi gerada conforme descrito no Capítulo 4, foi gravada em um arquivo de texto com um nome que a identifica unicamente. Para viabilizar a obtenção dos resultados, foi desenvolvido um programa em linguagem C que executa os seguintes passos:

1. Cria um novo arquivo *iniParams.txt* com as configurações desejadas a partir do arquivo modelo *iniParams_copy.txt*;
2. Lê cada arquivo de observações simuladas e cria um novo arquivo com formato de entrada para o ME-2, conforme descrito na Seção 5.1, inserindo também as medidas de incertezas;
3. Executa o programa ME-2;
4. Busca o “run” com o menor *Q-robusto* no arquivo *PMFreport.txt*;
5. Extrai do arquivo de saída a fatoração correspondente ao “run” com o menor *Q-robusto*;

6. Executa a rotina de identificação dos fatores resultantes conforme descrito na Seção 5.3.
7. Calcula a média e o desvio padrão de cada variável entre cada fator identificado entre todas aplicações do PMF nas bases simuladas (fatores médios).

O código escrito em linguagem C usado para executar os passos descritos estão no Apêndice A.2.

Capítulo 6

Resultados

Neste capítulo serão apresentadas as propostas de definição de incertezas testadas com PMF nas bases de dados simuladas conforme descrito no Capítulo 4, e uma comparação com a Análise Fatorial ortogonal sem considerar medidas de incerteza, e análise dos resultados.

6.1 Propostas de definição de incertezas

Na literatura sobre estudos de detecção de fontes emissoras de material particulado utilizando a fatoração PMF podem ser encontradas diversas abordagens sobre como definir a matriz de incertezas de medições. Para as bases simuladas conforme os perfis da Tabela 4.2, inicialmente foram escolhidas quatro abordagens diferentes presentes na literatura. A primeira foi a que está implementada no programa EPA PMF 5.0, conforme descrito na equação (3.1), na Seção 3.1.1, cujos detalhes podem ser encontrados em Norris *et al.* (2014). A segunda foi utilizada no estudo apresentado em Polissar *et al.* (1998), a terceira em Ito *et al.* (2004), e a quarta em Chueinta *et al.* (2000).

As fórmulas utilizadas para definição de incertezas de medições e tratamento de caso abaixo do limite de detecção dependem do limite de detecção LD_j correspondente ao elemento j medido, da própria medida x_{ij} , e em alguns casos também da incerteza analítica p_j correspondente ao elemento j medido. As fórmulas estão sumarizadas a seguir conforme as suas referências:

1. EPA PMF 5.0 - Norris *et al.* (2014)

$$u_{ij} = \begin{cases} (5/6) \times LD_j & \text{se } x_{ij} < LD_j, \\ \sqrt{(0,05 \times x_{ij})^2 + (0,5 \times LD_j)^2} & \text{se } x_{ij} \geq LD_j. \end{cases} \quad (6.1)$$

$$x_{ij} = \begin{cases} LD_j/2 & \text{se } x_{ij} < LD_j, \\ x_{ij} & \text{c.c.} \end{cases} \quad (6.2)$$

2. Polissar *et al.* (1998)

$$u_{ij} = \begin{cases} (5/6) \times LD_j & \text{se } x_{ij} < LD_j, \\ p_j \times x_{ij} + LD_j/3 & \text{se } x_{ij} \geq LD_j. \end{cases} \quad (6.3)$$

$$x_{ij} = \begin{cases} LD_j/2 & \text{se } x_{ij} < LD_j, \\ x_{ij} & \text{c.c.} \end{cases} \quad (6.4)$$

3. Ito *et al.* (2004)

$$u_{ij} = \begin{cases} LD_j/2 & \text{se } x_{ij} < LD_j, \\ (0,05 \times x_{ij} + LD_j) & \text{se } x_{ij} \geq LD_j. \end{cases} \quad (6.5)$$

$$x_{ij} = \begin{cases} LD_j/2 & \text{se } x_{ij} < LD_j, \\ x_{ij} & c.c. \end{cases} \quad (6.6)$$

4. Chueinta *et al.* (2000)

$$u_{ij} = \begin{cases} LD_j/2 & \text{se } x_{ij} < LD_j, \\ (p_j \times x_{ij} + 0,2 \times x_{ij}) & \text{se } x_{ij} \geq LD_j. \end{cases} \quad (6.7)$$

$$x_{ij} = \begin{cases} LD_j/2 & \text{se } x_{ij} < LD_j, \\ x_{ij} & c.c. \end{cases} \quad (6.8)$$

Notemos que nas referências Ito *et al.* (2004) e Chueinta *et al.* (2000), não são citados os tratamentos dados aos casos de medidas abaixo do limite de detecção. Para este estudo foi escolhido arbitrariamente o valor $LD_j/2$, tanto para a substituição do valor da medida, quanto para o valor da respectiva incerteza. Nas equações (6.4) e (6.8) os valores utilizados para p_j foram os valores de incerteza relativa contidos na Tabela 2.3, ou seja, utilizamos como incerteza analítica para tais fórmulas o desvio da medição obtido em um procedimento de calibração de um equipamento de EDXRF.

Os valores dos limites de detecção LD_j , utilizados na simulação, Tabela 6.1, foram baseados no estudo apresentado em Landsberger e Creatchman (1999), Capítulo 2.

Tabela 6.1: Limites de detecção mínimos - ng/m³

Elementos	XRF
Si	2
Ti	1
Al	5
Fe	0.7
Ca	1
Zn	0.2
Mn	0.8
Pb	1
Cr	1
BC	0.1
Br	0.1
S	1
K	1
Cl	1
Cu	0.3
Mg	15
Na	30
Ni	0.3

Também é muito comum adotar as medidas de incertezas como uma porcentagem dos valores das observações. Portanto, além das quatro abordagens citadas, também foram aplicadas neste estudo de sensibilidade as porcentagens de 5%, 10% e 20%, dos valores das bases simuladas conforme os perfis das Tabelas 4.2, como medidas de incerteza. Exemplos de séries de tempo das abordagens de definição de incertezas apresentadas nesta seção podem ser encontrados nos Apêndices B.5, B.6, B.7 e B.8, em que cada exemplo corresponde à aplicação das abordagens de definição de incerteza a uma das quatro situações de simulação de base de dados citadas no início da Seção 4.5. As séries de tempo simuladas em que foram baseados tais exemplos de incertezas são os apresentados nos Apêndices B.1, B.2, B.3 e B.4.

6.2 Resultados de aplicações de diferentes propostas de definição de incertezas

Nesta seção são apresentados os resultados da aplicação da fatoração PMF nas bases de dados simuladas conforme os perfis da Tabela 4.2, com as quatro variações descritas na Seção 4.5, uma sem *outliers*, e três outras com *outliers* seguindo a distribuição exponencial com média 1, 5; 3 e 9. Para cada uma destas quatro variações, foi aplicada a fatoração PMF quatro vezes, utilizando em cada vez uma das quatro propostas de definição de incerteza, baseadas na literatura, apresentadas na Seção 6.1, e mais as três propostas de porcentagens das medidas, 5%; 10% e 20%. Nos resultados da aplicação da fatoração foram calculadas as porcentagens da concentração das espécies químicas dentro de cada fator, e então conforme descrito no item 7 da Seção 5.4, foi calculada a média destas porcentagens – média das entradas das matrizes –, gerando desta forma uma média de cada fator ou perfil entre todas as simulações. A seguir os resultados são apresentados em forma de matrizes e gráficos. No caso das matrizes, os perfis estão dispostos sequencialmente do primeiro ao sexto perfil nas colunas, e à direita de cada matriz com os perfis médios, está uma matriz com os desvios padrões de cada entrada considerando todos os resultados da aplicação da fatoração. Ainda para cada variação das bases simuladas foi aplicada a Análise Fatorial Ortogonal, com extração de fatores via componentes principais (CP) e com rotação Varimax, sem nenhuma consideração em relação às incertezas para critério de comparação com um método alternativo. Após a aplicação da Análise Fatorial foi calculada a média das cargas fatoriais entre todas as simulações – dentro de cada variação das bases, com ou sem *outliers* –, e os seus respectivos desvios padrões. Os gráficos apresentam a comparação dos resultados entre as propostas de definição de incerteza para cada perfil. Cada proposta é identificada na legenda pela referência bibliográfica ou pela porcentagem que reflete a incerteza da medida, e a legenda com o número do perfil se refere ao perfil original usado para gerar as bases de dados. Assim como nas matrizes, os valores apresentados nos gráficos são referentes às médias dos perfis obtidos nas simulações, formando assim perfis médios. Estes valores referentes às porcentagens médias das espécies químicas são representados por blocos nos gráficos para que facilitem a interpretação da diferença entre os perfis médios obtidos resultantes da aplicação de cada proposta de incerteza e o perfil original, em azul, utilizado para simular as bases de dados. Em cada gráfico, que corresponde a um perfil, no eixo das ordenadas estão as porcentagens médias de cada elemento químico, e no eixo das abscissas os elementos químicos.

Simulações sem outliers

0.195118	0.008120	0.009162	0.009928	0.009600	0.012851	0.014500	0.007677	0.008434	0.009096	0.008681	0.010362
0.193321	0.008033	0.009081	0.009838	0.009496	0.012712	0.014345	0.007619	0.008349	0.009010	0.008609	0.010270
0.192422	0.008013	0.009046	0.009816	0.009464	0.012676	0.014276	0.007559	0.008321	0.008982	0.008568	0.010206
0.133637	0.005522	0.006241	0.006776	0.006531	0.008758	0.009938	0.005266	0.005805	0.006253	0.005966	0.007101
0.119250	0.004920	0.005539	0.006025	0.005817	0.007794	0.008865	0.004687	0.005152	0.005580	0.005300	0.006324
0.009361	0.209829	0.009575	0.010662	0.010225	0.013446	0.008710	0.015543	0.008836	0.009671	0.009417	0.010847
0.008748	0.196593	0.008927	0.010002	0.009558	0.012633	0.008145	0.014575	0.008318	0.009054	0.008820	0.010160
0.008302	0.186526	0.008509	0.009479	0.009083	0.011972	0.007725	0.013804	0.007846	0.008574	0.008354	0.009644
0.005679	0.128119	0.005789	0.006465	0.006202	0.008177	0.005300	0.009482	0.005398	0.005881	0.005744	0.006626
0.005024	0.114261	0.005154	0.005745	0.005520	0.007272	0.004742	0.008474	0.004815	0.005258	0.005118	0.005906
0.013115	0.013515	0.314304	0.017417	0.016412	0.017890	0.014130	0.013880	0.023331	0.015852	0.015808	0.016637
0.011661	0.012035	0.279559	0.015472	0.014589	0.015914	0.012553	0.012365	0.020722	0.014107	0.014055	0.014801
0.009407	0.009679	0.225798	0.012498	0.011771	0.012814	0.010145	0.009990	0.016748	0.011407	0.011345	0.011960
0.018399	0.018459	0.019684	0.447914	0.025180	0.027920	0.021952	0.022225	0.022730	0.034962	0.024626	0.026328
0.014197	0.014243	0.015216	0.346293	0.019471	0.021596	0.016992	0.017198	0.017539	0.027044	0.019037	0.020346
0.019262	0.019489	0.019743	0.022028	0.458089	0.027847	0.023985	0.024159	0.024077	0.024744	0.036137	0.027521
0.014025	0.014207	0.014370	0.016043	0.333630	0.020271	0.017469	0.017590	0.017539	0.018029	0.026330	0.020050
0.029072	0.028437	0.034303	0.037599	0.039362	0.747457	0.041993	0.042140	0.042667	0.043462	0.044042	0.053659

Figura 6.1: Perfis médios em bases sem outliers - **Figura 6.2:** Desvios padrões em bases sem outliers
Proposta de incertezas definida em Norris et al. (2014) - Proposta de incertezas definida em Norris et al. (2014)

0.197036	0.007955	0.008151	0.010358	0.010410	0.011307	0.015031	0.007987	0.008014	0.009265	0.009764	0.010120
0.195261	0.007875	0.008083	0.010276	0.010307	0.011193	0.014898	0.007932	0.007927	0.009196	0.009660	0.010034
0.194343	0.007848	0.008051	0.010240	0.010274	0.011154	0.014809	0.007876	0.007889	0.009138	0.009613	0.009982
0.134952	0.005417	0.005555	0.007083	0.007101	0.007708	0.010321	0.005467	0.005483	0.006346	0.006676	0.006949
0.120379	0.004833	0.004934	0.006296	0.006322	0.006863	0.009188	0.004894	0.004917	0.005664	0.005974	0.006195
0.009437	0.210576	0.009006	0.009787	0.011485	0.012329	0.008588	0.015944	0.008732	0.009801	0.010452	0.010815
0.008822	0.197265	0.008400	0.009184	0.010735	0.011584	0.008028	0.014937	0.008184	0.009156	0.009809	0.010121
0.008373	0.187208	0.008006	0.008705	0.010207	0.010985	0.007655	0.014180	0.007772	0.008684	0.009312	0.009595
0.005734	0.128527	0.005455	0.005942	0.006979	0.007503	0.005229	0.009757	0.005339	0.006001	0.006386	0.006605
0.005061	0.114598	0.004836	0.005265	0.006197	0.006656	0.004685	0.008713	0.004775	0.005332	0.005696	0.005898
0.012092	0.013017	0.320078	0.015353	0.018077	0.020079	0.012976	0.013593	0.024121	0.014996	0.016185	0.016650
0.010750	0.011599	0.284709	0.013641	0.016077	0.017862	0.011525	0.012068	0.021410	0.013327	0.014359	0.014813
0.008679	0.009332	0.229982	0.011023	0.012979	0.014396	0.009304	0.009782	0.017298	0.010801	0.011629	0.011953
0.016100	0.019202	0.019540	0.456361	0.026789	0.026651	0.019702	0.022075	0.022422	0.036901	0.024678	0.025722
0.012424	0.014824	0.015111	0.352869	0.020724	0.020627	0.015254	0.017071	0.017334	0.028538	0.019081	0.019873
0.016662	0.017500	0.017560	0.018083	0.445744	0.023459	0.023841	0.024529	0.023981	0.024325	0.034313	0.026122
0.012132	0.012753	0.012779	0.013170	0.324623	0.017073	0.017379	0.017855	0.017454	0.017731	0.024978	0.019032
0.031763	0.029671	0.029764	0.036364	0.044970	0.762571	0.041722	0.041175	0.040344	0.043705	0.044846	0.056757

Figura 6.3: Perfis médios em bases sem outliers - **Figura 6.4:** Desvios padrões em bases sem outliers
Proposta de incertezas definida em Polissar et al. (1998) - Proposta de incertezas definida em Polissar et al. (1998)

0.196074	0.007917	0.008700	0.010068	0.010049	0.011834
0.194266	0.007828	0.008615	0.009982	0.009947	0.011711
0.193378	0.007809	0.008586	0.009952	0.009915	0.011673
0.134280	0.005387	0.005923	0.006876	0.006847	0.008072
0.119797	0.004806	0.005269	0.006115	0.006104	0.007180
0.008507	0.210291	0.009517	0.010306	0.011771	0.012891
0.007948	0.197012	0.008883	0.009671	0.011007	0.012109
0.007543	0.186930	0.008462	0.009164	0.010460	0.011484
0.005164	0.128356	0.005765	0.006255	0.007152	0.007844
0.004564	0.114511	0.005124	0.005554	0.006360	0.006969
0.012849	0.012510	0.316103	0.015986	0.018476	0.018444
0.011425	0.011144	0.281149	0.014196	0.016429	0.016409
0.009215	0.008964	0.227060	0.011471	0.013261	0.013213
0.016960	0.019013	0.020320	0.454506	0.028394	0.026889
0.013086	0.014676	0.015705	0.351389	0.021957	0.020801
0.019127	0.018412	0.017596	0.018415	0.442010	0.023722
0.013932	0.013420	0.012806	0.013414	0.321912	0.017261
0.031885	0.031014	0.034417	0.036680	0.047949	0.761494
0.014921	0.008000	0.008521	0.009155	0.009599	0.010441
0.014780	0.007950	0.008427	0.009056	0.009519	0.010354
0.014721	0.007886	0.008380	0.009009	0.009473	0.010312
0.010270	0.005470	0.005830	0.006263	0.006585	0.007150
0.009139	0.004900	0.005194	0.005596	0.005866	0.006395
0.008139	0.016158	0.009108	0.009682	0.010499	0.010662
0.007625	0.015153	0.008542	0.009077	0.009843	0.009972
0.007231	0.014371	0.008098	0.008601	0.009336	0.009477
0.004963	0.009857	0.005572	0.005900	0.006409	0.006498
0.004427	0.008821	0.004963	0.005286	0.005706	0.005801
0.013487	0.013889	0.024786	0.015411	0.016304	0.017285
0.011998	0.012381	0.022023	0.013715	0.014500	0.015365
0.009687	0.009981	0.017774	0.011062	0.011716	0.012417
0.020729	0.021568	0.022969	0.034943	0.025075	0.025843
0.016038	0.016673	0.017744	0.027044	0.019373	0.019983
0.024752	0.025837	0.024081	0.024624	0.035254	0.026758
0.018014	0.018823	0.017530	0.017925	0.025670	0.019491
0.040681	0.043650	0.042066	0.043437	0.045705	0.055644

Figura 6.5: Perfis médios em bases sem outliers -
Proposta de incertezas definida em Ito et al. (2004)

Figura 6.6: Desvios padrões em bases sem outliers
- Proposta de incertezas definida em Ito et al.
(2004)

0.193507	0.008484	0.009074	0.010118	0.009713	0.013233
0.191727	0.008398	0.008991	0.010038	0.009604	0.013091
0.190855	0.008366	0.008951	0.010008	0.009565	0.013051
0.132546	0.005769	0.006179	0.006910	0.006605	0.009018
0.118285	0.005140	0.005481	0.006142	0.005881	0.008022
0.009581	0.208593	0.009552	0.010521	0.011207	0.013456
0.008951	0.195437	0.008909	0.009868	0.010477	0.012640
0.008498	0.185431	0.008496	0.009347	0.009958	0.011986
0.005814	0.127382	0.005769	0.006382	0.006801	0.008180
0.005141	0.113593	0.005140	0.005664	0.006050	0.007268
0.013264	0.013594	0.311729	0.017263	0.016333	0.019694
0.011793	0.012106	0.277270	0.015338	0.014522	0.017516
0.009514	0.009737	0.223954	0.012391	0.011718	0.014108
0.020187	0.020520	0.020896	0.443641	0.024924	0.027405
0.015581	0.015836	0.016154	0.342992	0.019271	0.021202
0.021459	0.018924	0.023308	0.025109	0.454696	0.028211
0.015610	0.013802	0.016963	0.018284	0.331187	0.020526
0.027687	0.028888	0.033184	0.039984	0.041488	0.741393
0.014336	0.008203	0.008492	0.009304	0.008946	0.010347
0.014211	0.008123	0.008394	0.009251	0.008895	0.010255
0.014115	0.008090	0.008395	0.009193	0.008831	0.010215
0.009864	0.005609	0.005819	0.006382	0.006126	0.007079
0.008782	0.005010	0.005203	0.005700	0.005468	0.006324
0.008580	0.015388	0.009222	0.009666	0.009425	0.010788
0.008015	0.014413	0.008676	0.009053	0.008810	0.010125
0.007609	0.013681	0.008203	0.008570	0.008364	0.009610
0.005230	0.009396	0.005660	0.005899	0.005745	0.006604
0.004667	0.008402	0.005016	0.005255	0.005105	0.005884
0.014276	0.014296	0.023882	0.015948	0.015179	0.016946
0.012690	0.012702	0.021202	0.014208	0.013482	0.015078
0.010245	0.010263	0.017104	0.011440	0.010887	0.012163
0.022686	0.022655	0.022964	0.034384	0.024609	0.025996
0.017533	0.017550	0.017755	0.026580	0.019020	0.020086
0.023343	0.022958	0.023577	0.025102	0.035873	0.026669
0.017019	0.016709	0.017181	0.018288	0.026099	0.019449
0.040606	0.042785	0.042561	0.044471	0.045113	0.051704

Figura 6.7: Perfis médios em bases sem outliers -
Proposta de incertezas definida em Chueinta et al.
(2000)

Figura 6.8: Desvios padrões em bases sem outliers
- Proposta de incertezas definida em
Chueinta et al. (2000)

0.194163	0.008486	0.009338	0.010300	0.009990	0.011831
0.192368	0.008398	0.009258	0.010214	0.009880	0.011697
0.191507	0.008368	0.009212	0.010182	0.009837	0.011671
0.132989	0.005774	0.006360	0.007032	0.006791	0.008060
0.118673	0.005143	0.005649	0.006254	0.006056	0.007164
0.009286	0.209581	0.009694	0.011047	0.010219	0.013153
0.008675	0.196363	0.009040	0.010362	0.009551	0.012351
0.008240	0.186302	0.008619	0.009822	0.009078	0.011711
0.005635	0.127977	0.005861	0.006696	0.006195	0.007992
0.004991	0.114126	0.005218	0.005950	0.005515	0.007107
0.012773	0.012809	0.313827	0.017220	0.016667	0.019004
0.011352	0.011414	0.279136	0.015299	0.014809	0.016909
0.009156	0.009178	0.225454	0.012364	0.011948	0.013617
0.019078	0.018818	0.019923	0.443670	0.022503	0.029152
0.014721	0.014523	0.015401	0.343009	0.017397	0.022553
0.019752	0.019841	0.020046	0.025324	0.460381	0.028454
0.014366	0.014463	0.014592	0.018449	0.335336	0.020702
0.032275	0.028436	0.033372	0.036806	0.037847	0.746872
0.014956	0.008017	0.008491	0.008937	0.009044	0.010482
0.014784	0.007947	0.008401	0.008868	0.008959	0.010382
0.014784	0.007909	0.008353	0.008802	0.008946	0.010319
0.010312	0.005494	0.005805	0.006148	0.006204	0.007178
0.009137	0.004914	0.005179	0.005477	0.005524	0.006393
0.008519	0.015235	0.009182	0.009802	0.009176	0.010754
0.007994	0.014290	0.008615	0.009160	0.008595	0.010060
0.007583	0.013545	0.008160	0.008689	0.008193	0.009561
0.005209	0.009294	0.005618	0.005978	0.005612	0.006573
0.004660	0.008327	0.004998	0.005344	0.005010	0.005865
0.014169	0.013855	0.024296	0.015927	0.015622	0.017253
0.012599	0.012324	0.021613	0.014172	0.013891	0.015342
0.010193	0.009978	0.017439	0.011439	0.011225	0.012402
0.022438	0.022514	0.022858	0.034856	0.023996	0.026434
0.017366	0.017416	0.017676	0.026971	0.018551	0.020434
0.022599	0.022956	0.022577	0.025696	0.036018	0.026893
0.016477	0.016740	0.016466	0.018711	0.026247	0.019604
0.042831	0.042019	0.042919	0.043232	0.043738	0.052936

