UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FACULDADE DE FILOSOFIA, CIÊNCIAS E LETRAS DE RIBEIRÃO PRETO

OLAVO HENRIQUE MENIN

**Eficácia em problemas inversos: generalização do
algoritmo de recozimento simulado e função de
regularização aplicados a tomografia de
impedância elétrica e ao espectro de raios X**

Ribeirão Preto
2014

OLAVO HENRIQUE MENIN

**Eficácia em problemas inversos: generalização do
algoritmo de recozimento simulado e função de
regularização aplicados a tomografia de
impedância elétrica e ao espectro de raios X**

Tese apresentada à Faculdade de Filosofia,
Ciências e Letras de Ribeirão Preto da
Universidade de São Paulo como parte das
exigências para a obtenção do título de
Doutor em Ciências.

Área de Concentração:

Física Aplicada a Medicina e Biologia.

Orientador:

Alexandre Souto Martinez.

Versão corrigida

Versão original disponível na FFCLRP-USP

Ribeirão Preto

2014

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

FICHA CATALOGRÁFICA

Menin, Olavo Henrique

Eficácia em problemas inversos: generalização do algoritmo de recozimento simulado e função de regularização aplicados a tomografia de impedância elétrica e ao espectro de raios X / Olavo Henrique Menin; orientador: Alexandre Souto Martinez. - - Ribeirão Preto, 2014.

84 f. : il.

Tese (Doutorado) - - Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, 2014.

Inclui Bibliografia.

1. Otimização estocástica; 2. Funções generalizadas; 3. Métodos computacionais; 4. Física Médica.

Nome: MENIN, Olavo Henrique

Título: Eficácia em problemas inversos: generalização do algoritmo de recozimento simulado e função de regularização aplicados a tomografia de impedância elétrica e ao espectro de raios X

Tese apresentada à Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo como parte das exigências para a obtenção do título de Doutor em Ciências.

Aprovado em: 08/12/2014.

Banca Examinadora

Prof. Dr. Alexandre Souto Martinez

Instituição: Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Renato Tinós

Instituição: Universidade de São Paulo

Profa. Dra. Renata Ferranti Leoni

Instituição: Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Paulo Celso Greco Júnior

Instituição: Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Eduardo André Mossin

Instituição: Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo

Ao eterno resultado, meus filhos, Thales e Sofia.
À minha amada e sempre presente companheira, Carol.
À origem e causa primeira, meus pais, Gilberto e Alice.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente aos meus pais, Gilberto (eternamente presente) e Alice, por me concederem o milagre da vida e por todo carinho, educação e incentivo que me proporcionaram.

À minha esposa, Carol, alma gêmea, companheira de sempre e para sempre, pelo amor, apoio e paciência.

Aos meus filhos, Thales e Sofia, simplesmente por existirem e dar sentido à minha vida.

Às minhas irmãs, Rita, Josélia e Adriana, companheiras desde que me conheço por gente e das quais me orgulho e me espelho.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Alexandre Souto Martinez, por me aceitar como orientando, pela confiança depositada em meu trabalho e pelas incontáveis e decisivas contribuições em todos os estágios do projeto.

À Prof. Dra. Vanessa Rolnik, que me apoiou desde o início do meu mestrado e colaborou marcadamente no desenvolvimento do doutorado.

Ao Prof. Dr. Alessandro Martins da Costa, pela colaboração decisiva nos estudos sobre o espectro de raios-X.

À todos os professores e professoras que até hoje contribuíram para minha educação, pilares sólidos fundamentais.

Aos os colegas da pós-graduação e do Laboratório de Modelagem em Sistemas Complexos.

À todos do DF e da FFCLRP pela ajuda e pelos esclarecimentos.

À todos os meus colegas do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo.

Aos meus amigos e coordenadores do Colégio Einstein, Gula e Zeid, pelos galhos quebrados durante esses anos.

*É vão fazer com mais o que pode ser feito com
menos*

Guilherme de Ockham

Resumo

MENIN, O. H. **Eficácia em problemas inversos: generalização do algoritmo de recozimento simulado e função de regularização aplicados a tomografia de impedância elétrica e ao espectro de raios X.** 2014. 84 f. Tese (Doutorado - Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada a Medicina e Biologia) - Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, 2014.