Figura 6.9: Perfis médios em bases sem outliers - Proposta de incertezas de 5% do valor da medição

Figura 6.10: Desvios padrões em bases sem outliers - Proposta de incertezas de 5% do valor da medição

0.194132	0.008468	0.009198	0.010339	0.009445	0.012465
0.192337	0.008380	0.009111	0.010253	0.009338	0.012336
0.191472	0.008350	0.009072	0.010225	0.009301	0.012292
0.132966	0.005761	0.006262	0.007060	0.006422	0.008494
0.118666	0.005129	0.005555	0.006278	0.005716	0.007553
0.009189	0.208380	0.009525	0.010448	0.010663	0.013613
0.008587	0.195244	0.008883	0.009803	0.009968	0.012785
0.008153	0.185239	0.008473	0.009287	0.009471	0.012118
0.005576	0.127255	0.005757	0.006334	0.006466	0.008269
0.004932	0.113487	0.005128	0.005625	0.005755	0.007357
0.013092	0.013600	0.312366	0.015971	0.017000	0.019793
0.011638	0.012116	0.277831	0.014187	0.015108	0.017611
0.009389	0.009743	0.224405	0.011460	0.012191	0.014183
0.019236	0.020559	0.022057	0.444141	0.022755	0.028642
0.014842	0.015871	0.017047	0.343374	0.017593	0.022160
0.021187	0.020002	0.021638	0.026601	0.458658	0.027209
0.015413	0.014583	0.015754	0.019371	0.334076	0.019799
0.029193	0.027833	0.031938	0.039243	0.040074	0.743321
0.014937	0.008027	0.008545	0.009245	0.008600	0.010362
0.014791	0.007955	0.008469	0.009142	0.008552	0.010255
0.014757	0.007920	0.008396	0.009121	0.008506	0.010207
0.010256	0.005492	0.005851	0.006324	0.005886	0.007097
0.009154	0.004918	0.005238	0.005625	0.005287	0.006343
0.008651	0.015847	0.009035	0.009605	0.009488	0.011034
0.008117	0.014921	0.008456	0.008992	0.008905	0.010354
0.007694	0.014097	0.008018	0.008538	0.008438	0.009820
0.005282	0.009690	0.005500	0.005844	0.005808	0.006730
0.004706	0.008670	0.004925	0.005245	0.005166	0.006024
0.013873	0.014414	0.023950	0.015638	0.015725	0.017204
0.012354	0.012800	0.021277	0.013926	0.013969	0.015318
0.009982	0.010360	0.017173	0.011243	0.011289	0.012387
0.022825	0.023300	0.023690	0.034918	0.024144	0.026130
0.017660	0.018027	0.018302	0.027009	0.018667	0.020206
0.023448	0.022963	0.022828	0.025433	0.034824	0.026662
0.017065	0.016724	0.016641	0.018501	0.025330	0.019442
0.042622	0.042449	0.042297	0.045963	0.044749	0.051941

Figura 6.11: Perfis médios em bases sem outliers - Proposta de incertezas de 10% do valor da medição

Figura 6.12: Desvios padrões em bases sem outliers - Proposta de incertezas de 10% do valor da medição

0.193649	0.008492	0.009474	0.010148	0.010179	0.012076	0.014951	0.008109	0.008753	0.009021	0.008831	0.010111
0.191860	0.008403	0.009385	0.010062	0.010066	0.011946	0.014803	0.008061	0.008667	0.008959	0.008752	0.010045
0.190995	0.008369	0.009348	0.010036	0.010024	0.011908	0.014711	0.008007	0.008627	0.008912	0.008701	0.009969
0.132632	0.005776	0.006451	0.006929	0.006923	0.008226	0.010210	0.005547	0.005969	0.006198	0.006051	0.006921
0.118371	0.005141	0.005726	0.006162	0.006164	0.007319	0.009160	0.004970	0.005348	0.005541	0.005384	0.006169
0.009291	0.207505	0.009577	0.011023	0.010698	0.013696	0.008647	0.016099	0.009331	0.009882	0.009730	0.010884
0.008680	0.194421	0.008931	0.010342	0.010000	0.012858	0.008104	0.015122	0.008758	0.009261	0.009124	0.010192
0.008240	0.184460	0.008514	0.009799	0.009500	0.012194	0.007700	0.014337	0.008318	0.008769	0.008664	0.009689
0.005637	0.126718	0.005786	0.006685	0.006487	0.008321	0.005280	0.009836	0.005723	0.006032	0.005955	0.006660
0.004985	0.113014	0.005149	0.005941	0.005774	0.007402	0.004724	0.008825	0.005093	0.005370	0.005284	0.005913
0.013646	0.014062	0.311244	0.016928	0.016240	0.018872	0.014578	0.014309	0.023336	0.015869	0.015767	0.017164
0.012127	0.012529	0.276841	0.015037	0.014441	0.016787	0.012968	0.012726	0.020776	0.014134	0.014014	0.015274
0.009787	0.010071	0.223600	0.012148	0.011646	0.013519	0.010479	0.010314	0.016729	0.011397	0.011310	0.012332
0.019596	0.020137	0.020560	0.444698	0.024186	0.028114	0.022304	0.023007	0.022552	0.034659	0.024020	0.025667
0.015120	0.015544	0.015890	0.343801	0.018700	0.021749	0.017248	0.017783	0.017426	0.026773	0.018566	0.019858
0.019887	0.020831	0.023414	0.024668	0.457477	0.029334	0.023032	0.023069	0.024328	0.024863	0.035759	0.027102
0.014465	0.015184	0.017045	0.017964	0.333221	0.021349	0.016784	0.016812	0.017715	0.018110	0.026066	0.019735
0.031032	0.029343	0.033065	0.037629	0.038274	0.744330	0.042014	0.043123	0.042448	0.044116	0.043921	0.052040

Figura 6.13: Perfis médios em bases sem outliers
- Proposta de incertezas de 20% do valor da
medição

Figura 6.14: Desvios padrões em bases sem
outliers - Proposta de incertezas de 20% do valor
da medição

0.998519	0.000215	0.001693	-0.000866	-0.000862	0.000968	0.000911	0.029223	0.025752	0.019802	0.020344	0.014331
0.998511	0.00025	0.001728	-0.000825	-0.000787	0.001048	0.000912	0.02925	0.025794	0.019881	0.020424	0.014314
0.998511	0.000242	0.001716	-0.000798	-0.000742	0.001046	0.000913	0.029246	0.02582	0.019823	0.020373	0.014332
0.998359	0.000322	0.001697	-0.000792	-0.000784	0.00108	0.000912	0.029199	0.025723	0.019873	0.020349	0.014403
0.99828	0.000418	0.001696	-0.000952	-0.000785	0.001086	0.000912	0.029231	0.025749	0.019941	0.020284	0.01435
0.000354	0.998558	0.000514	-0.001071	0.00018	-0.000527	0.029254	0.00089	0.024418	0.02058	0.020165	0.014182
0.000269	0.998544	0.000442	-0.001035	-0.000003	-0.000498	0.029184	0.000889	0.024442	0.020545	0.020173	0.01412
0.000249	0.998526	0.000507	-0.001053	0.000152	-0.000535	0.029306	0.000889	0.024391	0.020592	0.020182	0.014137
0.000301	0.998353	0.000486	-0.001094	0.000067	-0.000549	0.029132	0.000895	0.024497	0.020578	0.020176	0.014227
0.000274	0.998264	0.000515	-0.001081	0.000031	-0.000651	0.029277	0.000896	0.024549	0.02063	0.020216	0.014168
0.002257	0.000645	0.998055	-0.000417	0.000288	0.000305	0.034383	0.032631	0.001344	0.025663	0.023395	0.016945
0.002304	0.000674	0.998045	-0.000433	0.000293	0.000291	0.034427	0.032678	0.001343	0.025651	0.023348	0.017008
0.002276	0.000645	0.998028	-0.000391	0.000358	0.000304	0.03439	0.032624	0.001344	0.025625	0.023431	0.016966
-0.001478	-0.001908	-0.000553	0.997397	-0.000374	0.000446	0.03558	0.03689	0.034545	0.001799	0.029515	0.021099
-0.00151	-0.00191	-0.000533	0.997397	-0.00032	0.000494	0.03554	0.036932	0.034557	0.001801	0.029488	0.021102
-0.001414	0.00016	0.000438	-0.000348	0.997506	0.000541	0.036457	0.036114	0.031475	0.029481	0.001632	0.020708
-0.00141	0.000179	0.000417	-0.000328	0.997507	0.000513	0.036427	0.036138	0.03148	0.029491	0.00163	0.020669
0.003379	-0.001756	0.000772	0.000883	0.000945	0.995609	0.046046	0.045481	0.041174	0.038165	0.037384	0.002884

Figura 6.15: Perfis médios em bases sem outliers
- Análise Fatorial Ortogonal - CP- Rotação
Varimax

Figura 6.16: Desvios padrões em bases sem
outliers - Análise Fatorial Ortogonal - CP-
Rotação Varimax

Figura 6.17: Gráfico comparativo para o Perfil 1 **Figura 6.18:** Gráfico comparativo para o Perfil 2

Figura 6.19: Gráfico comparativo para o Perfil 3 **Figura 6.20:** Gráfico comparativo para o Perfil 4

Figura 6.21: Gráfico comparativo para o Perfil 5 Figura 6.22: Gráfico comparativo para o Perfil 6

Simulações com outliers - distribuição exponencial com média 1,5

0.195698	0.008254	0.009464	0.010214	0.009923	0.011512	0.014435	0.007740	0.008723	0.009074	0.008745	0.009500
0.193855	0.008163	0.009378	0.010120	0.009829	0.011411	0.014305	0.007662	0.008678	0.009009	0.008686	0.009420
0.193031	0.008147	0.009328	0.010097	0.009772	0.011358	0.014275	0.007621	0.008607	0.008951	0.008614	0.009366
0.133951	0.005613	0.006468	0.006965	0.006762	0.007828	0.009875	0.005283	0.005978	0.006226	0.005984	0.006520
0.119551	0.005007	0.005736	0.006190	0.006010	0.006977	0.008852	0.004705	0.005356	0.005560	0.005382	0.005801
0.008946	0.210019	0.010098	0.010715	0.011098	0.012886	0.008333	0.015447	0.009034	0.009617	0.009433	0.010163
0.008372	0.196724	0.009436	0.010031	0.010403	0.012062	0.007821	0.014479	0.008477	0.009026	0.008810	0.009501
0.007924	0.186767	0.008942	0.009505	0.009863	0.011447	0.007423	0.013790	0.008036	0.008557	0.008386	0.009020
0.005398	0.128221	0.006086	0.006499	0.006744	0.007835	0.005094	0.009417	0.005536	0.005882	0.005753	0.006201
0.004818	0.114294	0.005431	0.005759	0.005983	0.006944	0.004560	0.008390	0.004931	0.005274	0.005114	0.005538
0.012842	0.013076	0.311488	0.016621	0.016695	0.018855	0.013747	0.014415	0.023916	0.015777	0.015952	0.016853
0.011403	0.011616	0.277059	0.014785	0.014831	0.016761	0.012217	0.012790	0.021290	0.014016	0.014174	0.015013
0.009204	0.009354	0.223635	0.011960	0.011982	0.013495	0.009864	0.010336	0.017125	0.011322	0.011443	0.012095
0.018376	0.018637	0.020941	0.448165	0.026018	0.026501	0.021472	0.021676	0.022701	0.034890	0.023978	0.024381
0.014192	0.014365	0.016207	0.346451	0.020087	0.020453	0.016620	0.016764	0.017599	0.027046	0.018518	0.018855
0.019057	0.018979	0.020161	0.022116	0.454703	0.027030	0.023134	0.024657	0.023933	0.025030	0.035223	0.025670
0.013822	0.013859	0.014714	0.016064	0.330858	0.019694	0.016863	0.017912	0.017375	0.018217	0.025587	0.018718
0.029560	0.028905	0.035428	0.037743	0.038439	0.756951	0.041626	0.041529	0.043353	0.043630	0.042806	0.053501

Figura 6.23: Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas definida em Norris et al. (2014)

Figura 6.24: Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas definida em Norris et al. (2014)

0.197147	0.007689	0.008258	0.009783	0.010652	0.011392
0.195267	0.007604	0.008191	0.009686	0.010552	0.011296
0.194437	0.007597	0.008148	0.009665	0.010495	0.011244
0.134926	0.005236	0.005654	0.006670	0.007265	0.007751
0.120381	0.004677	0.005013	0.005930	0.006466	0.006909
0.008880	0.210303	0.009011	0.010401	0.011261	0.012182
0.008311	0.197008	0.008417	0.009737	0.010557	0.011408
0.007873	0.187030	0.007978	0.009234	0.010018	0.010828
0.005368	0.128379	0.005437	0.006316	0.006856	0.007409
0.004779	0.114488	0.004829	0.005583	0.006064	0.006562
0.012244	0.012686	0.319259	0.015134	0.018417	0.018172
0.010876	0.011274	0.283938	0.013464	0.016369	0.016153
0.008785	0.009079	0.229344	0.010902	0.013221	0.013022
0.018236	0.019487	0.020952	0.455679	0.026554	0.024817
0.014038	0.014985	0.016186	0.353900	0.020493	0.019131
0.017123	0.018595	0.016266	0.018536	0.446319	0.022948
0.012482	0.013609	0.011963	0.013530	0.323486	0.016782
0.028847	0.030274	0.031156	0.035850	0.044955	0.771994
0.014321	0.007711	0.008181	0.009167	0.009341	0.009519
0.014200	0.007643	0.008097	0.009098	0.009257	0.009439
0.014147	0.007593	0.008075	0.009041	0.009210	0.009388
0.009804	0.005275	0.005615	0.006274	0.006398	0.006529
0.008737	0.004702	0.005012	0.005596	0.005694	0.005806
0.008362	0.015591	0.008507	0.009532	0.010266	0.010297
0.007793	0.014655	0.007959	0.008935	0.009606	0.009620
0.007414	0.013935	0.007568	0.008476	0.009150	0.009143
0.005099	0.009572	0.005215	0.005833	0.006282	0.006278
0.004548	0.008574	0.004641	0.005183	0.005597	0.005607
0.012939	0.013544	0.024440	0.015274	0.016084	0.016031
0.011493	0.012039	0.021784	0.013594	0.014296	0.014242
0.009279	0.009730	0.017539	0.010978	0.011547	0.011515
0.020733	0.022445	0.023130	0.034809	0.024722	0.024527
0.016081	0.017417	0.017965	0.027046	0.019196	0.019057
0.023768	0.025086	0.023439	0.024097	0.034684	0.024960
0.017188	0.018159	0.016981	0.017482	0.025100	0.018039
0.040717	0.041842	0.040914	0.042968	0.044268	0.053775

Figura 6.25: Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas definida em Polissar et al. (1998)

Figura 6.26: Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas definida em Polissar et al. (1998)

0.195826	0.007459	0.008310	0.009918	0.011241	0.011223
0.193979	0.007366	0.008228	0.009815	0.011131	0.011132
0.193189	0.007377	0.008198	0.009811	0.011086	0.011084
0.134011	0.005071	0.005679	0.006757	0.007667	0.007633
0.119576	0.004534	0.005038	0.006011	0.006819	0.006811
0.008700	0.210429	0.010124	0.009929	0.012134	0.012765
0.008149	0.197109	0.009465	0.009294	0.011372	0.011953
0.007714	0.187134	0.008966	0.008807	0.010791	0.011345
0.005263	0.128427	0.006123	0.006026	0.007387	0.007766
0.004689	0.114516	0.005445	0.005336	0.006544	0.006883
0.013050	0.012272	0.315343	0.015880	0.018397	0.018588
0.011586	0.010908	0.280473	0.014123	0.016352	0.016528
0.009354	0.008777	0.226394	0.011431	0.013207	0.013305
0.018388	0.020625	0.019433	0.453973	0.028885	0.025809
0.014199	0.015900	0.015046	0.350964	0.022305	0.019930
0.017007	0.018279	0.019678	0.019591	0.438418	0.023236
0.012416	0.013499	0.014542	0.014338	0.317283	0.017061
0.032904	0.030318	0.033515	0.037996	0.048981	0.766948
0.014247	0.007832	0.008407	0.009502	0.009818	0.009680
0.014122	0.007747	0.008324	0.009417	0.009728	0.009585
0.014006	0.007711	0.008291	0.009374	0.009683	0.009560
0.009744	0.005353	0.005774	0.006524	0.006723	0.006632
0.008697	0.004767	0.005133	0.005815	0.006007	0.005901
0.008282	0.016394	0.008975	0.009224	0.010390	0.010333
0.007730	0.015356	0.008418	0.008660	0.009704	0.009695
0.007338	0.014644	0.007956	0.008211	0.009220	0.009182
0.005039	0.010032	0.005478	0.005648	0.006342	0.006316
0.004504	0.008925	0.004880	0.005001	0.005663	0.005627
0.013595	0.013594	0.024076	0.015560	0.016636	0.015997
0.012105	0.012114	0.021409	0.013832	0.014789	0.014230
0.009761	0.009751	0.017304	0.011165	0.011953	0.011494
0.021390	0.022613	0.021513	0.036421	0.024573	0.024442
0.016563	0.017430	0.016663	0.028166	0.018994	0.018869
0.023762	0.025094	0.024918	0.024950	0.033483	0.025326
0.017200	0.018147	0.018075	0.017950	0.024148	0.018314
0.042015	0.041206	0.041691	0.042550	0.045820	0.053640

Figura 6.27: Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas definida em Ito et al. (2004)

Figura 6.28: Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas definida em Ito et al. (2004)

0.193360	0.008553	0.009757	0.010354	0.010807	0.011017
0.191605	0.008451	0.009653	0.010248	0.010726	0.010936
0.190773	0.008438	0.009606	0.010225	0.010660	0.010861
0.132356	0.005816	0.006669	0.007052	0.007374	0.007483
0.118130	0.005187	0.005900	0.006266	0.006553	0.006669
0.009104	0.207331	0.009535	0.011139	0.011504	0.013364
0.008540	0.194175	0.008907	0.010401	0.010788	0.012512
0.008073	0.184406	0.008436	0.009867	0.010229	0.011871
0.005488	0.126570	0.005736	0.006744	0.006998	0.008121
0.004895	0.112755	0.005119	0.005973	0.006197	0.007200
0.012695	0.014672	0.309559	0.017695	0.015945	0.019085
0.011233	0.013032	0.275503	0.015751	0.014149	0.016976
0.009065	0.010487	0.222497	0.012724	0.011448	0.013655
0.019321	0.020999	0.021812	0.441717	0.023832	0.027095
0.014878	0.016118	0.016889	0.342695	0.018365	0.020888
0.020775	0.019966	0.022815	0.024587	0.454915	0.028791
0.015056	0.014553	0.016630	0.017854	0.331043	0.020986
0.034653	0.028491	0.034977	0.038708	0.038467	0.752490
0.013999	0.007993	0.008688	0.009038	0.009164	0.009513
0.013835	0.007935	0.008612	0.008966	0.009094	0.009474
0.013819	0.007907	0.008579	0.008901	0.009031	0.009413
0.009556	0.005456	0.005947	0.006195	0.006279	0.006527
0.008576	0.004919	0.005312	0.005543	0.005575	0.005811
0.008345	0.015014	0.008811	0.009986	0.009978	0.010662
0.007821	0.014072	0.008223	0.009398	0.009358	0.009949
0.007403	0.013374	0.007785	0.008935	0.008867	0.009476
0.005087	0.009179	0.005367	0.006142	0.006113	0.006505
0.004561	0.008179	0.004781	0.005442	0.005419	0.005806
0.013540	0.015075	0.024008	0.015781	0.015208	0.016161
0.012028	0.013408	0.021263	0.014016	0.013492	0.014419
0.009768	0.010848	0.017212	0.011354	0.010904	0.011654
0.022122	0.023450	0.023163	0.034405	0.024187	0.024594
0.017200	0.018144	0.018006	0.026716	0.018742	0.019099
0.023328	0.023245	0.023549	0.025211	0.033752	0.025560
0.016980	0.016925	0.017127	0.018375	0.024698	0.018656
0.044738	0.040746	0.042991	0.043811	0.042742	0.053959

Figura 6.29: Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas definida em Chueinta et al. (2000)

Figura 6.30: Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas definida em Chueinta et al. (2000)

0.194431	0.008460	0.009603	0.010176	0.010229	0.011229
0.192594	0.008362	0.009520	0.010082	0.010135	0.011131
0.191808	0.008343	0.009465	0.010047	0.010066	0.011069
0.133087	0.005757	0.006568	0.006937	0.006973	0.007629
0.118790	0.005133	0.005817	0.006165	0.006201	0.006800
0.008851	0.209684	0.009866	0.010756	0.011510	0.012940
0.008285	0.196418	0.009214	0.010065	0.010788	0.012120
0.007841	0.186481	0.008732	0.009539	0.010234	0.011492
0.005343	0.128035	0.005936	0.006521	0.006996	0.007864
0.004766	0.114115	0.005296	0.005778	0.006210	0.006980
0.012583	0.013303	0.311748	0.016978	0.015934	0.019019
0.011173	0.011819	0.277291	0.015097	0.014152	0.016907
0.009020	0.009516	0.223832	0.012215	0.011431	0.013613
0.020039	0.019570	0.020213	0.445741	0.022863	0.027176
0.015475	0.015086	0.015654	0.344569	0.017657	0.020974
0.019712	0.018511	0.022395	0.024975	0.457770	0.028270
0.014306	0.013491	0.016309	0.018135	0.333348	0.020591
0.031896	0.027916	0.032541	0.036224	0.037503	0.754196
0.014135	0.007740	0.008457	0.009001	0.008826	0.009286
0.014021	0.007650	0.008373	0.008917	0.008766	0.009199
0.013965	0.007620	0.008318	0.008890	0.008720	0.009158
0.009702	0.005277	0.005802	0.006155	0.006059	0.006358
0.008686	0.004723	0.005171	0.005492	0.005401	0.005673
0.008261	0.014683	0.008581	0.009600	0.009679	0.010268
0.007750	0.013792	0.008036	0.008986	0.009042	0.009608
0.007330	0.013106	0.007655	0.008506	0.008567	0.009141
0.005053	0.008968	0.005244	0.005842	0.005882	0.006268
0.004526	0.008003	0.004686	0.005229	0.005256	0.005602
0.013838	0.014645	0.022885	0.016319	0.015574	0.015974
0.012251	0.013005	0.020338	0.014502	0.013816	0.014197
0.009908	0.010515	0.016449	0.011712	0.011161	0.011469
0.023294	0.022731	0.022746	0.034855	0.023555	0.024751
0.017994	0.017591	0.017603	0.026958	0.018209	0.019096
0.022414	0.022403	0.023573	0.024453	0.033119	0.025639
0.016312	0.016354	0.017145	0.017820	0.024120	0.018684
0.043099	0.040396	0.041365	0.043394	0.043635	0.051747

Figura 6.31: Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas de 5% do valor da medição

Figura 6.32: Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas de 5% do valor da medição

0.193208	0.008105	0.009275	0.010666	0.010755	0.011300	0.014014	0.007681	0.008384	0.009199	0.009089	0.009445
0.191382	0.008006	0.009184	0.010563	0.010664	0.011206	0.013930	0.007613	0.008317	0.009116	0.009011	0.009381
0.190594	0.007994	0.009136	0.010535	0.010592	0.011139	0.013860	0.007570	0.008302	0.009088	0.008951	0.009318
0.132218	0.005506	0.006337	0.007272	0.007338	0.007674	0.009661	0.005246	0.005746	0.006289	0.006235	0.006470
0.118007	0.004918	0.005608	0.006458	0.006521	0.006844	0.008593	0.004706	0.005138	0.005640	0.005552	0.005775
0.009388	0.208840	0.010073	0.010947	0.010846	0.013274	0.008418	0.015766	0.008845	0.009583	0.009486	0.010355
0.008790	0.195608	0.009410	0.010235	0.010172	0.012424	0.007897	0.014732	0.008272	0.008983	0.008881	0.009702
0.008320	0.185718	0.008914	0.009704	0.009648	0.011789	0.007484	0.014041	0.007856	0.008512	0.008414	0.009228
0.005664	0.127481	0.006063	0.006635	0.006595	0.008066	0.005140	0.009593	0.005400	0.005847	0.005771	0.006325
0.005053	0.113626	0.005411	0.005878	0.005839	0.007154	0.004591	0.008617	0.004819	0.005215	0.005153	0.005646
0.013174	0.013236	0.310292	0.016624	0.017267	0.019074	0.014005	0.014624	0.022882	0.015517	0.016085	0.016168
0.011686	0.011759	0.275988	0.014793	0.015338	0.016954	0.012430	0.013014	0.020341	0.013769	0.014299	0.014380
0.009427	0.009465	0.222751	0.011963	0.012396	0.013645	0.010045	0.010512	0.016348	0.011132	0.011532	0.011589
0.019393	0.019378	0.021740	0.443985	0.023952	0.026838	0.022823	0.022623	0.022850	0.034170	0.024220	0.024298
0.014985	0.014908	0.016833	0.343269	0.018477	0.020700	0.017635	0.017441	0.017650	0.026397	0.018765	0.018765
0.020261	0.020424	0.021716	0.024677	0.454797	0.028996	0.022645	0.023025	0.023429	0.025400	0.033427	0.026079
0.014672	0.014884	0.015831	0.017904	0.331223	0.021133	0.016461	0.016748	0.017015	0.018490	0.024561	0.018976
0.033778	0.030144	0.035438	0.037892	0.037580	0.751790	0.043636	0.041598	0.043279	0.043594	0.044629	0.053135

Figura 6.33: Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas de 10% do valor da medição

Figura 6.34: Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas de 10% do valor da medição

0.193085	0.008292	0.009768	0.010150	0.010557	0.011709	0.014145	0.007861	0.008471	0.009039	0.009181	0.009547
0.191270	0.008194	0.009667	0.010041	0.010481	0.011617	0.014036	0.007808	0.008393	0.008972	0.009126	0.009504
0.190462	0.008181	0.009622	0.010019	0.010409	0.011548	0.013940	0.007757	0.008335	0.008914	0.009052	0.009416
0.132128	0.005635	0.006679	0.006910	0.007203	0.007956	0.009658	0.005367	0.005799	0.006220	0.006281	0.006543
0.117931	0.005026	0.005911	0.006143	0.006398	0.007091	0.008656	0.004818	0.005184	0.005555	0.005603	0.005835
0.009756	0.207588	0.009952	0.010839	0.011239	0.013127	0.008753	0.015377	0.008927	0.009705	0.009748	0.010582
0.009143	0.194427	0.009302	0.010126	0.010542	0.012291	0.008186	0.014387	0.008321	0.009068	0.009099	0.009880
0.008649	0.184616	0.008805	0.009604	0.009991	0.011661	0.007754	0.013724	0.007894	0.008626	0.008645	0.009400
0.005886	0.126720	0.005990	0.006560	0.006833	0.007977	0.005337	0.009401	0.005444	0.005940	0.005945	0.006468
0.005252	0.112937	0.005348	0.005815	0.006053	0.007072	0.004791	0.008378	0.004851	0.005290	0.005295	0.005773
0.012889	0.014019	0.309831	0.017861	0.016679	0.018839	0.013755	0.014807	0.023749	0.015776	0.015584	0.015956
0.011414	0.012447	0.275617	0.015900	0.014801	0.016759	0.012216	0.013171	0.021083	0.013999	0.013827	0.014173
0.009212	0.010018	0.222485	0.012847	0.011977	0.013472	0.009882	0.010638	0.017001	0.011326	0.011189	0.011480
0.020012	0.020931	0.021078	0.442148	0.023702	0.027948	0.022512	0.022944	0.022627	0.033811	0.023819	0.024471
0.015433	0.016098	0.016346	0.342040	0.018287	0.021551	0.017456	0.017652	0.017482	0.026208	0.018377	0.018987
0.020108	0.020480	0.022653	0.026127	0.454152	0.028064	0.022531	0.023719	0.023773	0.025133	0.033421	0.025745
0.014550	0.014903	0.016500	0.018978	0.330924	0.020469	0.016460	0.017296	0.017371	0.018356	0.024540	0.018823
0.032820	0.029488	0.034446	0.037892	0.039772	0.750849	0.043642	0.040581	0.042791	0.043776	0.043959	0.052739

Figura 6.35: Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas de 20% do valor da medição

Figura 6.36: Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Proposta de incertezas de 20% do valor da medição

0.697326	-0.003177	-0.006671	-0.004683	-0.006609	0.001896
0.690574	-0.01019	-0.006626	-0.009034	-0.001464	0.003001
0.691284	-0.004198	-0.005222	-0.001576	-0.00379	0.000157
0.594783	-0.012311	-0.00809	-0.009294	-0.004274	-0.010555
0.549267	-0.012639	-0.008045	-0.009596	-0.010216	-0.009626
-0.006147	0.714912	-0.005073	-0.004156	-0.001176	0.000155
-0.007354	0.706618	-0.002756	-0.004586	-0.002561	0.001601
-0.006276	0.690203	-0.003479	-0.003651	-0.003559	-0.002815
-0.012644	0.57685	-0.010005	-0.007258	-0.008531	0.006603
-0.015725	0.540974	-0.009683	-0.013878	-0.00879	-0.003833
-0.004458	-0.002806	0.835579	-0.003802	-0.003492	-0.001937
-0.005537	-0.004686	0.818274	-0.003355	-0.004059	0.001512
-0.006956	-0.006574	0.787183	-0.005447	-0.000544	-0.003763
-0.004515	-0.001791	-0.003512	0.908365	-0.002253	-0.001989
-0.004035	-0.005228	-0.004912	0.906902	-0.002969	-0.002933
-0.001936	-0.000735	-0.002444	-0.001816	0.90936	-0.000114
-0.005544	-0.004875	-0.002799	-0.003705	0.90738	-0.001378
-0.007344	-0.006618	-0.00469	-0.00542	-0.001104	0.895778

Figura 6.37: Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Análise Fatorial Ortogonal - CP - Rotação Varimax

0.116700	0.055453	0.059430	0.065756	0.066071	0.120515
0.110582	0.057536	0.060291	0.064454	0.069920	0.118999
0.116846	0.056731	0.058309	0.069686	0.064210	0.120122
0.142400	0.067971	0.069483	0.077769	0.081717	0.176506
0.149089	0.067279	0.077332	0.081816	0.079687	0.208919
0.055375	0.108307	0.054489	0.061203	0.067180	0.105814
0.051935	0.108115	0.060439	0.062610	0.065793	0.107440
0.056275	0.116840	0.060858	0.071103	0.067561	0.127691
0.066170	0.147230	0.069952	0.080733	0.082481	0.194699
0.067650	0.161844	0.076016	0.083783	0.086323	0.212276
0.039215	0.039743	0.060542	0.047686	0.045311	0.057902
0.042666	0.045116	0.070734	0.049222	0.047848	0.065112
0.047916	0.048400	0.085854	0.054985	0.055861	0.080076
0.031774	0.032700	0.034445	0.034521	0.039861	0.035304
0.035473	0.031458	0.034457	0.035820	0.038494	0.036184
0.032739	0.032950	0.036704	0.037421	0.035087	0.036826
0.032731	0.032378	0.036010	0.038144	0.037231	0.039360
0.049143	0.049221	0.046138	0.051610	0.056233	0.112592

Figura 6.38: Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 1,5 - Análise Fatorial Ortogonal - CP - Rotação Varimax

Figura 6.39: Gráfico comparativo para o Perfil 1

Figura 6.40: Gráfico comparativo para o Perfil 2

Figura 6.41: *Gráfico comparativo para o Perfil 3* **Figura 6.42:** *Gráfico comparativo para o Perfil 4*

Figura 6.43: Gráfico comparativo para o Perfil 5 **Figura 6.44:** Gráfico comparativo para o Perfil 6

Simulações com outliers - distribuição exponencial com média 3

0.194888	0.008283	0.009251	0.010834	0.010438	0.01036	0.015133	0.007745	0.008283	0.009457	0.008742	0.008516
0.193112	0.008205	0.009159	0.010737	0.01032	0.010243	0.014972	0.007674	0.008194	0.009362	0.008663	0.008449
0.192189	0.008194	0.009135	0.010697	0.010298	0.010212	0.014906	0.007649	0.008153	0.009336	0.008616	0.008408
0.133452	0.005628	0.006298	0.007398	0.007102	0.007044	0.010367	0.005314	0.005665	0.00647	0.005979	0.005843
0.119092	0.004998	0.005598	0.006564	0.00634	0.006288	0.009248	0.004736	0.005052	0.005768	0.005358	0.005214
0.009082	0.209305	0.010312	0.011451	0.010883	0.011631	0.008321	0.015573	0.009104	0.009699	0.009329	0.009001
0.008474	0.196087	0.009649	0.010738	0.010187	0.010892	0.007807	0.014578	0.008551	0.009085	0.008739	0.008429
0.008027	0.186069	0.00916	0.010166	0.009669	0.010362	0.007394	0.013817	0.008063	0.008622	0.008296	0.007993
0.005492	0.12779	0.006239	0.006958	0.006597	0.007054	0.005087	0.00952	0.005557	0.005929	0.005693	0.00549
0.004867	0.113887	0.00556	0.006186	0.005845	0.006303	0.004531	0.008462	0.004953	0.005276	0.005073	0.004897
0.0133	0.013303	0.312391	0.017205	0.017236	0.016182	0.013746	0.013474	0.023005	0.0156	0.015356	0.01451
0.011854	0.011802	0.277869	0.015316	0.015292	0.014371	0.012181	0.011985	0.020506	0.013853	0.013655	0.01291
0.009507	0.009537	0.224317	0.012352	0.012338	0.011623	0.009842	0.00968	0.016472	0.011196	0.011023	0.010426
0.018806	0.021057	0.021465	0.444762	0.024878	0.023164	0.02181	0.022634	0.022806	0.034079	0.023574	0.02201
0.014537	0.01627	0.016582	0.343668	0.019222	0.017924	0.016876	0.017483	0.017574	0.026291	0.018222	0.017015
0.018954	0.01938	0.019779	0.022022	0.45601	0.025874	0.023993	0.024564	0.023941	0.025192	0.036016	0.023464
0.013832	0.014109	0.014376	0.016039	0.331841	0.018827	0.017458	0.017878	0.017435	0.01835	0.026148	0.01709
0.030535	0.026096	0.03286	0.036907	0.035504	0.781646	0.04247	0.039296	0.043147	0.043751	0.043628	0.054258

Figura 6.45: Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de incertezas definida em Norris et al. (2014)

Figura 6.46: Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de incertezas definida em Norris et al. (2014)

0.196801	0.007799	0.008636	0.009867	0.01118	0.009754	0.014988	0.007652	0.008478	0.009016	0.009811	0.008616
0.194987	0.007734	0.008551	0.009777	0.011062	0.009656	0.014796	0.007566	0.0084	0.00893	0.009705	0.008519
0.194065	0.007725	0.008529	0.009746	0.011037	0.009626	0.014744	0.007538	0.008354	0.008893	0.009678	0.008472
0.134726	0.005318	0.005882	0.006738	0.007624	0.006648	0.010272	0.00523	0.005786	0.006164	0.006719	0.005893
0.120209	0.00472	0.005239	0.005977	0.006797	0.00593	0.009151	0.004666	0.00517	0.005516	0.005997	0.005264
0.008682	0.211333	0.009439	0.010527	0.011477	0.011551	0.008185	0.015742	0.008468	0.009334	0.01004	0.009207
0.008107	0.197987	0.008827	0.009868	0.010744	0.010817	0.007688	0.014718	0.007948	0.008756	0.009382	0.008626
0.007681	0.187885	0.00839	0.009343	0.010204	0.010292	0.007293	0.013964	0.00753	0.008316	0.008934	0.008203
0.005259	0.129005	0.005718	0.006401	0.00697	0.007016	0.005	0.009628	0.005176	0.005717	0.006146	0.005625
0.004645	0.115001	0.005078	0.005677	0.006166	0.006255	0.004454	0.00859	0.004627	0.005114	0.005465	0.005009
0.013406	0.012567	0.319087	0.016735	0.017069	0.016376	0.013361	0.013468	0.024053	0.015137	0.015729	0.014316
0.011949	0.011152	0.283807	0.014893	0.015151	0.014547	0.011878	0.011955	0.0214	0.01345	0.013959	0.012727
0.009596	0.009015	0.229249	0.012016	0.01223	0.011771	0.009583	0.009671	0.017235	0.010875	0.011275	0.010282
0.017988	0.019376	0.019491	0.453286	0.026342	0.022895	0.02129	0.022135	0.022241	0.035697	0.024424	0.022269
0.01388	0.014933	0.015028	0.351536	0.020353	0.01769	0.016548	0.017137	0.017245	0.027737	0.018916	0.017288
0.016323	0.018368	0.017741	0.018994	0.446336	0.020554	0.023398	0.024947	0.023444	0.023848	0.035078	0.022823
0.011963	0.013409	0.012933	0.013868	0.323836	0.015009	0.01694	0.018132	0.017005	0.017346	0.025539	0.016541
0.029733	0.026673	0.028375	0.034751	0.045422	0.793613	0.040757	0.040058	0.03941	0.042891	0.046242	0.056899

Figura 6.47: Perfis médios em bases com outliers
- Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de
incertezas definida em Polissar et al. (1998)

Figura 6.48: Desvios padrões em bases com
outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Proposta
de incertezas definida em Polissar et al. (1998)

0.195235	0.007713	0.008542	0.010057	0.011772	0.010010	0.014958	0.007862	0.00838	0.009052	0.009989	0.008707
0.193438	0.007645	0.008446	0.009963	0.011638	0.009909	0.01481	0.00777	0.008296	0.008955	0.009877	0.008636
0.192568	0.007633	0.008447	0.009938	0.011619	0.009881	0.014737	0.007743	0.00827	0.008927	0.009863	0.00859
0.133642	0.005250	0.005817	0.006863	0.008018	0.006820	0.010226	0.00538	0.005737	0.0062	0.006857	0.005969
0.119250	0.004665	0.005177	0.006096	0.007158	0.006086	0.009162	0.004787	0.005144	0.005529	0.006103	0.005333
0.009102	0.210693	0.009376	0.010870	0.012449	0.011076	0.008431	0.015756	0.008625	0.009591	0.010239	0.009037
0.008502	0.197387	0.008775	0.010195	0.011653	0.010375	0.00789	0.014766	0.00806	0.00897	0.009569	0.008475
0.008052	0.187300	0.008331	0.009653	0.011062	0.009874	0.007489	0.014	0.007635	0.00851	0.009107	0.008036
0.005513	0.128591	0.005677	0.006611	0.007562	0.006727	0.005135	0.009617	0.005252	0.005856	0.006254	0.005513
0.004883	0.114635	0.005051	0.005871	0.006702	0.006007	0.004576	0.008578	0.004698	0.005212	0.005577	0.004909
0.013478	0.012638	0.314453	0.015546	0.019381	0.016044	0.013817	0.013186	0.024271	0.015358	0.016141	0.014479
0.012012	0.011215	0.279707	0.013825	0.017203	0.014254	0.012267	0.011717	0.021667	0.013643	0.014342	0.012869
0.009641	0.009059	0.225789	0.011157	0.013883	0.011532	0.009919	0.009453	0.017443	0.011021	0.011586	0.010384
0.018998	0.019799	0.021753	0.452852	0.026554	0.023929	0.021672	0.022278	0.023034	0.036941	0.024193	0.021932
0.014678	0.015302	0.016806	0.349936	0.020519	0.018520	0.016781	0.01719	0.017802	0.028585	0.01868	0.016947
0.016792	0.017527	0.018427	0.019980	0.439849	0.022422	0.024236	0.02499	0.024342	0.025808	0.033288	0.022968
0.012384	0.012859	0.013474	0.014596	0.318690	0.016425	0.017529	0.01816	0.017734	0.018716	0.024209	0.016692
0.031832	0.030089	0.035952	0.035991	0.044288	0.790109	0.043529	0.042423	0.044327	0.043436	0.046869	0.054226

Figura 6.49: Perfis médios em bases com outliers
- Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de
incertezas definida em Ito et al. (2004)

Figura 6.50: Desvios padrões em bases com
outliers - Dist. Exponencial com média 3 -
Proposta de incertezas definida em Ito et al. (2004)

0.192907	0.008404	0.009216	0.010808	0.010879	0.010521	0.014622	0.007677	0.008278	0.009074	0.009097	0.008554
0.191209	0.008328	0.009108	0.010706	0.010760	0.010410	0.014485	0.007605	0.008229	0.008979	0.009031	0.008485
0.190291	0.008307	0.009096	0.010665	0.010716	0.010370	0.014468	0.007591	0.008157	0.008956	0.008976	0.008441
0.132082	0.005709	0.006264	0.007378	0.007398	0.007155	0.010059	0.005251	0.005644	0.006207	0.006261	0.005881
0.117866	0.005072	0.005567	0.006540	0.006599	0.006386	0.008968	0.004692	0.005058	0.005549	0.005555	0.005222
0.009633	0.206557	0.010043	0.011840	0.011327	0.011130	0.008551	0.015249	0.008982	0.010119	0.009415	0.009066
0.008985	0.193470	0.009391	0.011109	0.010602	0.010423	0.008005	0.014238	0.008407	0.009481	0.008801	0.00848
0.008506	0.183624	0.008916	0.010519	0.010052	0.009914	0.007603	0.013549	0.007973	0.009017	0.008372	0.008044
0.005812	0.126062	0.006069	0.007185	0.006862	0.006749	0.005219	0.009334	0.005488	0.006191	0.005763	0.005531
0.005155	0.112271	0.005404	0.006395	0.006075	0.006031	0.004655	0.008291	0.004899	0.00551	0.00511	0.004924
0.013829	0.014109	0.311415	0.016187	0.017300	0.017780	0.013976	0.014398	0.023697	0.015212	0.015606	0.014726
0.012297	0.012541	0.277138	0.014398	0.015338	0.015782	0.012389	0.012815	0.021094	0.013502	0.013846	0.013089
0.009874	0.010100	0.223737	0.011629	0.012375	0.012776	0.009974	0.010358	0.017022	0.010914	0.01118	0.010585
0.019813	0.021215	0.023455	0.438484	0.025057	0.022813	0.022304	0.022819	0.023469	0.033126	0.023583	0.022053
0.015289	0.016343	0.018135	0.339751	0.019356	0.017638	0.017253	0.017712	0.018159	0.025829	0.018297	0.017048
0.021979	0.021586	0.021990	0.025537	0.451534	0.025271	0.02356	0.023654	0.023246	0.025221	0.033796	0.022789
0.016025	0.015724	0.015954	0.018560	0.328342	0.018396	0.01715	0.017229	0.016948	0.018353	0.024558	0.016594
0.028448	0.030578	0.029102	0.042309	0.039428	0.780455	0.04212	0.042565	0.040192	0.044715	0.045053	0.053831

Figura 6.51: Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de incertezas definida em Chueinta et al. (2000)

Figura 6.52: Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de incertezas definida em Chueinta et al. (2000)