A modelagem de processos em física e engenharia frequentemente resulta em problemas inversos. Em geral, esses problemas apresentam difícil resolução, pois são classificados como *mal-postos*. Resolvê-los, tratando-os como problemas de otimização, requer a minimização de uma função objetivo, que mede a discrepância entre os dados experimentais e os obtidos pelo modelo teórico, somada a uma função de regularização. Na maioria dos problemas práticos, essa função objetivo é não-convexa e requer o uso de métodos de otimização estocásticos. Dentre eles, tem-se o algoritmo de recozimento simulado (*Simulated Annealing*), que é baseado em três pilares: i) distribuição de visitação no espaço de soluções; ii) critério de aceitação; e iii) controle da estocasticidade do processo. Aqui, propomos uma nova generalização do algoritmo de recozimento simulado e da função de regularização. No algoritmo de otimização, generalizamos o cronograma de resfriamento, que usualmente são considerados algébricos ou logarítmicos, e o critério de Metropolis. Com relação à função de regularização, unificamos as versões mais utilizadas, em uma única fórmula. O parâmetro de controle dessa generalização permite transitar continuamente entre as regularizações de Tikhonov e entrópica. Por meio de experimentos numéricos, aplicamos nosso algoritmo na resolução de dois importantes problemas inversos na área de Física Médica: a determinação do espectro de um feixe de raios X, a partir de sua curva de atenuação, e a reconstrução da imagem na tomografia de impedância elétrica. Os resultados mostram que o algoritmo de otimização proposto é eficiente e apresenta um regime ótimo de parâmetros, relacionados à divergência do segundo momento da distribuição de visitação.

Palavras-chave: 1. Otimização estocástica; 2. Funções generalizadas; 3. Métodos computacionais; 4. Física Médica.

Abstract

MENIN, O. H. **Efficiency in inverse problems: generalization of simulated annealing algorithm and regularization function applied to electrical impedance tomography and X-rays spectrum.** 2014. 84 f. Thesis (Ph.D. - Postgraduate program in Physics Applied to Medicine and Biology) - Faculty of Philosophy, Sciences and Letters, University of São Paulo, Ribeirão Preto, 2014.

Modeling of processes in Physics and Engineering frequently yields inverse problems. These problems are normally difficult to be solved since they are classified as ill-posed. Solving them as optimization problems require the minimization of an objective function which measures the difference between experimental and theoretical data, added to a regularization function. For most of practical inverse problems, this objective function is non-convex and needs a stochastic optimization method. Among them, we have Simulated Annealing algorithm, which is based on three fundamentals: i) visitation distribution in the search space; ii) acceptance criterium; and iii) control of process stochasticity. Here, we propose a new generalization of simulated annealing algorithm and of the regularization function. On the optimization algorithm, we have generalized both the cooling schedule, which usually is algebraic or logarithmic, and the Metropolis acceptance criterium. Regarding to regularization function, we have unified the most used versions in an unique equation. The generalization control parameter allows exchange continuously between the Tikhonov and entropic regularization. Through numerical experiments, we applied our algorithm to solve two important inverse problems in Medical Physics: determination of a beam X-rays spectrum from its attenuation curve and the image reconstruction of electrical impedance tomography. Results show that the proposed algorithm is efficient and presents an optimal arrangement of parameters, associated to the divergence of the visitation distribution.

Key-words: 1. Stochastic optimization; 2. Generalized functions; 3. Computational methods; 4. Medical Physics.