0.195348	0.008373	0.009256	0.010471	0.010193	0.010851	0.015060	0.007731	0.007976	0.008813	0.008664	0.008688
0.193561	0.008297	0.009161	0.010379	0.010075	0.010733	0.014901	0.007681	0.007905	0.008709	0.008576	0.008630
0.192666	0.008279	0.009135	0.010335	0.010051	0.010690	0.014899	0.007658	0.007879	0.008679	0.008527	0.008589
0.133766	0.005690	0.006299	0.007147	0.006937	0.007381	0.010323	0.005313	0.005469	0.006021	0.005919	0.005977
0.119387	0.005056	0.005597	0.006340	0.006188	0.006586	0.009234	0.004729	0.004892	0.005374	0.005260	0.005297
0.009050	0.209966	0.010138	0.011262	0.011303	0.011168	0.008305	0.015981	0.009002	0.009741	0.009446	0.009071
0.008447	0.196711	0.009483	0.010555	0.010582	0.010459	0.007776	0.014959	0.008448	0.009096	0.008805	0.008522
0.007998	0.186663	0.009003	0.009994	0.010045	0.009950	0.007376	0.014220	0.007988	0.008631	0.008388	0.008068
0.005467	0.128210	0.006130	0.006837	0.006855	0.006772	0.005060	0.009786	0.005513	0.005949	0.005764	0.005541
0.004846	0.114250	0.005461	0.006083	0.006074	0.006053	0.004520	0.008708	0.004906	0.005296	0.005127	0.004947
0.013251	0.013893	0.310857	0.017322	0.015820	0.016017	0.014311	0.014522	0.023315	0.015687	0.015433	0.014736
0.011809	0.012329	0.276500	0.015408	0.014036	0.014231	0.012709	0.012906	0.020755	0.013945	0.013688	0.013114
0.009468	0.009966	0.223225	0.012429	0.011320	0.011505	0.010226	0.010406	0.016737	0.011248	0.011041	0.010594
0.018875	0.018347	0.021149	0.444269	0.024175	0.024478	0.022890	0.021746	0.023304	0.034250	0.023717	0.022725
0.014581	0.014174	0.016338	0.343290	0.018687	0.018944	0.017692	0.016818	0.018046	0.026519	0.018361	0.017588
0.019037	0.018479	0.022186	0.024837	0.458799	0.025359	0.022699	0.022824	0.023574	0.025273	0.034995	0.023339
0.013877	0.013443	0.016122	0.018081	0.334061	0.018441	0.016529	0.016620	0.017152	0.018397	0.025447	0.016983
0.028566	0.027874	0.033960	0.034961	0.034799	0.780382	0.041715	0.040292	0.042756	0.043667	0.043649	0.053888

Figura 6.53: Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de incertezas de 20% do valor da medição

Figura 6.54: Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de incertezas de 20% do valor da medição

0.193437	0.008713	0.009359	0.010937	0.010844	0.010403	0.015123	0.008002	0.008209	0.009152	0.009252	0.008524
0.191664	0.008641	0.009264	0.010843	0.010717	0.010285	0.014957	0.007935	0.008113	0.009059	0.009166	0.008458
0.190773	0.008615	0.009246	0.010796	0.010680	0.010253	0.014881	0.007924	0.008078	0.009026	0.009133	0.008408
0.132425	0.005923	0.006374	0.007469	0.007375	0.007072	0.010331	0.005491	0.005609	0.006241	0.006364	0.005839
0.118186	0.005262	0.005661	0.006619	0.006580	0.006313	0.009263	0.004896	0.005011	0.005602	0.005671	0.005200
0.009328	0.208210	0.010478	0.011385	0.011914	0.011018	0.008466	0.015396	0.009095	0.009611	0.009908	0.008941
0.008700	0.195039	0.009805	0.010677	0.011153	0.010315	0.007932	0.014398	0.008522	0.008997	0.009270	0.008364
0.008242	0.185085	0.009300	0.010110	0.010582	0.009817	0.007517	0.013705	0.008091	0.008538	0.008809	0.007940
0.005630	0.127098	0.006337	0.006909	0.007225	0.006679	0.005146	0.009458	0.005565	0.005879	0.006029	0.005470
0.004993	0.113246	0.005643	0.006152	0.006403	0.005971	0.004561	0.008391	0.004967	0.005237	0.005375	0.004855
0.013647	0.013430	0.310386	0.016764	0.016699	0.017299	0.014214	0.013996	0.024606	0.015663	0.015660	0.014476
0.012154	0.011920	0.276077	0.014922	0.014805	0.015367	0.012620	0.012445	0.021862	0.013926	0.013917	0.012863
0.009747	0.009624	0.222823	0.012038	0.011949	0.012432	0.010176	0.010028	0.017627	0.011227	0.011214	0.010370
0.019743	0.020014	0.023171	0.441400	0.024114	0.024450	0.022827	0.022568	0.023982	0.032801	0.024140	0.021997
0.015260	0.015457	0.017915	0.340986	0.018620	0.018924	0.017668	0.017400	0.018502	0.025385	0.018629	0.017016
0.020325	0.019236	0.021272	0.024929	0.453321	0.026113	0.023285	0.022820	0.022955	0.025024	0.034569	0.023632
0.014814	0.013987	0.015445	0.018135	0.329981	0.018987	0.016974	0.016615	0.016700	0.018204	0.025086	0.017226
0.030932	0.030500	0.031444	0.038929	0.037038	0.778302	0.030932	0.030500	0.031444	0.038929	0.037038	0.778302

Figura 6.55: Perfis médios em bases com outliers
- Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de
incertezas de 10% do valor da medição

Figura 6.56: Desvios padrões em bases com
outliers - Dist. Exponencial com média 3 -
Proposta de incertezas de 10% do valor da medição

0.193083	0.008347	0.009929	0.010716	0.010670	0.010566	0.014988	0.007601	0.008393	0.008890	0.009081	0.008612
0.191328	0.008269	0.009819	0.010612	0.010553	0.010454	0.014805	0.007536	0.008332	0.008802	0.008988	0.008543
0.190435	0.008246	0.009802	0.010575	0.010512	0.010416	0.014817	0.007508	0.008273	0.008748	0.008930	0.008502
0.132170	0.005670	0.006755	0.007311	0.007258	0.007185	0.010269	0.005187	0.005741	0.006078	0.006202	0.005914
0.117954	0.005038	0.006005	0.006484	0.006470	0.006414	0.009199	0.004641	0.005123	0.005410	0.005527	0.005269
0.009500	0.206910	0.010327	0.011775	0.011029	0.011386	0.008349	0.014966	0.009285	0.010057	0.009275	0.009068
0.008859	0.193809	0.009664	0.011046	0.010322	0.010663	0.007829	0.014025	0.008707	0.009436	0.008686	0.008483
0.008390	0.183923	0.009168	0.010460	0.009789	0.010142	0.007427	0.013351	0.008269	0.008936	0.008254	0.008053
0.005733	0.126276	0.006245	0.007147	0.006680	0.006903	0.005077	0.009198	0.005650	0.006128	0.005669	0.005526
0.005084	0.112502	0.005562	0.006364	0.005915	0.006171	0.004546	0.008209	0.005051	0.005468	0.005034	0.004926
0.013304	0.013619	0.310257	0.016763	0.017030	0.017557	0.013627	0.014494	0.023482	0.015135	0.015711	0.014950
0.011833	0.012108	0.275985	0.014906	0.015092	0.015590	0.012072	0.012886	0.020934	0.013437	0.013935	0.013299
0.009497	0.009755	0.222722	0.012036	0.012179	0.012618	0.009720	0.010403	0.016812	0.010845	0.011237	0.010725
0.020501	0.021458	0.022329	0.440092	0.025017	0.023408	0.023260	0.023373	0.023279	0.034669	0.023728	0.022620
0.015849	0.016557	0.017279	0.340018	0.019320	0.018118	0.017909	0.018093	0.017953	0.026705	0.018348	0.017470
0.022109	0.021584	0.022035	0.025064	0.453307	0.025298	0.023729	0.023482	0.022640	0.024845	0.034308	0.022807
0.016107	0.015712	0.015983	0.018200	0.330071	0.018405	0.017358	0.017087	0.016450	0.018174	0.025068	0.016622
0.028264	0.030217	0.030134	0.040431	0.038786	0.778706	0.042136	0.041851	0.041530	0.044830	0.045328	0.054361

Figura 6.57: Perfis médios em bases com outliers
- Dist. Exponencial com média 3 - Proposta de
incertezas de 20% do valor da medição

Figura 6.58: Desvios padrões em bases com
outliers - Dist. Exponencial com média 3 -
Proposta de incertezas de 20% do valor da medição

0.550817	-0.014559	-0.010491	-0.010513	-0.015248	-0.004681
0.541374	-0.018086	-0.01454	-0.017558	-0.011646	-0.013018
0.548216	-0.010562	-0.015096	-0.015179	-0.017529	-0.009683
0.425515	-0.031188	-0.034452	-0.027854	-0.026406	-0.003618
0.381521	-0.041443	-0.028398	-0.024384	-0.026928	-0.010378
-0.012223	0.567434	-0.012797	-0.016111	-0.01263	-0.005838
-0.013803	0.555297	-0.014552	-0.018295	-0.01071	-0.005168
-0.015432	0.535886	-0.020149	-0.016117	-0.023314	0.00146
-0.033086	0.407356	-0.02831	-0.026811	-0.01809	-0.02667
-0.035904	0.380604	-0.031189	-0.023772	-0.02427	-0.018207
-0.007855	-0.008044	0.705685	-0.010623	-0.008771	-0.002272
-0.009774	-0.011773	0.684215	-0.013087	-0.016724	-0.004009
-0.017981	-0.019549	0.623976	-0.009897	-0.016017	-0.007846
-0.005704	-0.006157	-0.009233	0.805909	-0.007075	-0.00153
-0.008693	-0.008481	-0.009232	0.799973	-0.009581	-0.007154
-0.005831	-0.004713	-0.008034	-0.002937	0.80696	-0.007211
-0.007673	-0.010247	-0.012052	-0.012955	0.79734	-0.001742
-0.018671	-0.018115	-0.011409	-0.013374	-0.010563	0.760187

0.157714	0.093497	0.093453	0.095441	0.098063	0.172071
0.159931	0.091068	0.091184	0.102268	0.099152	0.174855
0.161909	0.097447	0.092217	0.099334	0.096968	0.173176
0.188339	0.113641	0.106596	0.113824	0.111796	0.234875
0.191662	0.1209	0.114672	0.120407	0.118857	0.265741
0.093436	0.145981	0.089492	0.095599	0.095857	0.175197
0.093958	0.148397	0.089591	0.093678	0.095501	0.170915
0.096705	0.16239	0.089505	0.101961	0.094421	0.191139
0.11563	0.187642	0.109523	0.112111	0.118267	0.236116
0.117581	0.192268	0.110272	0.118334	0.119077	0.252273
0.065589	0.065741	0.093782	0.072907	0.065697	0.097763
0.068825	0.064477	0.096819	0.075069	0.075333	0.105995
0.080688	0.081799	0.123741	0.08814	0.087451	0.138713
0.047896	0.046635	0.048527	0.061592	0.054233	0.064354
0.04377	0.048586	0.046743	0.06463	0.054113	0.068654
0.047845	0.047577	0.047873	0.055122	0.05136	0.060412
0.048293	0.051499	0.049325	0.054154	0.058495	0.068396
0.086964	0.074503	0.085731	0.086803	0.084259	0.225792

Figura 6.59: Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Análise Fatorial Ortogonal - CP - Rotação Varimax

Figura 6.60: Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 3 - Análise Fatorial Ortogonal - CP - Rotação Varimax

Figura 6.61: Gráfico comparativo para o Perfil 1

Figura 6.62: Gráfico comparativo para o Perfil 2

Figura 6.63: Gráfico comparativo para o Perfil 3 **Figura 6.64:** Gráfico comparativo para o Perfil 4

Figura 6.65: Gráfico comparativo para o Perfil 5 **Figura 6.66:** Gráfico comparativo para o Perfil 6

Simulações com outliers - distribuição exponencial com média 9

0.195366	0.008553	0.010464	0.011443	0.011231	0.006473	0.014872	0.007723	0.008369	0.008882	0.008565	0.005576
0.193541	0.008470	0.010349	0.011345	0.011137	0.006404	0.014762	0.007676	0.008299	0.008811	0.008455	0.005532
0.192687	0.008436	0.010334	0.011293	0.011105	0.006376	0.014646	0.007629	0.008252	0.008766	0.008425	0.005504
0.133795	0.005788	0.007120	0.007816	0.007644	0.004424	0.010142	0.005336	0.005727	0.006112	0.005858	0.00383
0.119377	0.005170	0.006326	0.006946	0.006823	0.003936	0.009076	0.004727	0.005122	0.005419	0.005225	0.003423
0.009663	0.209891	0.010783	0.012246	0.012206	0.007254	0.008303	0.015352	0.008857	0.009696	0.009428	0.006008
0.009004	0.196625	0.010103	0.011481	0.011449	0.006780	0.007781	0.014428	0.008313	0.0091	0.008817	0.00562
0.008576	0.186604	0.009593	0.010876	0.010843	0.006439	0.007391	0.01365	0.00787	0.008595	0.008374	0.005334
0.005864	0.128100	0.006541	0.007445	0.007415	0.004402	0.005088	0.009362	0.005388	0.005939	0.005728	0.003657
0.005186	0.114250	0.005803	0.006604	0.006585	0.003910	0.004526	0.00837	0.004837	0.00528	0.005126	0.003273
0.013429	0.014766	0.310726	0.017271	0.018015	0.010766	0.014084	0.014359	0.023571	0.015411	0.015066	0.009519
0.011947	0.013125	0.276358	0.015353	0.015995	0.009579	0.012498	0.012785	0.020982	0.013718	0.013402	0.008485
0.009606	0.010599	0.223153	0.012392	0.012914	0.007714	0.01012	0.01032	0.016971	0.011097	0.01082	0.006827
0.019250	0.019677	0.023587	0.443631	0.027813	0.014571	0.022027	0.02306	0.02365	0.035286	0.024129	0.014064
0.014899	0.015190	0.018226	0.342801	0.021497	0.011274	0.017011	0.017813	0.018259	0.027302	0.018629	0.010867
0.020597	0.018966	0.020887	0.022353	0.451142	0.016240	0.023047	0.023282	0.023841	0.024676	0.034008	0.015131
0.015015	0.013834	0.015207	0.016246	0.328341	0.011837	0.01675	0.016952	0.017343	0.017978	0.024731	0.011026
0.022198	0.021956	0.024440	0.032458	0.027845	0.861621	0.037609	0.037563	0.038869	0.042382	0.039154	0.050604

Figura 6.67: Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de incertezas definida em Norris et al. (2014)

Figura 6.68: Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de incertezas definida em Norris et al. (2014)

0.198178	0.008071	0.008679	0.010786	0.011709	0.006497	0.014374	0.007549	0.007772	0.008697	0.009296	0.005684
0.196340	0.008002	0.008594	0.010701	0.011609	0.006426	0.014266	0.007468	0.007680	0.008653	0.009226	0.005630
0.195461	0.007970	0.008579	0.010650	0.011575	0.006402	0.014191	0.007445	0.007669	0.008598	0.009162	0.005598
0.135713	0.005472	0.005910	0.007374	0.007979	0.004442	0.009855	0.005192	0.005310	0.005968	0.006357	0.003903
0.121050	0.004889	0.005251	0.006553	0.007126	0.003955	0.008783	0.004609	0.004737	0.005321	0.005684	0.003476
0.008878	0.212264	0.010262	0.011323	0.012958	0.007302	0.008048	0.016229	0.008656	0.009241	0.010069	0.005891
0.008270	0.198832	0.009612	0.010613	0.012157	0.006827	0.007523	0.015187	0.008113	0.008651	0.009431	0.005508
0.007886	0.188729	0.009133	0.010060	0.011516	0.006483	0.007158	0.014399	0.007688	0.008212	0.008942	0.005220
0.005395	0.129521	0.006234	0.006889	0.007884	0.004437	0.004914	0.009916	0.005271	0.005645	0.006129	0.003586
0.004755	0.115513	0.005510	0.006091	0.006991	0.003935	0.004397	0.008866	0.004703	0.005046	0.005496	0.003197
0.013792	0.013350	0.318302	0.016983	0.018427	0.010739	0.013599	0.013110	0.024478	0.015045	0.015563	0.009291
0.012269	0.011865	0.283111	0.015098	0.016365	0.009559	0.012081	0.011664	0.021811	0.013369	0.013849	0.008283
0.009879	0.009583	0.228688	0.012194	0.013221	0.007699	0.009759	0.009419	0.017625	0.010806	0.011163	0.006676
0.018226	0.020761	0.021962	0.450939	0.027453	0.014637	0.020886	0.022564	0.023178	0.034592	0.024192	0.013795
0.014096	0.016024	0.016971	0.349148	0.021225	0.011315	0.016188	0.017443	0.017940	0.026843	0.018736	0.010668
0.016326	0.016299	0.017346	0.018682	0.440795	0.014668	0.023592	0.023959	0.024591	0.023712	0.033987	0.014633
0.011932	0.011905	0.012651	0.013599	0.320305	0.010706	0.017142	0.017410	0.017887	0.017235	0.024664	0.010636
0.021554	0.020950	0.023205	0.032317	0.040705	0.863971	0.036361	0.035386	0.038040	0.042096	0.045241	0.047974

Figura 6.69: Perfis médios em bases com outliers
- Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de
incertezas definida em Polissar et al. (1998)

Figura 6.70: Desvios padrões em bases com
outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Proposta
de incertezas definida em Polissar et al. (1998)

0.195097	0.008186	0.009021	0.010197	0.012140	0.006321	0.015138	0.007945	0.008416	0.008911	0.009732	0.005711
0.193278	0.008104	0.008924	0.010110	0.012028	0.006249	0.015023	0.007883	0.008352	0.008824	0.009621	0.005658
0.192449	0.008078	0.008915	0.010073	0.011997	0.006229	0.014942	0.007835	0.008318	0.008782	0.009585	0.00563
0.133584	0.005546	0.006142	0.006965	0.008268	0.004320	0.010348	0.005458	0.005749	0.0061	0.006655	0.003927
0.119169	0.004958	0.005456	0.006193	0.007386	0.003849	0.009249	0.004858	0.005132	0.005434	0.005939	0.003489
0.009446	0.210227	0.010350	0.011494	0.012974	0.007495	0.008486	0.016275	0.009021	0.009557	0.010035	0.006061
0.008805	0.196946	0.009698	0.010776	0.012169	0.007007	0.007964	0.015305	0.008455	0.008961	0.00939	0.005668
0.008387	0.186903	0.009208	0.010214	0.011528	0.006653	0.007557	0.014501	0.008024	0.008476	0.00889	0.005385
0.005737	0.128264	0.006287	0.006996	0.007892	0.004555	0.005191	0.009965	0.005501	0.00582	0.006093	0.003699
0.005069	0.114430	0.005570	0.006193	0.007009	0.004045	0.004633	0.008909	0.004936	0.005221	0.005451	0.003282
0.014255	0.013868	0.314503	0.017113	0.018948	0.010710	0.013675	0.014085	0.024654	0.015675	0.015912	0.009264
0.012679	0.012328	0.279710	0.015220	0.016822	0.009529	0.012135	0.012522	0.021931	0.013939	0.014183	0.008242
0.010210	0.009958	0.225849	0.012282	0.013582	0.007675	0.009788	0.0101	0.01775	0.01128	0.011432	0.006647
0.020529	0.020252	0.023081	0.449950	0.028885	0.013739	0.021533	0.023112	0.023869	0.036271	0.024899	0.01374
0.015891	0.015632	0.017838	0.347679	0.022326	0.010632	0.016622	0.017875	0.018452	0.028013	0.019248	0.010623
0.017569	0.017999	0.018509	0.018613	0.437709	0.014339	0.024657	0.025149	0.025148	0.023977	0.034	0.014437
0.012872	0.013194	0.013549	0.013576	0.317747	0.010482	0.017932	0.018299	0.018241	0.017402	0.024698	0.010501
0.024974	0.025127	0.027390	0.036356	0.040590	0.866171	0.039074	0.039394	0.040314	0.045056	0.04466	0.049145

Figura 6.71: Perfis médios em bases com outliers
- Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de
incertezas definida em Ito et al. (2004)

Figura 6.72: Desvios padrões em bases com
outliers - Dist. Exponencial com média 9 -
Proposta de incertezas definida em Ito et al. (2004)

0.192522	0.009082	0.010043	0.011836	0.011004	0.006675
0.190750	0.009000	0.009937	0.011747	0.010909	0.006599
0.189950	0.008950	0.009912	0.011680	0.010870	0.006574
0.131802	0.006153	0.006829	0.008089	0.007484	0.004559
0.117598	0.005497	0.006068	0.007178	0.006682	0.004059
0.009816	0.206031	0.010744	0.012167	0.012933	0.007183
0.009147	0.193015	0.010064	0.011405	0.012127	0.006717
0.008718	0.183161	0.009558	0.010804	0.011488	0.006378
0.005958	0.125692	0.006508	0.007395	0.007850	0.004361
0.005263	0.112065	0.005774	0.006557	0.006975	0.003874
0.014301	0.015611	0.307770	0.018293	0.017291	0.010629
0.012717	0.013877	0.273723	0.016272	0.015343	0.009455
0.010218	0.011205	0.221005	0.013132	0.012391	0.007612
0.020675	0.022663	0.024011	0.436514	0.026511	0.015332
0.015979	0.017462	0.018519	0.337698	0.020482	0.011868
0.023733	0.021378	0.024665	0.026489	0.448934	0.015101
0.017281	0.015590	0.017959	0.019272	0.326293	0.011023
0.023572	0.023568	0.026911	0.033472	0.034433	0.862001

0.014789	0.008002	0.008521	0.009056	0.008956	0.005797
0.01467	0.007943	0.008458	0.008981	0.008859	0.005759
0.014604	0.007903	0.008432	0.008924	0.008817	0.005727
0.010129	0.005498	0.005836	0.006203	0.006127	0.003987
0.009011	0.004887	0.00521	0.005521	0.005469	0.003556
0.008503	0.015333	0.009047	0.009844	0.009295	0.005912
0.007978	0.014346	0.0085	0.009249	0.00871	0.005528
0.007579	0.013635	0.008032	0.008756	0.008242	0.005249
0.005203	0.009319	0.005526	0.006013	0.005666	0.0036
0.004637	0.008374	0.004936	0.005372	0.005051	0.003212
0.014458	0.015266	0.024	0.015344	0.015032	0.009514
0.012837	0.013579	0.021466	0.013688	0.013376	0.008467
0.010387	0.010958	0.017322	0.011046	0.010808	0.006823
0.022892	0.023422	0.023617	0.034365	0.023889	0.014104
0.017738	0.018073	0.018282	0.026598	0.018534	0.010898
0.023316	0.022964	0.024362	0.024407	0.034856	0.014576
0.016913	0.016745	0.017744	0.017752	0.025288	0.010613
0.038127	0.038149	0.040254	0.042847	0.043661	0.051028

Figura 6.73: Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de incertezas definida em Chueinta et al. (2000)

Figura 6.74: Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de incertezas definida em Chueinta et al. (2000)

0.195409	0.008956	0.009966	0.011311	0.011027	0.006548
0.193577	0.008873	0.009860	0.011219	0.010932	0.006475
0.192762	0.008830	0.009837	0.011157	0.010893	0.006447
0.133824	0.006064	0.006775	0.007728	0.007503	0.004475
0.119416	0.005419	0.006021	0.006861	0.006694	0.003981
0.009134	0.209832	0.010785	0.012206	0.012266	0.007327
0.008510	0.196570	0.010104	0.011442	0.011509	0.006847
0.008108	0.186553	0.009597	0.010842	0.010897	0.006504
0.005540	0.128077	0.006536	0.007422	0.007450	0.004447
0.004897	0.114220	0.005803	0.006586	0.006619	0.003949
0.014014	0.014585	0.309931	0.016223	0.017593	0.010836
0.012468	0.012961	0.275650	0.014425	0.015618	0.009641
0.010030	0.010465	0.222587	0.011642	0.012610	0.007763
0.018954	0.020294	0.024448	0.442658	0.026049	0.014480
0.014673	0.015659	0.018890	0.342048	0.020133	0.011207
0.021464	0.019672	0.022836	0.025899	0.454298	0.015672
0.015631	0.014330	0.016620	0.018825	0.330758	0.011423
0.021589	0.018640	0.023754	0.031506	0.027151	0.861978

0.014327	0.007795	0.008232	0.008935	0.008594	0.005728
0.014231	0.007720	0.008160	0.008859	0.008506	0.005690
0.014172	0.007680	0.008146	0.008828	0.008456	0.005656
0.009794	0.005377	0.005659	0.006131	0.005875	0.003928
0.008794	0.004766	0.005037	0.005466	0.005255	0.003509
0.008292	0.015650	0.008694	0.009687	0.009359	0.006113
0.007775	0.014692	0.008141	0.009090	0.008771	0.005716
0.007363	0.013900	0.007725	0.008600	0.008308	0.005424
0.005098	0.009548	0.005301	0.005933	0.005708	0.003724
0.004523	0.008542	0.004750	0.005267	0.005098	0.003322
0.013970	0.014228	0.023665	0.014830	0.014836	0.009596
0.012402	0.012643	0.021043	0.013177	0.013196	0.008554
0.010030	0.010209	0.017046	0.010660	0.010650	0.006891
0.022104	0.023362	0.023683	0.034111	0.024404	0.013817
0.017081	0.018059	0.018315	0.026382	0.018848	0.010663
0.022346	0.022434	0.023112	0.024648	0.034210	0.013758
0.016257	0.016344	0.016820	0.017971	0.024863	0.010023
0.036590	0.033797	0.038278	0.041890	0.039395	0.050775

Figura 6.75: Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de incertezas de 5% do valor da medição

Figura 6.76: Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de incertezas de 5% do valor da medição

0.193429	0.008735	0.010447	0.011201	0.011771	0.006329	0.014271	0.007936	0.008626	0.008881	0.008988	0.005627
0.191623	0.008658	0.010342	0.011107	0.011668	0.006259	0.014168	0.007833	0.008555	0.008800	0.008898	0.005588
0.190825	0.008611	0.010309	0.011048	0.011625	0.006234	0.014146	0.007804	0.008512	0.008762	0.008866	0.005569
0.132448	0.005917	0.007106	0.007652	0.008005	0.004324	0.009744	0.005440	0.005883	0.006084	0.006170	0.003877
0.118182	0.005285	0.006319	0.006793	0.007147	0.003849	0.008753	0.004821	0.005275	0.005432	0.005511	0.003451
0.009482	0.208596	0.010916	0.012410	0.012531	0.007261	0.008285	0.015488	0.008761	0.009645	0.009606	0.005897
0.008833	0.195414	0.010226	0.011631	0.011752	0.006786	0.007764	0.014512	0.008193	0.009039	0.009001	0.005529
0.008415	0.185445	0.009709	0.011023	0.011135	0.006443	0.007352	0.013762	0.007764	0.008556	0.008527	0.005241
0.005750	0.127299	0.006613	0.007542	0.007609	0.004407	0.005069	0.009437	0.005331	0.005893	0.005852	0.003582
0.005084	0.113525	0.005874	0.006691	0.006761	0.003912	0.004509	0.008460	0.004761	0.005248	0.005241	0.003205
0.013934	0.015205	0.307030	0.018637	0.018038	0.010183	0.014339	0.014706	0.023822	0.015700	0.015264	0.009329
0.012394	0.013513	0.273030	0.016571	0.016015	0.009060	0.012755	0.013060	0.021174	0.013989	0.013574	0.008300
0.009969	0.010914	0.220442	0.013370	0.012932	0.007295	0.010320	0.010560	0.017154	0.011290	0.010971	0.006697
0.020927	0.020730	0.023465	0.437884	0.026369	0.015465	0.022458	0.023522	0.023544	0.033604	0.024257	0.014328
0.016200	0.015992	0.018119	0.338226	0.020381	0.011974	0.017339	0.018149	0.018218	0.026034	0.018723	0.011055
0.022190	0.021201	0.024211	0.025367	0.449296	0.016410	0.024041	0.022979	0.024314	0.024169	0.035200	0.015096
0.016159	0.015442	0.017630	0.018443	0.326976	0.011964	0.017445	0.016740	0.017699	0.017604	0.025722	0.010991
0.024156	0.019518	0.028212	0.034404	0.029989	0.861845	0.039477	0.034919	0.040842	0.044229	0.041105	0.050607

Figura 6.77: Perfis médios em bases com outliers
- Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de
incertezas de 10% do valor da medição

Figura 6.78: Desvios padrões em bases com
outliers - Dist. Exponencial com média 9 -
Proposta de incertezas de 10% do valor da medição

0.192654	0.009106	0.010389	0.011562	0.011318	0.006738	0.014342	0.007900	0.008599	0.008960	0.008964	0.005917
0.190859	0.009024	0.010283	0.011473	0.011218	0.006661	0.014244	0.007820	0.008539	0.008895	0.008869	0.005862
0.190071	0.008976	0.010255	0.011405	0.011174	0.006637	0.014234	0.007799	0.008477	0.008840	0.008822	0.005839
0.131883	0.006167	0.007066	0.007903	0.007693	0.004604	0.009833	0.005436	0.005887	0.006132	0.006142	0.004058
0.117675	0.005510	0.006281	0.007010	0.006873	0.004098	0.008788	0.004833	0.005253	0.005476	0.005470	0.003626
0.009805	0.206634	0.011020	0.012612	0.012292	0.007220	0.008524	0.014934	0.009045	0.009723	0.009408	0.006099
0.009134	0.193592	0.010320	0.011825	0.011529	0.006749	0.007979	0.014011	0.008473	0.009134	0.008813	0.005686
0.008705	0.183694	0.009802	0.011201	0.010921	0.006409	0.007577	0.013284	0.008019	0.008646	0.008332	0.005415
0.005949	0.126067	0.006673	0.007667	0.007460	0.004382	0.005198	0.009112	0.005490	0.005927	0.005738	0.003709
0.005260	0.112417	0.005928	0.006804	0.006628	0.003894	0.004637	0.008145	0.004918	0.005288	0.005116	0.003312
0.014447	0.014743	0.307377	0.017534	0.018206	0.010722	0.014375	0.014975	0.023973	0.015633	0.015256	0.009697
0.012846	0.013115	0.273298	0.015598	0.016156	0.009535	0.012769	0.013292	0.021365	0.013911	0.013554	0.008650
0.010329	0.010588	0.220626	0.012585	0.013051	0.007677	0.010304	0.010742	0.017266	0.011218	0.010952	0.006949
0.021223	0.021403	0.024237	0.439524	0.026402	0.015860	0.022467	0.022960	0.023309	0.034671	0.023603	0.014543
0.016424	0.016503	0.018713	0.339375	0.020404	0.012284	0.017397	0.017728	0.018009	0.026810	0.018218	0.011237
0.023205	0.022445	0.023342	0.026760	0.448682	0.014984	0.023639	0.023227	0.023939	0.024658	0.035747	0.014487
0.016895	0.016361	0.016987	0.019450	0.326414	0.010932	0.017199	0.016928	0.017421	0.017958	0.025959	0.010549
0.022636	0.023655	0.027403	0.029712	0.033579	0.860614	0.037994	0.038753	0.041901	0.040894	0.043573	0.050678

Figura 6.79: Perfis médios em bases com outliers
- Dist. Exponencial com média 9 - Proposta de
incertezas de 20% do valor da medição

Figura 6.80: Desvios padrões em bases com
outliers - Dist. Exponencial com média 9 -
Proposta de incertezas de 20% do valor da medição

0.112934	-0.049973	-0.049889	-0.042433	-0.047904	-0.027941
0.115415	-0.038865	-0.048012	-0.040901	-0.037231	-0.029963
0.091888	-0.048725	-0.044945	-0.052181	-0.050981	-0.030312
0.055273	-0.030231	-0.027679	-0.03892	-0.031295	-0.029736
0.042353	-0.03612	-0.032586	-0.043559	-0.043612	-0.023216
-0.045324	0.119914	-0.044636	-0.035486	-0.040481	-0.016856
-0.047778	0.118341	-0.039768	-0.045195	-0.044919	-0.028487
-0.039369	0.099938	-0.041287	-0.047114	-0.043269	-0.024093
-0.028779	0.052561	-0.035025	-0.04595	-0.035181	-0.035795
0.004325	0.046095	-0.034633	-0.041029	-0.042348	-0.011966
-0.027793	-0.02044	0.228944	-0.016793	-0.014817	-0.015898
-0.024836	-0.023742	0.211873	-0.029871	-0.020026	-0.008102
-0.033236	-0.030184	0.181617	-0.026657	-0.025003	-0.016397
-0.010216	-0.016492	-0.001411	0.410071	-0.001153	0.019329
-0.014921	-0.014321	-0.01195	0.391052	-0.009204	0.01573
-0.008049	0.003711	-0.019024	-0.007492	0.378415	0.028458
-0.008817	-0.001293	-0.014441	-0.006157	0.354469	0.021298
0.028782	0.015546	0.019312	0.029513	0.027712	0.405321

0.330727	0.222104	0.201357	0.181321	0.186171	0.211255
0.336386	0.22267	0.188982	0.187503	0.192184	0.2189
0.323418	0.219117	0.201694	0.189456	0.185766	0.226483
0.273589	0.264833	0.231947	0.195191	0.202985	0.218582
0.267253	0.272367	0.237046	0.201827	0.19505	0.222177
0.20531	0.34048	0.201872	0.180343	0.183751	0.232073
0.216559	0.327537	0.204521	0.190571	0.194999	0.21701
0.213297	0.317445	0.2044	0.188597	0.197442	0.216961
0.26237	0.268199	0.214894	0.186509	0.208955	0.214648
0.293153	0.255374	0.234583	0.197472	0.203623	0.231291
0.189938	0.193366	0.365657	0.1801	0.18956	0.194612
0.202114	0.20483	0.346252	0.172357	0.182501	0.199566
0.201581	0.209029	0.330666	0.183494	0.186192	0.203315
0.162572	0.160863	0.167021	0.356619	0.168554	0.198255
0.165809	0.167416	0.160982	0.337237	0.170147	0.193612
0.175321	0.180242	0.159085	0.170034	0.376661	0.211475
0.169196	0.180775	0.167776	0.166955	0.347927	0.199509
0.233667	0.212146	0.206448	0.212896	0.205263	0.40787

Figura 6.81: Perfis médios em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Análise Fatorial Ortogonal - CP - Rotação Varimax

Figura 6.82: Desvios padrões em bases com outliers - Dist. Exponencial com média 9 - Análise Fatorial Ortogonal - CP - Rotação Varimax

Figura 6.83: Gráfico comparativo para o Perfil 1

Figura 6.84: Gráfico comparativo para o Perfil 2

Figura 6.85: Gráfico comparativo para o Perfil 3 **Figura 6.86:** Gráfico comparativo para o Perfil 4

Figura 6.87: Gráfico comparativo para o Perfil 5 **Figura 6.88:** Gráfico comparativo para o Perfil 6

Sumarização dos resultados

Para cada cenário de simulação, e para cada proposta de definição de incerteza, também foram sumarizados os valores médios de Q Robusto e os desvios padrões que podem ser verificados nas tabelas a seguir.

Tabela 6.2: Valores médios de Q Robusto e desvios padrões para propostas de incertezas aplicadas em bases simuladas sem outliers

Referência	Média(Q Robusto)	Desvio padrão
Norris <i>et al.</i> (2014)	957,40	71,98
Polissar <i>et al.</i> (1998)	2.548,14	155,73
Ito <i>et al.</i> (2004)	723,14	48,81
Chueinta <i>et al.</i> (2000)	47,07	3,88
5% do valor da medição	983,80	75,79
10% do valor da medição	247,46	20,41
20% do valor da medição	61,87	5,11

Tabela 6.3: Valores médios de Q Robusto e desvios padrões para propostas de incertezas aplicadas em bases simuladas com outliers - Dist. Exponencial média 1,5

Referência	Média(Q Robusto)	Desvio padrão
Norris <i>et al.</i> (2014)	8.466,29	524,74
Polissar <i>et al.</i> (1998)	16.366,83	1.013,55
Ito <i>et al.</i> (2004)	7.980,65	513,34
Chueinta <i>et al.</i> (2000)	1.390,02	105,30
5% do valor da medição	8.506,44	525,70
10% do valor da medição	3.939,75	262,48
20% do valor da medição	1.714,25	126,75

Tabela 6.4: Valores médios de Q Robusto e desvios padrões para propostas de incertezas aplicadas em bases simuladas com outliers - Dist. Exponencial média 3

Referência	Média(Q Robusto)	Desvio padrão
Norris <i>et al.</i> (2014)	9.610,89	587,19
Polissar <i>et al.</i> (1998)	18.545,14	1.161,08
Ito <i>et al.</i> (2004)	9.169,88	574,52
Chueinta <i>et al.</i> (2000)	1.725,74	122,50
5% do valor da medição	9.645,40	587,89
10% do valor da medição	4.543,85	292,83
20% do valor da medição	2.081,00	144,24

Tabela 6.5: Valores médios de Q Robusto e desvios padrões para propostas de incertezas aplicadas em bases simuladas com outliers - Dist. Exponencial média 9

Referência	Média(Q Robusto)	Desvio padrão
Norris <i>et al.</i> (2014)	10.913,73	632,56
Polissar <i>et al.</i> (1998)	21.008,92	1.239,25
Ito <i>et al.</i> (2004)	10.554,44	625,02
Chueinta <i>et al.</i> (2000)	2.126,42	135,84
5% do valor da medição	10.943,21	633,23
10% do valor da medição	5.219,93	316,41
20% do valor da medição	2.495,62	157,53

Para auxiliar a interpretação dos valores médios de Q Robusto também foram calculados os coeficientes de variação de cada cenário simulado, Tabela 6.6.

Tabela 6.6: Coeficiente de variação para Q Robusto nos cenários de simulação

Referência	Sem outliers	Exp média 1,5	Exp média 3	Exp média 9
Norris <i>et al.</i> (2014)	0,0752	0,0620	0,0611	0,0580
Polissar <i>et al.</i> (1998)	0,0611	0,0619	0,0626	0,0590
Ito <i>et al.</i> (2004)	0,0675	0,0643	0,0627	0,0592
Chueinta <i>et al.</i> (2000)	0,0824	0,0758	0,0710	0,0639
5% do valor da medição	0,0770	0,0618	0,0610	0,0579
10% do valor da medição	0,0825	0,0666	0,0644	0,0606
20% do valor da medição	0,0826	0,0739	0,0693	0,0631

Na Tabela 6.7 podemos avaliar a relação de grandeza dos valores médios de *Q-Robusto* com base na referência Chueinta *et al.* (2000) em relação às quatro situações de simulação realizadas, e identificar as tendências de uniformização das relações conforme aumenta o tamanho dos *outliers*.

Tabela 6.7: *Relação de grandeza entre os valores médios de Q-Robusto com base na referência Chueinta et al. (2000) para quatro situações de simulação*

	Tabela 6.2	Tabela 6.3	Tabela 6.4	Tabela 6.5
Referência	Sem <i>outliers</i>	Exp média 1, 5	Exp média 3	Exp média 9
20 % do valor da medição	1,3	1,2	1,2	1,2
10 % do valor da medição	5,3	2,8	2,6	2,5
Ito <i>et al.</i> (2004)	15,4	5,7	5,3	5,0
Norris <i>et al.</i> (2014)	20,3	6,1	5,6	5,1
5% do valor da medição	20,9	6,1	5,6	5,1
Polissar <i>et al.</i> (1998)	54,1	11,8	10,7	9,9

Nota-se que essas relações são muito parecidas nos casos em que os bancos de dados possuem *outliers*, apresentando pequenas variações mesmo tendo *outliers* com tamanhos diferentes gerados pelas distribuições exponenciais de média 1, 5; 3 e 9. Essas relações são maiores se não há *outliers*, mas notemos que os *Q-Robustos* médios são bem menores.

Capítulo 7

Conclusões e trabalhos futuros

Ao comparar a matriz com os perfis originais da Tabela 4.2, usada na simulação das bases de dados, com as matrizes contendo os perfis médios da Seção 6.2 – resultantes das aplicações da fatoração PMF nas bases simuladas com as diversas propostas de incertezas –, podemos notar que as porcentagens de massa de cada espécie química dentro de cada perfil tendem a ser distribuídas de maneira mais homogênea entre as espécies químicas, mas não apresentando grandes alterações entre as proporções internas, e como consequência estas porcentagens resultantes são todas menores do que as dos perfis utilizados para gerar as bases de dados. Embora as porcentagens dentro de cada perfil tenham se reduzido devido à tendência que constatamos de homogeneização dos valores, ainda assim as espécies com elementos traçadores possuem valores que os destacam dentro de cada coluna, não impossibilitando a identificação dos perfis resultantes frente aos originais, pois como constatado, as proporções internas não se alteraram de maneira significativa. Ainda ao analisar as matrizes da Seção 6.2, que estão com as células com cores variando de tons de verde a tons de vermelho, de acordo com variação interna das entradas – verde para maiores valores e vermelho para os menores valores – podemos notar a tendência de surgimento de gradientes – nas posições que correspondem aos valores zero da Tabela 4.2 – entre as linhas correspondentes aos blocos com valores diferentes de zero, relativos aos elementos traçadores. Tais variações seguem o decréscimo dos valores das porcentagens dentro dos blocos.

Analisando as matrizes de desvios padrões é possível notar que as linhas correspondentes a blocos menores de elementos traçadores, tenderam a apresentar maiores variações entre as simulações. Embora haja este aumento, os desvios padrões em relação aos valores que representam os elementos traçadores são pequenos.

Apesar do método ter sido aplicado em bases de dados com e sem *outliers*, os resultados permaneceram sem grandes variações nas porcentagens relativas aos perfis, e sem grandes variações também nos desvios padrões, o que verifica a robustez do método, conforme proposto em Paatero e Tapper (1994). Tal robustez não se verifica nos resultados da aplicação da Análise Fatorial. Podemos notar nas matrizes das Figuras 6.15, 6.37, 6.59 e 6.81, que são cargas fatoriais resultantes da aplicação da Análise Fatorial, que há redução da correlação dos fatores com as variáveis que são os elementos químicos, com aumento da variabilidade dos resultados conforme podemos verificar nas matrizes dos correspondentes desvios padrões nas Figuras 6.16, 6.38, 6.60 e 6.82.

Analisando as matrizes da Seção 6.2, e os gráficos das Figuras 6.17 a 6.22 sob o ponto de vista da aplicação de diferentes propostas de definição de incertezas, notamos que a adoção de diferentes abordagens não levou a resultados discrepantes nas aplicações das bases de dados que foram obtidas conforme simulação descrita no Capítulo 4.

Ao analisar as Tabelas 6.2, 6.3, 6.4 e 6.5, é possível notar uma grande variação do valor médio de *Q-Robusto* entre as abordagens de definição de incerteza aplicada em bases de dados com e sem *outliers*. Estes valores são aparentemente estáveis dentro de cada cenário de simulação, pois apresentam coeficiente de variação pequeno como é possível verificar na Tabela 6.6.

Uma estratégia que pode ser encontrada na literatura sobre como definir o número de fatores, baseia-se em analisar o valor de *Q-Robusto*, conforme pode ser verificado em Reff *et al.* (2007),

seção *PMF Analysis*, item 2. Esta grande variação nos valores de *Q-Robusto* conforme a proposta de incerteza adotada revela que tal estratégia pode não ser eficaz.

Nota-se que o valor médio do *Q-Robusto* decresce quando a incerteza aumenta em termos percentuais do valor da medição.

Tanto os valores de *Q-Robusto* médio quanto os desvios padrões correspondentes nos métodos propostos por Ito *et al.* (2004) e Norris *et al.* (2014) são próximos dos valores *Q-Robusto* médio de quando se considera a incerteza como sendo 5% do valor da medição.

Se ordenarmos os valores dos *Q-Robustos*, a ordem é a mesma nas quatro situações consideradas – do menor para o maior valor, os métodos de Chueinta *et al.* (2000), 20% do valor da medição, 10% do valor da medição, Ito *et al.* (2004), Norris *et al.* (2014), 5% do valor da medição, e Polissar *et al.* (1998).

Os valores médios de *Q-Robusto* são menores quando não há *outliers*, para todos os métodos, e crescem à medida em que aumenta a média da distribuição exponencial que os gerou.

A Tabela 6.7 mostra a relação entre os valores médios de *Q-Robusto* dos métodos considerados tomando como base o *Q-Robusto* médio do método de Chueinta *et al.* (2000), que é o menor.

Nota-se que essas relações são muito parecidas nos casos em que os bancos de dados possuem *outliers*, apresentando pequenas variações mesmo tendo *outliers* com tamanhos diferentes gerados pelas distribuições exponenciais de média 1, 5; 3 e 9. Essas relações são maiores se não há *outliers*, mas notemos que os *Q-Robustos* médios são bem menores.

Em trabalhos futuros de análise do método PMF, há possibilidade de simular bases de dados em que a distribuição utilizada na geração seja gama ou weibull, e também inserir *outliers* mais concentrados em determinadas variáveis, ao contrário da abordagem uniforme aplicada neste trabalho, conforme descrito na Seção 4.5. A simulação de bases de dados com existência de sequências de dados obtidos de distribuições diferentes, representando efeitos de sazonalidade, também seria de grande interesse para estudo de comportamento do método PMF, e do uso de recursos como *bootstrap*, descrito na Seção 3.1.5. Conforme discutimos na Seção 2.2.1, existem diversos algoritmos para se obter a fatoração *GF* da matriz de dados. No trabalho de Ramadan *et al.* (2003), é feita uma comparação de resultados entre a versão do *software* ME-2, que o é utilizado no EPA PMF 5.0 e o *software* PMF2 que era utilizado em versões anteriores do EPA PMF. Em trabalhos futuros, há a possibilidade de realizar uma comparação como esta, mas utilizando outros algoritmos, como por exemplo, o apresentado em Wang *et al.* (2006), que é uma adaptação do algoritmo apresentado em Lee e Seung (1999), mas com a possibilidade de inserir as incertezas de medição.