Lista de Figuras

- 2.1 Imagem através de raios X. (a) A imagem sobre a chapa radiográfica pode ser vista como a “sombra” projetada pelos tecidos mais atenuadores de raios X (ossos) em contraste com os tecidos menos atenuadores (tecidos moles). (b) Primeira imagem radiográfica da história, produzida por Röntgen, da mão esquerda de sua esposa, Anna Bertha Ludwig. 7
- 2.2 A dificuldade em determinar a forma de um objeto iluminado a partir de sua sombra. (a) Esquema bidimensional mostrando que dois objetos iluminados diferentes podem projetar sombras iguais em um anteparo. (b) Técnica da tomografia computadorizada na qual a imagem de uma seção do corpo de um paciente é reconstruída a partir de diversas projeções desta seção em diferentes planos. 9
- 2.3 Esquemas de um problema *direto/inverso*. (a) Problema direto: deve-se determinar a saída y conhecendo-se os dados de entrada x e o processo $\varphi(\cdot)$. Dois tipos de problemas inversos: (b) deve-se determinar os dados de entrada x conhecendo-se o dado de saída y e o processo $\varphi(\cdot)$ e (c) deve-se determinar qual é o processo $\varphi(\cdot)$ conhecendo-se os dados de entrada x e saída y 14
- 3.1 Exemplos unidimensionais de uma função (a) convexa, que possui um único ponto de mínimo, e uma função (b) não-convexa, que possui mais de um ponto de mínimo. Em uma função convexa, todos os pontos do gráfico $f(x)$ entre dois pontos quaisquer $(x_1, f(x_1))$ e $(x_2, f(x_2))$ estão abaixo da linha reta que liga esses pontos, o que não ocorre com a função não-convexa. 32

3.2	Buscas pelo mínimo da função objetivo $f(x)$, através do espaço de soluções realizadas por um método (a) determinístico e (b) estocástico. No método determinístico, há convergência prematura para um mínimo local. No algoritmo estocástico, por sua vez, a aleatoriedade na geração das soluções e a possibilidade de aceitar eventuais aumentos na função objetivo torna-o capaz de poder escapar dos mínimos locais e convergir para o mínimo global.	34
3.3	Critério de Metropolis: probabilidade $p(\Delta f, T)$ de aceitar soluções que geram aumento na função objetivo $f(\mathbf{x})$ em função da diferença $\Delta f = f(\mathbf{x}_{\text{new}}) - f(\mathbf{x}_{\text{old}})$ e da temperatura T	41
3.4	Comportamento, para $\tilde{q}_v = 0$, $\tilde{q}_v = 2/3$, $\tilde{q}_v = 1$ e $\tilde{q}_v = 4/3$, da (a) distribuição de visitação gaussiana generalizada, $G_{\tilde{q}_v}(x)$, em função de x (Eq. 3.28), e (b) da temperatura de visitação T_v , em função da iteração t , considerando a cronograma de resfriamento generalizado (Eq. 3.31).	52
3.5	Funções objetivos de referência (a) $f_1(x) = x^4 - 16x^2 + 5x$, e $f_3(\mathbf{x}) = 4189.829n - \sum_{i=1}^n \sin\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{ x_i }\right) + 100 \sum_{i=1}^n \sin\left(\frac{\pi}{10}x_i\right)$, com $n = 1$	56
3.6	Resultados para a função objetivo $f_1(x)$: superfícies representando o valor médio da função objetivo $\langle f(x) \rangle$ (à esquerda) e o numero relativo de acertos (%) na bacia de mínimo global (à direita), considerando o resfriamento da temperatura de aceitação (a) $\tilde{q}_a$ -logarítmico (Eq. 3.30) e (b) geométrico (Eq. 3.10).	58
3.7	Resultados para a função objetivo $f_2(\mathbf{x})$: superfícies representando o valor médio da função objetivo $\langle f(x) \rangle$ (à esquerda) e o numero relativo de acertos (%) na bacia de mínimo global (à direita), considerando o resfriamento da temperatura de aceitação (a) $\tilde{q}_a$ -logarítmico (Eq. 3.30) e (b) geométrico (Eq. 3.10).	59
3.8	Resultados para a função objetivo $f_2(\mathbf{x})$: superfícies representando o valor médio da função objetivo $\langle f(x) \rangle$ (à esquerda) e o numero relativo de acertos (%) na bacia de mínimo global (à direita), considerando o resfriamento da temperatura de aceitação (a) $\tilde{q}_a$ -logarítmico (Eq. 3.30) e (b) geométrico (Eq. 3.10).	60