Apêndice A

Códigos

A.1 Implementação Computacional - SAS

```
1
2
3 libname simRecCo      "F:/MAE_Dissertacao/Multivar/SimPMF/Bases_SAS/SimArtRecife/
  ComOutliers";
4
5 %MACRO simRecifeCMB(n);
6
7 %do i = 1 %to &n;
8
9     data simRecCo.simRecife6FatoresComOutCMB&i;
10
11     do i = 1 to 300;
12         /* todos fatores (g) dist lognormal com media 1.5 e variancia 1 */
13
14         mean = 1.5; variance = 1;                                /* mean and variance of g */
15         phi = sqrt(variance + mean**2);
16         mu = log(mean**2/phi);                                     /* mean of log(g) */
17         sigma = sqrt(log(phi**2/mean**2)); /* std dev of log(g) */
18
19         x1 = rand('Normal', mu, sigma);
20         g1 = exp(x1);
21         x2 = rand('Normal', mu, sigma);
22         g2 = exp(x2);
23         x3 = rand('Normal', mu, sigma);
24         g3 = exp(x3);
25         x4 = rand('Normal', mu, sigma);
26         g4 = exp(x4);
27         x5 = rand('Normal', mu, sigma);
28         g5 = exp(x5);
29         x6 = rand('Normal', mu, sigma);
30         g6 = exp(x6);
31
32         eps1 = rand('Normal', 0, 0.005);
33         eps2 = rand('Normal', 0, 0.005);
34         eps3 = rand('Normal', 0, 0.005);
35         eps4 = rand('Normal', 0, 0.005);
36         eps5 = rand('Normal', 0, 0.005);
37         eps6 = rand('Normal', 0, 0.005);
38         eps7 = rand('Normal', 0, 0.005);
39         eps8 = rand('Normal', 0, 0.005);
40         eps9 = rand('Normal', 0, 0.005);
41         eps10 = rand('Normal', 0, 0.005);
42         eps11 = rand('Normal', 0, 0.005);
43         eps12 = rand('Normal', 0, 0.005);
44         eps13 = rand('Normal', 0, 0.005);
45         eps14 = rand('Normal', 0, 0.005);
```

```

46     eps15 = rand( 'Normal' , 0 , 0.005);
47     eps16 = rand( 'Normal' , 0 , 0.005);
48     eps17 = rand( 'Normal' , 0 , 0.005);
49     eps18 = rand( 'Normal' , 0 , 0.005);
50
51
52     aux1 = RAND( 'UNIFORM' );
53
54
55     if aux1 < 0.5 then
56         do;
57             aux2 = RAND( 'UNIFORM' );
58             aux3 = 18*aux2;
59             aux4 = floor( aux3 );
60             aux5 = aux4 + 1;
61
62             nn= 9*rand( 'exponential' );
63
64             if aux5=1 then eps1=nn;
65             if aux5=2 then eps2=nn;
66             if aux5=3 then eps3=nn;
67             if aux5=4 then eps4=nn;
68             if aux5=5 then eps5=nn;
69             if aux5=6 then eps6=nn;
70             if aux5=7 then eps7=nn;
71             if aux5=8 then eps8=nn;
72             if aux5=9 then eps9=nn;
73             if aux5=10 then eps10=nn;
74             if aux5=11 then eps11=nn;
75             if aux5=12 then eps12=nn;
76             if aux5=13 then eps13=nn;
77             if aux5=14 then eps14=nn;
78             if aux5=15 then eps15=nn;
79             if aux5=16 then eps16=nn;
80             if aux5=17 then eps17=nn;
81             if aux5=18 then eps18=nn;
82         end;
83
84
85
86     Si = 0.2341*g1 + 0*g2 + 0*g3 + 0*g4 + 0*g5 + 0*g6+ eps1 ;
87     Ti = 0.2319*g1 + 0*g2 + 0*g3 + 0*g4 + 0*g5 + 0*g6+ eps2 ;
88     Al = 0.2309*g1 + 0*g2 + 0*g3 + 0*g4 + 0*g5 + 0*g6+ eps3 ;
89     Fe = 0.1602*g1 + 0*g2 + 0*g3 + 0*g4 + 0*g5 + 0*g6+ eps4 ;
90     Ca = 0.1429*g1 + 0*g2 + 0*g3 + 0*g4 + 0*g5 + 0*g6+ eps5 ;
91     Zn = 0*g1 + 0.2513*g2 + 0*g3 + 0*g4 + 0*g5 + 0*g6+ eps6 ;
92     Mn = 0*g1 + 0.2354*g2 + 0*g3 + 0*g4 + 0*g5 + 0*g6+ eps7 ;
93     Pb = 0*g1 + 0.2234*g2 + 0*g3 + 0*g4 + 0*g5 + 0*g6+ eps8 ;
94     Cr = 0*g1 + 0.1533*g2 + 0*g3 + 0*g4 + 0*g5 + 0*g6+ eps9 ;
95     BC = 0*g1 + 0.1366*g2 + 0*g3 + 0*g4 + 0*g5 + 0*g6+ eps10 ;
96     Br = 0*g1 + 0*g2 + 0.3835*g3 + 0*g4 + 0*g5 + 0*g6+ eps11 ;
97     S = 0*g1 + 0*g2 + 0.3411*g3 + 0*g4 + 0*g5 + 0*g6+ eps12 ;
98     K = 0*g1 + 0*g2 + 0.2754*g3 + 0*g4 + 0*g5 + 0*g6+ eps13 ;
99     Cl = 0*g1 + 0*g2 + 0*g3 + 0.564*g4 + 0*g5 + 0*g6+ eps14 ;
100    Cu = 0*g1 + 0*g2 + 0*g3 + 0.436*g4 + 0*g5 + 0*g6+ eps15 ;
101    Mg = 0*g1 + 0*g2 + 0*g3 + 0*g4 + 0.5786*g5 + 0*g6+ eps16 ;
102    Na = 0*g1 + 0*g2 + 0*g3 + 0*g4 + 0.4214*g5 + 0*g6+ eps17 ;
103    Ni = 0*g1 + 0*g2 + 0*g3 + 0*g4 + 0*g5 + 1*g6+ eps18 ;
104
105
106
107    output;
108
109 end;
110 drop i mean variance phi mu sigma x1 g1 x2 g2 x3 g3 x4 g4 x5 g5 x6 g6 eps1

```

```

        eps2 eps3
111  eps4 eps5 eps6 eps7 eps8 eps9 eps10 eps11 eps12 eps13 eps14 eps15 eps16
        eps17 eps18
112  aux1 aux2 aux3 aux4 aux5 nn;
113
114
115
116  run;
117
118 %end;
119
120 %mend simRecifeCMB;
121
122 %simRecifeCMB(1000);
123
124 data simRecCo._simRecife6FatoresComOutCMBneg;
125     format
126         tabnum BEST12.0
127         Si BEST12.0
128         Ti BEST12.0
129         Al BEST12.0
130         Fe BEST12.0
131         Ca BEST12.0
132         Zn BEST12.0
133         Mn BEST12.0
134         Pb BEST12.0
135         Cr BEST12.0
136         BC BEST12.0
137         Br BEST12.0
138         S BEST12.0
139         K BEST12.0
140         Cl BEST12.0
141         Cu BEST12.0
142         Mg BEST12.0
143         Na BEST12.0
144         Ni BEST12.0
145
146
147         default=10.3 $char8.;
148 run;
149
150 proc sql;
151 delete from simRecCo._simRecife6FatoresComOutCMBneg;
152 quit;
153
154 %MACRO verificaNegativos(n);
155
156 %do i = 1 %to &n;
157
158
159     proc sql;
160     insert into simRecCo._simRecife6FatoresComOutCMBneg (tabnum, Si, Ti, Al, Fe,
        Ca, Zn, Mn, Pb, Cr, BC, Br, S, K, Cl, Cu, Mg, Na, Ni)
161     select &i, Si, Ti, Al, Fe, Ca, Zn, Mn, Pb, Cr, BC, Br, S, K, Cl, Cu, Mg, Na
        , Ni
162     from simRecCo.simRecife6FatoresComOutCMB&i
163     where Si < 0 OR Ti < 0 OR Al < 0 OR Fe < 0 OR Ca < 0 OR Zn < 0 OR Mn < 0 OR
        Pb < 0 OR Cr < 0 OR BC < 0 OR Br < 0 OR S < 0 OR K < 0 OR Cl < 0 OR
        Cu < 0 OR Mg < 0 OR Na < 0 OR Ni < 0;
164     quit;
165
166 %end;
167
168 %mend verificaNegativos;
169

```

```

170 %verificaNegativos(1000);
171
172
173
174 %MACRO exportsimRecifeCMB(n);
175 %do i = 1 %to &n;
176     proc export data=simRecCo.simRecife6FatoresComOutCMB&i
177         outfile= "F:\MAE_Dissertacao\Multivar\SimPMF\Bases_SAS\SimArtRecife\
            ComOutliers\simRecife6FatoresComOutCMB_&i ..txt "
178         dbms=dlm;
179         delimiter=",";
180         putnames=no;
181     run;
182 %end;
183 %mend exportsimRecifeCMB;
184
185 %exportsimRecifeCMB(1000);
186
187 %MACRO afsimRecifeCMB(n);
188
189 %do i = 1 %to &n;
190     PROC FACTOR DATA=simRecCo.simRecife6FatoresComOutCMB&i norm=raw METHOD=PRIN
        NFACTORS=6 NOPRINT
191     ROTATE=varimax OUTSTAT=simRecCo.AFsimRecife6FatoresComOutCMB&i;
192     VAR Si Ti Al Fe Ca Zn Mn Pb Cr BC Br S K Cl Cu Mg Na Ni
193
194 ;
195     run;
196
197 %end;
198
199
200 %mend afsimRecifeCMB;
201 %afsimRecifeCMB(1000);
202
203
204 data simRecCo._AF_todas;
205     format
206     Si BEST12.0
207     Ti BEST12.0
208     Al BEST12.0
209     Fe BEST12.0
210     Ca BEST12.0
211     Zn BEST12.0
212     Mn BEST12.0
213     Pb BEST12.0
214     Cr BEST12.0
215     BC BEST12.0
216     Br BEST12.0
217     S BEST12.0
218     K BEST12.0
219     Cl BEST12.0
220     Cu BEST12.0
221     Mg BEST12.0
222     Na BEST12.0
223     Ni BEST12.0
224
225
226     default=10.3 $char8.;
227 run;
228
229 proc sql;
230 delete from simRecCo._AF_todas;
231 quit;
232

```

```

233 %MACRO empilhaAF(n);
234
235
236 %do i = 1 %to &n;
237   proc sql;
238
239     insert into simRecCo._AF_todas (Si, Ti, Al, Fe, Ca, Zn, Mn, Pb, Cr, BC, Br, S,
      K, Cl, Cu, Mg, Na, Ni)
240     select Si, Ti, Al, Fe, Ca, Zn, Mn, Pb, Cr, BC, Br, S, K, Cl, Cu, Mg, Na, Ni
241     from simRecCo.AFsimRecife6FatoresComOutCMB&i
242     where _TYPE_ = "PATTERN" AND (_NAME_ = "Factor1" OR "Factor2" OR "Factor3" OR
      "Factor4" OR "Factor5" OR "Factor6");
243   quit;
244
245
246 %end;
247
248 %mend empilhaAF;
249
250 %empilhaAF(1000);
251
252 proc export data=simRecCo._AF_TODAS
253   outfile= "F:\MAE_Dissertacao\Multivar\SimPMF\Bases_SAS\SimArtRecife\
      ComOutliers\0.5_media_1.5\_AF_TODAS.txt"
254   dbms=dlm;
255   delimiter=" ";
256   putnames=no;
257 run;
258
259 libname simRecCo "F:/MAE_Dissertacao/Multivar/SimPMF/Bases_SAS/SimArtRecife/
      ComOutliers/0.5_media_9";
260
261 data simRecCo._eig_todas;
262   format
263     Si BEST12.0
264     Ti BEST12.0
265     Al BEST12.0
266     Fe BEST12.0
267     Ca BEST12.0
268     Zn BEST12.0
269     Mn BEST12.0
270     Pb BEST12.0
271     Cr BEST12.0
272     BC BEST12.0
273     Br BEST12.0
274     S BEST12.0
275     K BEST12.0
276     Cl BEST12.0
277     Cu BEST12.0
278     Mg BEST12.0
279     Na BEST12.0
280     Ni BEST12.0
281
282
283     default=10.3 $char8.;
284 run;
285
286 proc sql;
287 delete from simRecCo._eig_todas;
288 quit;
289
290
291 %MACRO empilhaEig(n);
292
293

```

```

294 %do i = 1 %to &n;
295   proc sql;
296
297   insert into simRecCo._eig_todas (Si, Ti, Al, Fe, Ca, Zn, Mn, Pb, Cr, BC, Br,
      S, K, Cl, Cu, Mg, Na, Ni)
298   select Si, Ti, Al, Fe, Ca, Zn, Mn, Pb, Cr, BC, Br, S, K, Cl, Cu, Mg, Na, Ni
299   from simRecCo.AFsimRecife6FatoresComOutCMB&i
300   where _TYPE_ = "EIGENVAL";
301   quit;
302
303
304 %end;
305
306 %mend empilhaEig;
307
308 %empilhaEig(1000);
309
310
311 proc sql;
312 select
313 mean(Si) as Media_AV_1,
314 mean(Ti) as Media_AV_2,
315 mean(Al) as Media_AV_3,
316 mean(Fe) as Media_AV_4,
317 mean(Ca) as Media_AV_5,
318 mean(Zn) as Media_AV_6,
319 mean(Mn) as Media_AV_7,
320 mean(Pb) as Media_AV_8,
321 mean(Cr) as Media_AV_9,
322 mean(BC) as Media_AV_10,
323 mean(Br) as Media_AV_11,
324 mean(S) as Media_AV_12,
325 mean(K) as Media_AV_13,
326 mean(Cl) as Media_AV_14,
327 mean(Cu) as Media_AV_15,
328 mean(Mg) as Media_AV_16,
329 mean(Na) as Media_AV_17,
330 mean(Ni) as Media_AV_18
331
332 from simRecCo._eig_todas
333
334 quit;

```

A.2 Implementação Computacional - C

```

1 #include <stdio.h>
2 #include <stdlib.h>
3 #include <string.h>
4 #include <math.h>
5 #include <stdbool.h>
6 #include <time.h>
7 #include <sys/types.h>
8 #include <unistd.h>
9
10 // A função Randomize inicializa o gerador de números
11 // aleatórios de modo que os resultados das
12 // invocações de RandomInteger seja imprevisível.
13
14 void Randomize (void)
15 {
16     srand (time (NULL));
17 }
18
19 bool isFactorIn(int val, double *arr, int size){

```



```

20     int i;
21     for (i=0; i < size; i++) {
22         if ((int) arr[i] == val)
23             return true;
24     }
25     return false;
26 }
27 void selection_sort(double *Maux0, double *Maux1, int tam)
28 {
29     int i, j, min;
30     double aux0, aux1;
31     for (i = 0; i < (tam-1); i++)
32     {
33         min = i;
34         for (j = (i+1); j < tam; j++) {
35             if(Maux0[j] < Maux0[min]) {
36                 min = j;
37             }
38         }
39         if (i != min) {
40             aux0 = Maux0[i];
41             Maux0[i] = Maux0[min];
42             Maux0[min] = aux0;
43
44             aux1 = Maux1[i];
45             Maux1[i] = Maux1[min];
46             Maux1[min] = aux1;
47         }
48     }
49 }
50
51 void sortFactor(int nrFat, int nrVar, double **M, double **MSS, double **
    MFatCorrep, double **MFatOrig, FILE *filePtr) {
52
53     double aux1, aux2, **MFatOrigPerc, **MPerc;
54     int i, j, k, c;
55
56     MFatOrigPerc = (double **) malloc (nrVar* sizeof (double*));
57     for (i = 0; i < nrVar; i++){
58         MFatOrigPerc[i] = (double*) malloc(nrFat*sizeof (double));
59     }
60
61     MPerc = (double **) malloc (nrVar* sizeof (double*));
62     for (i = 0; i < nrVar; i++){
63         MPerc[i] = (double*) malloc(nrFat*sizeof (double));
64     }
65     for(i = 0; i < nrFat; i++){
66         aux1 = 0;
67         aux2 = 0;
68         for(k = 0; k < nrVar; k++){
69             aux1 = aux1 + M[k][i];
70             aux2 = aux2 + MFatOrig[k][i];
71         }
72         for(k = 0; k < nrVar; k++){
73             MPerc[k][i] = M[k][i]/aux1;
74             MFatOrigPerc[k][i] = MFatOrig[k][i]/aux2;
75         }
76     }
77 }
78
79 for( i= 0 ; i < 2; i++){
80     for(j = 0; j < nrFat; j++){
81         fprintf(filePtr, "%f ", MFatCorrep[i][j]);
82     }
83     fprintf(filePtr, "\n");

```

```

84     }
85     fprintf(filePtr, "\n");
86     // matriz de distancias fator pmf->linha original->coluna
87     for (i = 0; i < nrFat; i++){
88         for (j = 0; j < nrFat; j++){
89             fprintf(filePtr, "%f ",MSS[i][j]) ;
90         }
91         fprintf(filePtr, "\n");
92     }
93     fprintf(filePtr, "\n");
94
95     selection_sort(MFatCorrep[1], MFatCorrep[0], nrFat);
96
97     for (i = 0; i < nrVar; i++){
98         //matriz de fatores pmf ordenadas
99         for (j = 0; j < nrFat; j++){
100             c = (int) MFatCorrep[0][j];
101             fprintf(filePtr, "%f ",M[i][c]) ;
102         }
103         //matriz de fatores pmf sem ordenar
104         for (j = 0; j < nrFat; j++){
105             fprintf(filePtr, "%f ",M[i][j]) ;
106         }
107         //matriz de fatores originais percentual
108         for (j = 0; j < nrFat; j++){
109             fprintf(filePtr, "%f ",MOrigPerc[i][j]) ;
110         }
111         //matriz de fatores pmf ordenadas percentual
112         for (j = 0; j < nrFat; j++){
113             c = (int) MFatCorrep[0][j];
114             fprintf(filePtr, "%f ",MPerc[i][c]) ;
115             //retorna M com os percentuais para função main escrever no arquivo
116             //sumario
117             M[i][j] = MPerc[i][c];
118         }
119         fprintf(filePtr, "\n");
120     }
121     fprintf(filePtr, "\n\n");
122 }
123 int RandomInteger (int low, int high)
124 {
125     int k;
126     double d;
127     d = (double) rand () / ((double) RAND_MAX + 1);
128     k = d * (high - low + 1);
129     return low + k;
130 }
131
132 void configNrObsNrVarNrFat(int nrObs, int nrVar, int nrFat, FILE *inputSearch,
133 FILE *output){
134     char buffer[5000], *updline, n1[10], n2[10], np[10];
135
136     updline = malloc(5000);
137
138     sprintf(n1, "%d", nrObs);
139     sprintf(n2, "%d", nrVar);
140     sprintf(np, "%d", nrFat);
141
142     while (fgets(buffer, sizeof(buffer), inputSearch) != NULL)
143     {
144         char *pos0 = strstr(buffer, "/" n1, n2, np, c1, c3, em,");
145
146         if (pos0 != NULL)

```

```

147     {
148         fputs( buffer , output );
149         // printf("%s ", buffer);
150         fgets( buffer , sizeof( buffer ) , inputSearch );
151
152         strcpy( updline , "   " );
153         strcat( updline , n1 );
154         strcat( updline , " ,   " );
155         strcat( updline , n2 );
156         strcat( updline , " ,   " );
157         strcat( updline , np );
158         strcat( updline , " ,   0 ,   0 ,   -14\n" );
159
160         // printf("%s |n" , updline );
161
162         fputs( updline , output );
163
164         free( updline );
165
166     }
167     else {
168         fputs( buffer , output );
169     }
170 }
171 }
172
173 void changeSeed( FILE *inputSearch , FILE *output , FILE *fpSeedLog ) {
174
175     char buffer[5000] , *updline , stringToReplace[10];
176
177     updline = malloc(5000);
178
179     int i , seed_new;
180
181     seed_new = RandomInteger(1,99);
182
183     sprintf( stringToReplace , "%d" , seed_new );
184
185     while ( fgets( buffer , sizeof( buffer ) , inputSearch ) != NULL )
186     {
187         char *pos0 = strstr( buffer , "/ seed1 , seed2 , seed3 , seed4 , seed5 = init -
188             f X-noise true-f BSpull BSsample" );
189
190         if ( pos0 != NULL )
191         {
192             fputs( buffer , output );
193             // printf("%s ", buffer );
194             fgets( buffer , sizeof( buffer ) , inputSearch );
195             char *record;
196
197             strcpy( updline , "   " );
198             record = strtok( buffer , "   " );
199             strcat( updline , stringToReplace );
200             // printf("%s ", record );
201             for( i = 0 ; i < 5 ; i++ )
202             {
203                 record = strtok( NULL , "   " );
204                 strcat( updline , "   " );
205                 strcat( updline , record );
206             }
207             // printf("%s |n" , updline );
208
209             fputs( updline , output );
210