- 3.9 Comportamento da taxa de sucesso, considerando o resfriamento geométrico da temperatura, para a função objetivo $f_3(\mathbf{x})$, com $\tilde{q}_r = 0$, $\tilde{q}_r = 0.4$, $\tilde{q}_r = 0.8$ e $\tilde{q}_r = 1.2$. É evidente a melhora no desempenho do algoritmo para $\tilde{q}_v > 0.8$, reforçando a tese de que o regime ótimo ocorre quando o segundo momento da distribuição $\tilde{q}_v$ -gaussiana (Eq. 3.28) diverge. 61
- 3.10 Resfriamento $\tilde{q}_a$ -logarítmico da temperatura de aceitação: evolução da função objetivo $f_1(x)$ (à esquerda) e da variável x (à direita) com a iteração t para algumas combinações dos parâmetros $\tilde{q}_a$ e $\tilde{q}_v$: (a) $\tilde{q}_a = 0$ e $\tilde{q}_v = 0$; (b) $\tilde{q}_a = 1.0$ e $\tilde{q}_v = 0$; e (c) $\tilde{q}_a = 1.8$ e $\tilde{q}_v = 0$ 62
- 3.11 Resfriamento geométrico da temperatura de aceitação: evolução da função objetivo $f_1(x)$ (à esquerda) e da variável x (à direita) com a iteração t para algumas combinações dos parâmetros $\tilde{q}_a$ e $\tilde{q}_v$: (a) $\tilde{q}_a = 0$ e $\tilde{q}_v = 0$; (b) $\tilde{q}_a = 0$ e $\tilde{q}_v = 1.0$; e (c) $\tilde{q}_a = 0$ e $\tilde{q}_v = 1.8$ 63
- 4.1 (a) Esquema da emissão de um feixe de raios X através de um tubo de raios catódicos: os elétrons são liberados pelo cátodo e acelerados por uma fonte de tensão até atingir o ânodo de tungstênio, emitindo raios X. (b) Forma típica do espectro de um feixe raios X: a fluência $\Phi(E)$ mede a quantidade de fótons em cada intervalo de energia entre E e $E + dE$ do espectro. 67
- 4.2 Atenuação de um feixe poli-energético de raios X ao atravessar n placas atenuadoras com espessuras $t_1, t_2, \dots, t_n$ e densidades $\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_n$. A relação entre as distribuições de fluência energética incidente $\Phi(E)$ e atenuada $\Phi'(E)$ é dada pela Eq. (4.2). 69
- 4.3 Esquema do problema direto/inverso da reconstrução do espectro de um feixe de raios X: (a) o problema direto corresponde à determinação da atenuação $\mathbf{T}$ conhecendo-se o espectro de distribuição de fluência Φ e (b) o problema inverso consiste em reconstruir o espectro de fluência Φ , a partir de $\mathbf{T}$ 71

4.4	Distribuição de fluência normalizada $\Phi/\Phi_{\max}$ e a correspondente curva de transmissão relativa S_n para os espectros de referência indicados na Tab. 4.2.	76
4.5	Superfície (esquerda) e projeção no plano $\lambda \times \tilde{q}_v$ (direita) do erro absoluto médio ε em função de $\tilde{q}_v$ e λ para os espectros de referência (a) 1, (b) 2 e (c) 3. O erro decresce significativamente para $\lambda > 10^{-2}$ e $\tilde{q} > 0.6$	79
4.6	Distribuição de fluência real (linha sólida) e resultado numérico ($\circ$) para os espectros de referência (a) 1, (b) 2 and (c) 3. Do lado esquerdo, estão os resultados obtidos pelo SAC ($\tilde{q}_v = 0$) e sem regularização ($\lambda \approx 0$). Já do lado direito, os gráficos mostram os ajustes obtidos com o $\tilde{q}$ -SA ($\tilde{q}_v = 0.6$) combinado com nossa função de regularização ($\lambda = 10^{-1}$).	80
5.1	Esquema da tomografia de impedância elétrica (TIE): uma fonte aplica perfil de potencial/corrente (estímulo) no corpo do paciente, através de um cinto de eletrodos posicionados ao se redor. A resposta resultante (corrente/potencial) é medida e enviada a um computador que reconstrói a imagem do interior do corpo.	83
5.2	Diferença entre os campos de sensoriamento da tomografia computadorizada (TC) e da tomografia de impedância elétrica (TIE). No caso da TC (<i>hard field</i>), as trajetórias dos raios-X não se deformam significativamente quando atravessam o corpo e na TIE (<i>soft field</i>), as linhas de campo elétrico são fortemente influenciadas pelos materiais internos do corpo.	85
5.3	Formas básicas de excitação/resposta na TIE: (a) aplica-se um potencial elétrico $\bar{\phi}$ e mede-se o fluxo de corrente $\bar{J}$ (mapa Dirichlet - Neumann) e (b) aplica-se uma corrente elétrica $\bar{J}$ e mede-se o potencial elétrico $\bar{\phi}$ (mapa Neumann-Dirichlet).	86