```

```

211
212         fprintf(fpSeedLog, "%d\n", seed_new);
213
214         free(updline);
215
216     }
217     else{
218         fputs(buffer, output);
219     }
220 }
221 }
222
223
224 void configIniParamFile1(FILE *inputSearch, FILE *output, char stringToFind[],
    char stringToReplace[])
225 {
226
227     char buffer[5000];
228
229     while (fgets(buffer, sizeof(buffer), inputSearch) != NULL)
230     {
231         char *pos = strstr(buffer, stringToFind);
232         if (pos != NULL)
233         {
234             char *temp = calloc(strlen(buffer) - strlen(stringToFind) + strlen(
                stringToReplace) + 1, 1);
235
236
237             memcpy(temp, buffer, pos - buffer);
238
239
240             memcpy(temp + (pos - buffer), stringToReplace, strlen(
                stringToReplace));
241
242
243             memcpy(temp + (pos - buffer) + strlen(stringToReplace),
                pos + strlen(stringToFind),
244                 1 + strlen(buffer) - ((pos - buffer) + strlen(stringToFind))
245             );
246
247             fputs(temp, output);
248
249             free(temp);
250         }
251         else
252             fputs(buffer, output);
253     }
254
255 }
256
257 double **identFactor(int nrFat, int nrVar, double **M, double **MSS, double **
    MFatOrig){
258     double **MFatCorrep, ***Maux, aux1, aux2, aux3;
259     int i, j, k, l, d, a, b, min;
260
261
262     MFatCorrep = (double **) malloc (3* sizeof (double*));
263     for (i = 0; i < 3; i++){
264         MFatCorrep[i] = (double*) malloc(nrFat*sizeof (double));
265     }
266
267     Maux = (double ***) malloc (2* sizeof (double**));
268     for(l=0; l < 2; l++){
269         Maux[l] = (double **) malloc (nrFat* sizeof (double*));
270         for (i = 0; i < nrFat; i++){

```

```

271         Maux[1][i] = (double*) malloc(nrFat*sizeof (double));
272     }
273 }
274
275
276 aux1 = 0;
277 aux2 = 0;
278 aux3 = 0;
279
280 for(a = 0; a < nrFat; a++){
281     for(b = 0; b < nrFat; b++) {
282         //calcula a soma dos valores das variaveis de cada fator para
                calcular os indices de importancia
283         for(k = 0; k < nrVar; k++){
284             aux1 = aux1 + M[k][a];
285             aux2 = aux2 + MFatOrig[k][b];
286         }
287         //calcula a soma do quadrado da diferenca dos indices de importancia
                do fator PMF "a" com o fator original "b"
288         for(k = 0; k < nrVar; k++){
289             aux3 = aux3 + pow((M[k][a]/aux1)-(MFatOrig[k][b]/aux2),2);
290         }
291         MSS[a][b] = aux3;
292         //dimensao 0 armazena as distancias e a dim 1 armazena o mapeamento
                fator pmf(a) -> fator original(b)
293         Maux[0][a][b] = aux3;
294         Maux[1][a][b] = b;
295         //printf("%f ",MSS[a][b]);
296         aux1 = 0;
297         aux2 = 0;
298         aux3 = 0;
299     }
300     //printf("\n");
301 }
302
303
304 for(a = 0; a < nrFat; a++){
305     selection_sort(Maux[0][a],Maux[1][a], nrFat);
306 }
307 /* for(a = 0; a < nrFat; a++){
308     for(b = 0; b < nrFat; b++) {
309         printf("%f ",Maux[0][a][b]);
310     }
311     printf("\n");
312 }
313 printf("\n");
314
315 for(a = 0; a < nrFat; a++){
316     for(b = 0; b < nrFat; b++) {
317         printf("%f ",Maux[1][a][b]);
318     }
319     printf("\n");
320 }
321 printf("\n");*/
322 //percorre o numero total de fatores, j é apenas um iterador, nao
    corresponde a
323 //nenhum fator
324 for(j = 0; j < nrFat; j++){
325
326     min = -1;
327     //percorre a primeira coluna da matriz Maux depois que cada linha foi
        ordenada pela distancia
328     //procura a linha da primeira coluna que tem a menor distancia
329     //busca o min como o selection sort
330     //i corresponde ao fator PMF

```

```

331     for(i = 0; i < nrFat - 1; i++){
332
333         while(min == -1){
334             //pega o primeiro fator disponivel para definir o primeiro min
335             //da busca
336             if(!isFactorIn(i, MFatCorrep[0], j)){
337                 min = i;
338             }
339             else{
340                 i++;
341             }
342         }
343         for(k = i+1; k < nrFat; k++){
344             if(Maux[0][k][0] < Maux[0][min][0] && !isFactorIn(k, MFatCorrep
345             [0], j)){
346                 min = k;
347             }
348         }
349         MFatCorrep[0][j] = min;
350         MFatCorrep[1][j] = Maux[1][min][0];
351         MFatCorrep[2][j] = Maux[0][min][0];
352
353         //Libera Maux, e realoca com uma coluna a menos para armazenar apenas os
354         //fatores originais disponiveis
355         free(Maux);
356         if(j+1 < nrFat){
357             Maux = (double ***) malloc (2* sizeof (double**));
358             for(l=0; l < 2; l++){
359                 Maux[l] = (double **) malloc (nrFat* sizeof (double*));
360                 for (i = 0; i < nrFat; i++){
361                     Maux[l][i] = (double*) malloc ((nrFat-(j+1))*sizeof (double));
362                 }
363             }
364             //Coloca em Maux apenas as colunas referenteas aos fatores originais
365             //nao utilizados
366             for(a = 0; a < nrFat; a++){
367                 d = 0;
368                 for(b = 0; b < nrFat; b++) {
369                     if(!isFactorIn(b, MFatCorrep[1], (j+1))){
370                         //se o fator b nao esta entre os originais usados, ele é
371                         //incluido na matriz
372                         //lembrando que o conteudo da matriz MSS[a][b],
373                         //corresponde a ordem a, b
374                         Maux[0][a][d] = MSS[a][b];
375                         Maux[1][a][d] = b;
376                         d++;
377                     }
378                 }
379             }
380             /*
381             printf("\n");
382             for(a = 0; a < nrFat; a++){
383                 for(b = 0; b < (nrFat-(j+1)); b++) {
384                     printf("%f ", Maux[0][a][b]);
385                 }
386                 printf("\n");
387             }
388             printf("\n");
389
390             for(a = 0; a < nrFat; a++){
391                 for(b = 0; b < (nrFat-(j+1)); b++) {
392                     printf("%f ", Maux[1][a][b]);
393                 }

```



```

391         printf("\n");
392     }*/
393
394     for(a = 0; a < nrFat; a++){
395         selection_sort(Maux[0][a], Maux[1][a], (nrFat - (j + 1)));
396     }
397
398     /*printf("\n depois do selection sort \n");
399
400     for(a = 0; a < nrFat; a++){
401         for(b = 0; b < (nrFat - (j + 1)); b++) {
402             printf("%f ", Maux[0][a][b]);
403         }
404         printf("\n");
405     }
406     printf("\n");
407
408     for(a = 0; a < nrFat; a++){
409         for(b = 0; b < (nrFat - (j + 1)); b++) {
410             printf("%f ", Maux[1][a][b]);
411         }
412         printf("\n");
413     }*/
414 }
415
416 }
417 /*
418 printf("\n");
419 for(a = 0; a < 3; a++){
420     for(b = 0; b < nrFat; b++) {
421         printf("%f ", MFatCorrep[a][b]);
422     }
423     printf("\n");
424 }
425 printf("\n");*/
426
427 return MFatCorrep;
428 }
429
430 int readPmfReport(FILE *fpMinTaskLog, char me2ExecPath[], int nrTask){
431
432     char *pmfReportFilePath = malloc(300);
433     strcpy(pmfReportFilePath, me2ExecPath);
434     strcat(pmfReportFilePath, "pmfreport.txt");
435
436     FILE *fpPmfReport = fopen(pmfReportFilePath, "r");
437
438     double **M;
439     int i, j;
440
441     char buffer[1000];
442     //aloca uma matriz de duas linhas e nrTask colunas
443     //para na primeira linha armazenar o numero das tarefas e na segunda
444     //o Q(robust) resultante que corresponde a esta
445     M = (double **) malloc (2* sizeof (double*));
446
447     for (i = 0; i < 2; i++){
448         M[i] = (double*) malloc(nrTask* sizeof (double));
449     }
450     i = 0;
451     j = 0;
452     while (fgets(buffer, sizeof(buffer), fpPmfReport) != NULL)
453     {
454
455         //puts(buffer);

```

```

456     char *record;
457     record = strtok(buffer, " ");
458     M[0][j] = (double) strtod(record, NULL);
459     //numero de colunas no arquivo pmfreport.txt, pega somente a terceira
460     for(i = 0; i < 10; i++)
461     {
462         if(i == 2){
463             M[1][j] = (double) strtod(record, NULL);
464         }
465         record = strtok(NULL, " ");
466     }
467     j++;
468 }
469 /*
470 for(i = 0; i < 2; i++){
471     for(j=0; j<nrTask; j++){
472         printf("%lf ", M[i][j]);
473     }
474     printf("\n");
475 }
476 puts("depois do selection sort");
477 */
478     selection_sort(M[1], M[0], nrTask);
479
480
481 /*
482 for(i = 0; i < 2; i++){
483     for(j=0; j<nrTask; j++){
484         printf("%lf ", M[i][j]);
485     }
486     printf("\n");
487 */
488     fclose(fpPmfReport);
489     free(pmfReportFilePath);
490     fprintf(fpMinTaskLog, "%d      %lf\n", (int)M[0][0], M[1][0]);
491
492     return (int)M[0][0];
493 }
494
495
496 double **readOutputFile(int nrFat, int nrVar, int nrObs, char filename[], int
    minTask ) {
497
498     FILE *file;
499     double **M;
500     double n1;
501     int i, k, l, ptrPos;
502     ptrPos = 0;
503
504     M = (double **) malloc (nrVar* sizeof (double*));
505
506     for (i = 0; i < nrVar; i++){
507         M[i] = (double*) malloc(nrFat*sizeof (double));
508     }
509     file = fopen(filename, "r");
510     int count = 0;
511     if ( file != NULL )
512     {
513         k = 0;
514         l = 0;
515         //como no arquivo PMF_ab_baseXX.dat é gravado todas as tarefas, é
516         necessario posicionar
517         // o ponteiro de leitura no inicio da matriz de fatores gerada pelo
518         tarefa minTask
519         // que gerou o menor menor Q(robusto)

```

```

518     if(minTask == 1){
519         ptrPos = nrObs*nrFat;
520     }
521     else{
522         ptrPos = (minTask-1)*((nrObs*nrFat)+(nrVar*nrFat)+(nrFat)) + (nrObs*
            nrFat);
523     }
524     //posiciona o ponteiro do arquivo na matriz de fatores
525     for(count = 1; count <= ptrPos; count ++){
526     {
527         fscanf(file, "%lf", &n1);
528     }
529     //le matriz de fatores no arquivo: colunas sao fatores linhas sao as
        variaveis
530     for(k = 0; k < nrVar; k ++){
531     {
532         for(l = 0; l < nrFat; l ++){
533             fscanf(file, "%lf", &M[k][l]);
534         }
535     }
536     /* for(k = 0; k < nrVar; k ++){
537     {
538         for(l = 0; l < nrFat; l ++){
539             printf("%f ",M[k][l]);
540         }
541         printf("\n");
542     }*/
543
544     fclose(file);
545     }
546     else{
547         printf("Nao foi possivel abrir o arquivo de entrada(readOutputFile): %s"
            ,filename);
548         exit(EXIT_FAILURE);
549     }
550     //free(M);
551
552     return M;
553 }
554 }
555
556 void insertUncertainty(int nrVar, int nrObs, FILE *file, FILE *output){
557
558
559     double **M;
560     double uncertainty;
561     int i,j,k,l;
562     double LD[18], u[18];
563
564
565     LD[0] = 0.002 ;
566     LD[1] = 0.001 ;
567     LD[2] = 0.005 ;
568     LD[3] = 0.0007 ;
569     LD[4] = 0.001 ;
570     LD[5] = 0.0002 ;
571     LD[6] = 0.0008 ;
572     LD[7] = 0.001 ;
573     LD[8] = 0.001 ;
574     LD[9] = 0.0001 ;
575     LD[10] = 0.0001 ;
576     LD[11] = 0.001 ;
577     LD[12] = 0.001 ;
578     LD[13] = 0.001 ;
579     LD[14] = 0.0003 ;

```

```

580 LD[15] = 0.015 ;
581 LD[16] = 0.03 ;
582 LD[17] = 0.0003 ;
583
584 u[0] = 0.0379 ;
585 u[1] = 0.0206 ;
586 u[2] = 0.027 ;
587 u[3] = 0.0237 ;
588 u[4] = 0.0275 ;
589 u[5] = 0.026 ;
590 u[6] = 0.0288 ;
591 u[7] = 0.0204 ;
592 u[8] = 0.0251 ;
593 u[9] = 0.05 ;
594 u[10] = 0.0354 ;
595 u[11] = 0.0253 ;
596 u[12] = 0.0178 ;
597 u[13] = 0.0402 ;
598 u[14] = 0.0205 ;
599 u[15] = 0.0263 ;
600 u[16] = 0.0361 ;
601 u[17] = 0.025 ;
602
603
604
605
606
607 M = (double **) malloc (nrObs * sizeof (double*));
608
609 for (i = 0; i < nrObs; i++){
610     M[i] = (double*) malloc(nrVar*sizeof (double));
611 }
612
613 char Mchar[15];
614 char buffer[1024];
615 char *record,*line;
616 if ( file != NULL )
617 {
618     i = 0;
619     j = 0;
620     //while ((line=fgets (buffer , sizeof (buffer) , file ))!=NULL)
621     for(i = 0; i <nrObs; i++)
622     {
623         line=fgets (buffer , sizeof (buffer) , file );
624         //puts (line);
625         record = strtok (line , ",");
626
627
628         //while (record != NULL)
629         for(j = 0; j<nrVar; j++)
630         {
631             //printf("%.12f ",(double) atof (record));
632             M[i][j] = (double) strtod (record ,NULL);
633             //printf("%.12f ",M[i][j]);
634             record = strtok (NULL, ",");
635         }
636         //printf("\n %d \n", i);
637     }
638 }
639 else{
640     printf("Nao foi possivel abrir o arquivo de entrada(insertUncertainty) \
        n");
641     system("pause");
642     exit (0);
643 }

```

```

644
645
646
647 for(k = 0; k < nrObs; k ++){
648     {
649         for(l = 0; l < nrVar; l ++){
650
651             /* trata limite de detecção LD*/
652             if(M[k][l] < LD[l]) {
653                 // proposta Polissar et al. (1998)
654                 M[k][l] = LD[l]/2;
655                 //proposta Chueinta et al. (2000) - ref 27
656                 //M[k][l] = LD[l]/2;
657                 /*proposta Ito et al. (2004) ref 10
658                 M[k][l] = LD[l]/2;*/
659                 /*proposta ref EPA PMF 5.0 - Norris et al. (2014)
660                 M[k][l] = LD[l]/2;*/
661
662             }
663
664
665             sprintf(Mchar, "%.10f", M[k][l]);
666
667
668             if(l==(nrVar-1)){
669                 fprintf(output, "%s", Mchar);
670             }
671             else{
672                 fprintf(output, "%s, ", Mchar);
673             }
674         }
675     }
676     fprintf(output, "\n");
677 }
678 for(k = 0; k < nrObs; k ++){
679     {
680         for(l = 0; l < nrVar; l ++){
681
682             if(M[k][l] < LD[l]) {
683                 // proposta Polissar et al. (1998)
684                 uncertainty = (LD[l]/2) + (LD[l]/3);
685                 //proposta Chueinta et al. (2000) - ref 27
686                 //uncertainty = LD[l]/2;
687                 /*proposta Ito et al. (2004) - ref 10
688                 uncertainty = LD[l]/2;*/
689                 /*proposta EPA PMF 5.0 - Norris et al. (2014)
690                 uncertainty = (LD[l]/2) + (LD[l]/3);*/
691
692             }else{
693                 //proposta Polissar et al. (1998)
694                 uncertainty = (double)(M[k][l]*u[l] + LD[l]/3);
695                 //proposta Chueinta et al. (2000) - ref 27
696                 //uncertainty = (double)(u[l] + 0.2)*M[k][l];
697                 /*proposta Ito et al. (2004) - ref 10
698                 uncertainty = (double)(0.05*M[k][l] + LD[l]);*/
699                 /*proposta EPA PMF 5.0 - Norris et al. (2014)
700                 uncertainty = (double)(sqrt(pow(0.05*M[k][l],2) + pow
701                     (0.5*LD[l],2)));*/
702             }
703
704             sprintf(Mchar, "%.10f", uncertainty);
705
706             if(l==(nrVar-1)){
707                 fprintf(output, "%s", Mchar);

```

```

708         }
709         else{
710             fprintf(output,"%s",Mchar);
711         }
712     }
713     fprintf(output,"\n");
714 }
715 free(M);
716
717 }
718
719
720
721 int main(){
722
723     double **MMeans,**MSQ,**MSS,**MFatOrig;
724     int i,j,k,l,nrVar,nrFat,nrObs,qtySimulacoes,minTask,variosArquivosEntrada;
725
726     char buffer[1024];
727     char *line;
728     nrVar = 0;
729     nrFat = 0;
730     nrObs = 0;
731     qtySimulacoes = 0;
732
733     //FILE *fpParametros = fopen("F:/MAE_Dissertacao/Multivar/SimPMF/Bases_SAS/
734     //SimArtRecife/ComOutliers/ref27/configuracoes.txt","r");
735     FILE *fpParametros = fopen("C:/pmf/configuracoes.txt","r");
736
737     char *me2ExecPath = malloc(300);
738     char *inputDataWithoutUnc_path = malloc(300);
739     char *inputDataBaseName = malloc(300);
740     char *inputPMFDataBaseName = malloc(300);
741     char *outputPMF_ab_baseBaseName = malloc(300);
742     size_t len;
743
744     for(i = 1; i <= 20; i++){
745
746         line=fgets(buffer,sizeof(buffer),fpParametros);
747         switch (i)
748         {
749             case 2:
750                 len = strlen(line);
751                 if (len > 0 && line[len-1] == '\n') {
752                     line[--len] = '\0';
753                 }
754                 strcpy(me2ExecPath,line);
755                 break;
756             case 4:
757                 len = strlen(line);
758                 if (len > 0 && line[len-1] == '\n') {
759                     line[--len] = '\0';
760                 }
761                 strcpy(inputDataWithoutUnc_path,line);
762                 break;
763             case 6:
764                 len = strlen(line);
765                 if (len > 0 && line[len-1] == '\n') {
766                     line[--len] = '\0';
767                 }
768                 strcpy(inputDataBaseName,line);
769                 break;
770             case 8:
771                 len = strlen(line);

```



```

772         if (len > 0 && line[len-1] == '\n') {
773             line[--len] = '\0';
774         }
775         strcpy(inputPMFDataBaseName, line);
776         break;
777     case 10:
778         len = strlen(line);
779         if (len > 0 && line[len-1] == '\n') {
780             line[--len] = '\0';
781         }
782         strcpy(outputPMF_ab_baseBaseName, line);
783         break;
784     case 12:
785         variosArquivosEntrada = atoi(line);
786         break;
787     case 14:
788         qtySimulacoes = atoi(line);
789         break;
790     case 16:
791         nrObs = atoi(line);
792         break;
793     case 18:
794         nrVar = atoi(line);
795         break;
796     case 20:
797         nrFat = atoi(line);
798         break;
799     }
800 }
801 }
802 }
803 fclose(fpParametros);
804
805 char *seedLogPath = malloc(300);
806 strcpy(seedLogPath, me2ExecPath);
807 strcat(seedLogPath, "Seeds.txt");
808
809 char *minTaskLogPath = malloc(300);
810 strcpy(minTaskLogPath, me2ExecPath);
811 strcat(minTaskLogPath, "minTaskLog.txt");
812
813 char *sumarioPath = malloc(300);
814 strcpy(sumarioPath, me2ExecPath);
815 strcat(sumarioPath, "sumario.txt");
816
817 char *fatOrigPath = malloc(300);
818 strcpy(fatOrigPath, me2ExecPath);
819 strcat(fatOrigPath, "loads1.txt");
820
821 char *saidaPath = malloc(300);
822 strcpy(saidaPath, me2ExecPath);
823 strcat(saidaPath, "saida.txt");
824
825
826 FILE *fpSeedLog = fopen(seedLogPath, "w");
827 FILE *fpMinTaskLog = fopen(minTaskLogPath, "w");
828 FILE *fpSumario = fopen(sumarioPath, "w");
829 FILE *fpFatOrig = fopen(fatOrigPath, "r");
830 FILE *fpSaida = fopen(saidaPath, "w");
831
832 free(seedLogPath);
833 free(minTaskLogPath);
834 free(sumarioPath);
835 free(fatOrigPath);
836 free(saidaPath);

```

```

837
838
839
840 //Randomize();
841
842 MSS = (double **) malloc (nrFat* sizeof (double*));
843 for (i = 0; i < nrFat; i++){
844     MSS[i] = (double*) malloc(nrFat*sizeof (double));
845 }
846
847 MMeans = (double **) malloc (nrVar* sizeof (double*));
848 for (i = 0; i < nrVar; i++){
849     MMeans[i] = (double*) malloc(nrFat*sizeof (double));
850 }
851 //inicializa a matriz que vai acumular os indices de importancia para
      calcular a media
852 for (i = 0; i < nrVar; i++){
853     for( j = 0; j < nrFat; j++){
854         MMeans[i][j] = 0;
855     }
856 }
857
858 MSQ = (double **) malloc (nrVar* sizeof (double*));
859 for (i = 0; i < nrVar; i++){
860     MSQ[i] = (double*) malloc(nrFat*sizeof (double));
861 }
862 //inicializa a matriz que vai acumular os indices de importancia ao quadrado
      para calcular o dp
863 for (i = 0; i < nrVar; i++){
864     for( j = 0; j < nrFat; j++){
865         MSQ[i][j] = 0;
866     }
867 }
868
869
870 //inicializa a matriz de fatores origiais
871 MFatOrig = (double **) malloc (nrVar* sizeof (double*));
872 for (i = 0; i < nrVar; i++){
873     MFatOrig[i] = (double*) malloc(nrFat*sizeof (double));
874 }
875
876 for(k = 0; k < nrVar; k++)
877 {
878     for(l = 0; l < nrFat; l++){
879         fscanf(fpFatOrig, "%lf", &MFatOrig[k][l]);
880     }
881 }
882 fclose(fpFatOrig);
883
884 //////////////////////////////////////
885
886
887 char *iniParamsFilePath = malloc(300);
888 strcpy (iniParamsFilePath, me2ExecPath);
889 strcat (iniParamsFilePath, "iniParams.txt");
890
891 char *tempIniParamsFilePath = malloc(300);
892 strcpy (tempIniParamsFilePath, me2ExecPath);
893 strcat (tempIniParamsFilePath, "temp.txt");
894
895 char *inputIniParamsCopyFilePath = malloc(300);
896 strcpy (inputIniParamsCopyFilePath, me2ExecPath);
897 strcat (inputIniParamsCopyFilePath, "iniParams_copy.txt");
898
899 char *systemExecME2FilePath = malloc(300);

```

```

900 strcpy ( systemExecME2FilePath , me2ExecPath );
901 strcat ( systemExecME2FilePath , "me2gfp4_1345c4.exe      PMF_bs_6f8xx_sealed_GUI.
      ini" );
902
903
904
905 printf ( "\n %d \n" , qtySimulacoes );
906
907 for ( i = 1; i <=qtySimulacoes; i++){
908
909     double **M, **MfatCorrep;
910
911     char ichar [3];
912     sprintf ( ichar , "%d" , i );
913
914     char *inputDataWithUnc_pathFileName = malloc (300);
915     char *outputDataWithUnc_pathFileName = malloc (300);
916
917     strcpy ( inputDataWithUnc_pathFileName , inputDataWithoutUnc_path );
918     strcat ( inputDataWithUnc_pathFileName , inputDataBaseName );
919
920     strcpy ( outputDataWithUnc_pathFileName , me2ExecPath );
921     strcat ( outputDataWithUnc_pathFileName , inputPMFDataBaseName );
922
923
924     if ( variosArquivosEntrada == 0 ){
925         strcat ( inputDataWithUnc_pathFileName , ichar );
926     }
927     strcat ( inputDataWithUnc_pathFileName , ".txt" );
928     strcat ( outputDataWithUnc_pathFileName , ichar );
929     strcat ( outputDataWithUnc_pathFileName , ".txt" );
930
931
932     FILE *fpInputDataWithoutUnc = fopen ( inputDataWithUnc_pathFileName , "a+" );
933     FILE *fpOutputDataWithUnc = fopen ( outputDataWithUnc_pathFileName , "w" );
934
935     insertUncertainty ( nrVar , nrObs , fpInputDataWithoutUnc , fpOutputDataWithUnc )
936         ;
937
938     fclose ( fpInputDataWithoutUnc );
939     fclose ( fpOutputDataWithUnc );
940
941     free ( inputDataWithUnc_pathFileName );
942     free ( outputDataWithUnc_pathFileName );
943
944     char *main_data_filename = malloc (50);
945     char *previous_results_filename = malloc (50);
946     char *output_filename = malloc (50);
947
948     strcpy ( main_data_filename , inputPMFDataBaseName );
949     strcpy ( previous_results_filename , outputPMF_ab_baseBaseName );
950     strcpy ( output_filename , outputPMF_ab_baseBaseName );
951
952     strcat ( main_data_filename , ichar );
953     strcat ( main_data_filename , ".txt" );
954
955     strcat ( previous_results_filename , ichar );
956     strcat ( previous_results_filename , ".dat" );
957
958
959     strcat ( output_filename , ichar );
960     //abre o arquivo de config no formato padrao e um arquivo temporario
      para armazenar o texto com a modificacao
961

```

```

962     FILE *inputIniParams = fopen(inputIniParamsCopyFilePath, "r");
963     FILE *output = fopen(tempIniParamsFilePath, "w+");
964
965     //copia o arquivo padrao com substituicao feita para o arquivo
        temporario no ponteiro output
966     configIniParamFile1(inputIniParams, output, "main_data_filename.txt",
        main_data_filename);
967     fclose(inputIniParams);
968     fclose(output);
969     //renomeia o arquivo temporario do ponteiro output para iniParams.txt
970     rename(tempIniParamsFilePath, iniParamsFilePath);
971
972     //usa o arquivo iniParams.txt com as modificacoes anteriores como base e
        cria novamente um arquivo temporario
973     inputIniParams = fopen(iniParamsFilePath, "r");
974     output = fopen(tempIniParamsFilePath, "w");
975     //copia o arquivo base com substituicao feita para o arquivo temporario
        no ponteiro output
976     configIniParamFile1(inputIniParams, output, "previous_results_filename.dat",
        previous_results_filename);
977     fclose(inputIniParams);
978     fclose(output);
979     //remove a versao anterior do arquivo iniParams.txt
980     remove(iniParamsFilePath);
981     //renomeia o arquivo temporario com a substituicao feita para iniParams
        .txt
982     rename(tempIniParamsFilePath, iniParamsFilePath);
983
984     //usa o arquivo iniParams.txt com as modificacoes anteriores como base e
        cria novamente um arquivo temporario
985     inputIniParams = fopen(iniParamsFilePath, "r");
986     output = fopen(tempIniParamsFilePath, "w");
987     //copia o arquivo base com substituicao feita para o arquivo temporario
        no ponteiro output
988     configIniParamFile1(inputIniParams, output, "output_filename",
        output_filename);
989     fclose(inputIniParams);
990     fclose(output);
991     //remove a versao anterior do arquivo iniParams.txt
992     remove(iniParamsFilePath);
993     //renomeia o arquivo temporario com a substituicao feita para iniParams
        .txt
994     rename(tempIniParamsFilePath, iniParamsFilePath);
995     //////////////////////////////////////
996
997     //configura NrObs NrVar NrFat
998
999     //usa o arquivo iniParams.txt com as modificacoes anteriores como base e
        cria novamente um arquivo temporario
1000    inputIniParams = fopen(iniParamsFilePath, "r");
1001    output = fopen(tempIniParamsFilePath, "w");
1002    //copia o arquivo base com substituicao feita para o arquivo temporario
        no ponteiro output
1003    configNrObsNrVarNrFat(nrObs, nrVar, nrFat, inputIniParams, output);
1004    fclose(inputIniParams);
1005    fclose(output);
1006    //remove a versao anterior do arquivo iniParams.txt
1007    remove(iniParamsFilePath);
1008    //renomeia o arquivo temporario com a substituicao feita para iniParams
        .txt
1009    rename(tempIniParamsFilePath, iniParamsFilePath);
1010
1011
1012    //CHANGE SEED;
1013    //usa o arquivo iniParams.txt com as modificacoes anteriores como base e

```

```

1014     cria novamente um arquivo temporario
1015     inputIniParams = fopen(iniParamsFilePath, "r");
1016     output = fopen(tempIniParamsFilePath, "w");
1017     // copia o arquivo base com substituicao feita para o arquivo temporario
1018     no ponteiro output
1019     changeSeed(inputIniParams, output, fpSeedLog);
1020     fclose(inputIniParams);
1021     fclose(output);
1022
1023     //remove a versao anterior do arquivo iniParams.txt
1024     remove(iniParamsFilePath);
1025     //renomeia o arquivo temporario com a substituicao feita para iniParams
1026     .txt
1027     rename(tempIniParamsFilePath, iniParamsFilePath);
1028
1029     free(main_data_filename);
1030     free(previous_results_filename);
1031     free(output_filename);
1032     free(inputIniParams);
1033     free(output);
1034
1035     system(systemExecME2FilePath);
1036     //system("runbatch");
1037     //printf("\n Simul: %d \n", i);
1038     minTask = readPmfReport(fpMinTaskLog, me2ExecPath, 20);
1039
1040     printf("\n Simul: %d   minTask: %d \n", i, minTask);
1041
1042     char *inputPMF_ab_basePath = malloc(300);
1043     strcpy(inputPMF_ab_basePath, me2ExecPath);
1044     strcat(inputPMF_ab_basePath, outputPMF_ab_baseBaseName);
1045
1046     strcat(inputPMF_ab_basePath, ichar);
1047     strcat(inputPMF_ab_basePath, ".dat");
1048     M = readOutputFile(nrFat, nrVar, nrObs, inputPMF_ab_basePath, minTask);
1049     MFatCorrep = identFactor(nrFat, nrVar, M, MSS, MFatOrig);
1050     sortFactor(nrFat, nrVar, M, MSS, MFatCorrep, MFatOrig, fpSaida);
1051
1052     free(MFatCorrep);
1053
1054     for (k = 0; k < nrVar; k++){
1055
1056         for (l = 0; l < nrFat; l++){
1057             MMeans[k][l] = MMeans[k][l] + M[k][l];
1058             MSQ[k][l] = MSQ[k][l] + pow(M[k][l], 2);
1059         }
1060     }
1061     free(inputPMF_ab_basePath);
1062
1063     free(M);
1064
1065
1066 }
1067
1068 for(i = 0; i < nrVar; i++){
1069     for(j = 0; j < nrFat; j++){
1070         fprintf(fpSumario, "%f ", MMeans[i][j]/qtySimulacoes);
1071     }
1072     fprintf(fpSumario, "\n");
1073 }
1074 fprintf(fpSumario, "\n");
1075

```

```

1076     for(i = 0; i < nrVar; i++){
1077         for(j = 0; j < nrFat; j++){
1078             fprintf(fpSumario, "%f ", sqrt(MSQ[i][j]/qtySimulacoes - pow((MMeans[
1079                 i][j]/qtySimulacoes),2)));
1080         }
1081         fprintf(fpSumario, "\n");
1082     }
1083     free(me2ExecPath);
1084     free(iniParamsFilePath);
1085     free(tempIniParamsFilePath);
1086     free(inputIniParamsCopyFilePath);
1087     free(inputDataWithoutUnc_path);
1088     free(inputDataBaseName);
1089     free(inputPMFDataBaseName);
1090     free(outputPMF_ab_baseBaseName);
1091
1092     free(MFatOrig);
1093     free(MMeans);
1094     free(MSQ);
1095     free(MSS);
1096     fclose(fpSumario);
1097     fclose(fpSeedLog);
1098     fclose(fpMinTaskLog);
1099     fclose(fpSaida);
1100
1101     system("pause");
1102     return 0;
1103 }

```


Apêndice B

Gráficos

B.1 Exemplo de séries de tempo simuladas sem *outliers*

Figura B.1: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.2: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 2

Figura B.3: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 3

Figura B.4: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 4

Figura B.5: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 5

Figura B.6: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 6

B.2 Exemplo de séries de tempo simuladas com *outliers* - Exponencial com média 1,5

Figura B.7: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 1,5 - Fator 1

Figura B.8: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 1,5 - Fator 2

Figura B.9: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 1,5 - Fator 3

Figura B.10: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 1,5 - Fator 4

Figura B.11: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 1,5 - Fator 5

Figura B.12: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 1,5 - Fator 6

B.3 Exemplo de séries de tempo simuladas com *outliers* - Exponencial média 3

Figura B.13: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 3 - Fator 1

Figura B.14: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 3 - Fator 2

Figura B.15: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 3 - Fator 3

Figura B.16: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 3 - Fator 4

Figura B.17: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 3 - Fator 5

Figura B.18: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 3 - Fator 6

B.4 Exemplo de séries de tempo simuladas com *outliers* - Exponencial média 9

Figura B.19: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 9 - Fator 1

Figura B.20: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 9 - Fator 2

Figura B.21: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 9 - Fator 3

Figura B.22: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 9 - Fator 4

Figura B.23: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 9 - Fator 5

Figura B.24: séries de emissões simuladas segundo perfis da tabela 4.2 com outliers - Exponencial com média 9 - Fator 6

B.5 Exemplo de incertezas para uma mesma base simulada sem *outliers*

Figura B.25: séries de incertezas com proposta ref. *Polissar et al. (1998)* de emissões simuladas sem outliers segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.26: séries de incertezas com proposta ref. *Chueinta et al. (2000)* de emissões simuladas sem outliers segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.27: séries de incertezas com proposta ref. *Ito et al. (2004)* de emissões simuladas sem outliers segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.28: séries de incertezas com proposta ref. *Norris et al. (2014)* de emissões simuladas sem outliers segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.29: séries de incertezas com proposta de 5% do valor de emissões simuladas sem outliers segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.30: séries de incertezas com proposta de 10% do valor de emissões simuladas sem outliers segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.31: séries de incertezas com proposta de 20% do valor de emissões simuladas sem outliers segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

B.6 Exemplo de incertezas para uma mesma base simulada com *outliers* - Exponencial com média 1,5

Figura B.32: séries de incertezas com proposta ref. *Polissar et al. (1998)* de emissões simuladas com *outliers* - Exponencial com média 1,5 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.33: séries de incertezas com proposta ref. *Chueinta et al. (2000)* de emissões simuladas com *outliers* - Exponencial com média 1,5 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.34: séries de incertezas com proposta ref. *Ito et al. (2004)* de emissões simuladas com *outliers* - Exponencial com média 1,5 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.35: séries de incertezas com proposta ref. Norris et al. (2014) de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 1,5 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.36: séries de incertezas com proposta de 5% do valor de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 1,5 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.37: séries de incertezas com proposta de 10% do valor de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 1,5 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.38: séries de incertezas com proposta de 20% do valor de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 1,5 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

B.7 Exemplo de incertezas para uma mesma base simulada com *outliers* - Exponencial com média 3

Figura B.39: séries de incertezas com proposta ref. *Polissar et al. (1998)* de emissões simuladas com *outliers* - Exponencial com média 3 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.40: séries de incertezas com proposta ref. *Chueinta et al. (2000)* de emissões simuladas com *outliers* - Exponencial com média 3 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.41: séries de incertezas com proposta ref. *Ito et al. (2004)* de emissões simuladas com *outliers* - Exponencial com média 3 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.42: séries de incertezas com proposta ref. *Norris et al. (2014)* de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 3 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.43: séries de incertezas com proposta de 5% do valor de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 3 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.44: séries de incertezas com proposta de 10% do valor de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 3 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.45: séries de incertezas com proposta de 20% do valor de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 3 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

B.8 Exemplo de incertezas para uma mesma base simulada com *outliers* - Exponencial com média 9

Figura B.46: séries de incertezas com proposta ref. *Polissar et al. (1998)* de emissões simuladas com *outliers* - Exponencial com média 9 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.47: séries de incertezas com proposta ref. *Chueinta et al. (2000)* de emissões simuladas com *outliers* - Exponencial com média 9 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.48: séries de incertezas com proposta ref. *Ito et al. (2004)* de emissões simuladas com *outliers* - Exponencial com média 9 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.49: séries de incertezas com proposta ref. *Norris et al. (2014)* de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 9 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.50: séries de incertezas com proposta de 5% do valor de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 9 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.51: séries de incertezas com proposta de 10% do valor de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 9 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Figura B.52: séries de incertezas com proposta de 20% do valor de emissões simuladas com outliers - Exponencial com média 9 - segundo perfis da tabela 4.2 - Fator 1

Referências Bibliográficas

- Arana(2014)** Andrea Araujo Arana. *Aerossois Atmosfericos na Amazonia Composicao elementar organica e inorganica em regioes com diferentes usos do solo*. Tese de Doutorado, Instituto Nacional de Pesquisa da Amazonia, Universidade do Estado do Amazonas, Brasil. Citado na pág. [xi](#), [xix](#), [9](#), [10](#), [11](#), [12](#)
- Castanho e Artaxo(2001)** Andrea D.A. Castanho e Paulo Artaxo. Wintertime and summertime sao paulo aerosol source apportionment study. *Atmospheric Environment*, 35:4889–4902. Citado na pág. [xix](#), [7](#), [8](#)
- Chueinta et al.(2000)** Wanna Chueinta, Philip K. Hopke e Pentti Paatero. Investigation of sources of atmospheric aerosol at urban and suburban residential areas in thailand by positive matrix factorization. *Atmospheric Environment*, 34:3319–3329. Citado na pág. [xii](#), [xiii](#), [xiv](#), [xv](#), [xvi](#), [xvii](#), [xix](#), [41](#), [42](#), [45](#), [52](#), [58](#), [64](#), [68](#), [69](#), [70](#), [72](#), [105](#), [107](#), [109](#), [111](#)
- dos Santos et al.(2014)** Luis H.M. dos Santos, Americo A.F.S. Kerr, Thiago G. Verissimo, Maria de Fatima Andrade, Regina Maura de Miranda, Adalgiza Fornaro e Paulo Saldiva. Analysis of atmospheric aerosol(pm2.5) in recife city, brazil. *Journal of the Air and Waste Management Association*, 64:519–528. Citado na pág. [xix](#), [4](#), [28](#), [29](#), [31](#)
- dos Santos Junior(2015)** Djacinto Aparecido Monteiro dos Santos Junior. Emissoes veiculares em sao paulo quantificacao de fontes com modelos receptores e caracterizacao do material carbonaceo. Dissertação de Mestrado, Instituto de Fisica, Universidade de Sao Paulo, Brasil. Citado na pág. [7](#)
- Gieken e Markowicz(2002)** Rene E. Van Gieken e Andrzej A. Markowicz. *Handbook of X-Ray Spectrometry*. Marcel Dekker, Inc., 2 edição. Practical Spectroscopy Series Volume 29. Citado na pág. [12](#)
- Henry et al.(1984)** R.C. Henry, C.L. Lewis, P. K. Hopke e H. J. Williamson. Review of receptor model fundamentals. *Atmospheric Environment*, 18:1507–1515. Citado na pág. [1](#), [3](#)
- Ito et al.(2004)** Kazuhiko Ito, Nan Xue e George Thurston. Spatial variation of pm 2.5 chemical species and source-apportioned mass concentrations in new york city. *Atmospheric Environment*, 38:5269–5282. Citado na pág. [xii](#), [xiii](#), [xiv](#), [xvi](#), [xvii](#), [41](#), [42](#), [45](#), [51](#), [57](#), [63](#), [68](#), [69](#), [70](#), [72](#), [105](#), [107](#), [109](#), [111](#)
- Kan e Chen(2004)** Hai-Dong Kan e Bing-Heng Chen. Statistical distributions of ambient air pollutants in shanghai china. *Biomedical and Environmental Sciences*, 17:366–371. Citado na pág. [27](#)
- Kosusko(2014)** Michael Kosusko. *SPECIATE Version 4.4 Database Development Documentation*, Fevereiro 2014. EPA 600/R-13/307. Citado na pág. [9](#)
- Landsberger e Creatchman(1999)** Shelson Landsberger e Marsha Creatchman. *Elemental Analysis of Airbone Particles*. Gordon and Breach Science Publishers, 1 edição. Advances in environmental, industrial and process control technologies volume 1. Citado na pág. [42](#)

- Lee e Seung(1999)** D. D. Lee e H. S. Seung. Learning the parts of objects by non-negative matrix factorization. *Nature*, 401:788–791. Citado na pág. [5](#), [72](#)
- Norris et al.(2014)** G. Norris, R.Duvall, S. Brown e S. Bai. *EPA Positive Matrix Factorization(PMF) 5.0 Fundamentals and User Guide*, Abril 2014. EPA/600/R-14/108. Citado na pág. [xi](#), [xii](#), [xiii](#), [xiv](#), [xvi](#), [xvii](#), [5](#), [14](#), [15](#), [16](#), [18](#), [20](#), [21](#), [22](#), [23](#), [24](#), [25](#), [26](#), [35](#), [41](#), [44](#), [50](#), [56](#), [62](#), [68](#), [69](#), [70](#), [72](#), [106](#), [108](#), [110](#), [112](#)
- Norris et al.(2009)** Gary Norris, Ram Vedantham, Katie Wade, Patrick Zahn e Steve Brown. *Guidance Document for PMF Applications with the Multilinear Engine*, Abril 2009. EPA 600/R-09/032. Citado na pág. [5](#)
- Oyama(2010)** Beatriz Sayuri Oyama. Identificacao de fontes de particulas finas na atmosfera urbana de sao paulo. Dissertação de Mestrado, Instituto de Astronomia Geofisica e Ciencias Atmosfericas, Universidade de Sao Paulo, Brasil. Citado na pág. [xi](#), [7](#), [12](#)
- Paatero(1999)** P. Paatero. The multilinear engine: a table-driven, least squares program for solving multilinear problems including the n-way parallel factor analysis model. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, 8:4:854–888. Citado na pág. [5](#)
- Paatero e Tapper(1994)** P. Paatero e U. Tapper. Positive matrix factorization: A non-negative factor model with optimal utilization of error estimates of data values. *Environmetrics*, 5:111–126. Citado na pág. [1](#), [3](#), [4](#), [71](#)
- Paatero et al.(2002)** P. Paatero, Philip K. Hopke, Xin-Hua Song e Ziad Ramadan. Understanding and controlling rotations in factor analytic models. *Chemometrics and Intelligent laboratory systems*, 60:253–264. Citado na pág. [24](#)
- Paatero et al.(2014)** P. Paatero, S. Eberly, S. G. Brown e G. A. Norris. Methods for estimating uncertainty in factor analytic solutions. *Atmospheric Measurement Techniques*, 7:781–797. Citado na pág. [21](#)
- Polissar et al.(1998)** A. V. Polissar, P. K. Hopke, P. Paatero, W. C. Malm e J. F. Sisler. Atmospheric aerosol over alaska 2. elemental composition and sources. *Journal of Geophysical Research*, 103:19045–19057. Citado na pág. [xii](#), [xiii](#), [xiv](#), [xvi](#), [xvii](#), [6](#), [41](#), [44](#), [51](#), [57](#), [63](#), [68](#), [69](#), [70](#), [72](#), [105](#), [107](#), [109](#), [111](#)
- Ramadan et al.(2003)** Ziad Ramadan, Bass Eickhout, Xin-Hua Song, L.M.C. Buydens e Philip K. Hopke. Comparison of positive matrix factorization and multilinear engine for the source apportionment of particulate pollutants. *Chemometrics and intelligent laboratory systems*, 66:15–28. Citado na pág. [5](#), [72](#)
- Reff et al.(2007)** A. Reff, S.I Eberly e P.V Bhawe. Receptor modeling of ambient particulate matter data using positive matrix factorization: Review of existing methods. *Journal of Air Waste Management Association*, 57:2:146–154. Citado na pág. [4](#), [5](#), [6](#), [15](#), [71](#)
- Rumburg et al.(2001)** Brian Rumburg, Richard Alldredge e Candis Claiborn. Statistical distributions of particulate matter and the error associated with the sampling frequency. *Atmospheric Environment*, 35:2907–2920. Citado na pág. [27](#)
- Shahnaz et al.(2006)** F. Shahnaz, M. W. Berry, V. P. Pauca e R. J. Plemmons. Document clustering using nonnegative matrix factorization. *Information Processing and Management*, 42: 373–386. Citado na pág. [5](#)
- Wang et al.(2006)** G. Wang, A. V. Kossenkova e M. F. Ochs. A modified non-negative factorization algorithm utilizing uncertainty estimates. *BMC Bioinformatics*, 7:1–10. Citado na pág. [5](#), [72](#)