- 5.4 Duas abordagens diferentes para o domínio da TIE: (a) adota-se como contorno $\partial\Omega$ do domínio apenas o contorno externo $\partial\Omega_{\text{ext}}$ e considera-se que a condutividade σ varia de ponto para ponto dentro do domínio; (b) considera-se o domínio com condutividade constante ($\sigma = 1$), mas contendo algumas regiões não condutoras ($\sigma = 0$), e adota-se como contorno $\partial\Omega$ do problema tanto o contorno externo $\partial\Omega_{\text{ext}}$ como o contorno interno $\partial\Omega_{\text{int}}$, ou seja, $\partial\Omega = \partial\Omega_{\text{ext}} \cup \partial\Omega_{\text{int}}$ 88
- 5.5 Esquema do processo iterativo de reconstrução da imagem da TIE: a cada iteração, gera-se uma solução candidata σ_{trial} e resolve-se o *problema direto* (Eqs. 5.3 e 5.4), obtendo-se um fluxo corrente elétrica numérico $\mathbf{J}_{\text{num}}$. Este é confrontado com os dados experimentais $\mathbf{J}_{\text{actual}}$ através da função objetivo (Eq. 5.14). A distribuição de condutividade numérica σ_{trial} que produzir o mínimo global da função objetivo é interpretada como a imagem procurada. 91
- 5.6 Esquema do exemplo numérico: fio condutor cilíndrico de comprimento 10.0 e diâmetro 1.0 (unidades arbitrárias) com uma região não condutora esférica de raio 0.3 localizada a 7.0 unidades da extremidade a 95
- 5.7 Superfície da função objetivo $f(x_p, R_p)$, em função das variáveis x_p e R_p , em escala (a) linear e (b) logarítmica. Nota-se que a superfície apresenta regiões planas e um estreito canal contendo o mínimo global. 97
- 5.8 Evolução dos valores (a) do raio R_p , (b) da coordenada x_p e (c) da função objetivo, durante a melhor execução do Teste 2.c. Os valores da função objetivo $f(x)$, da coordenada x_p e do raio R_p oscilam bastante no início do processo, mas convergem para $f(x) \approx 10^{-17}$, $x_p \approx 0.7$ e $R_p \approx 0.3$ quando $t > 1400$ 99
- 5.9 (a) Domínio condutor circular, de raio unitário, centrado na origem do sistema cartesiano $x \times y$, contendo uma inclusão não condutora circular, de raio 0.2 e centro na posição (0.2, 0.3). (b) Potencial elétrico aplicado e fluxo de corrente medidos em 32 elementos do contorno externo, considerando perfil de excitação senoidal. 100

- 5.10 (a) Valores de $\langle E \rangle$, dado pela Eq. (5.26) e (b) taxa de sucesso, considerando diferentes valores de $\tilde{q}_a$ e $\tilde{q}_v$. Para os três valores de $\tilde{q}_a$, o valor de $\langle E \rangle$ diminui e a taxa de sucesso aumenta consideravelmente para $\tilde{q}_v > 0.8$ 101
- 5.11 Domínios condutores circulares, de raios unitários, centrados na origem do sistema cartesiano $x \times y$ (esquerda), e os perfis excitação/resposta nos 32 elementos do contorno externo (direita), considerando (a) três inclusões internas circulares e (b) uma inclusão interna com a forma de “feijão”. 103
- 5.12 Comportamento da função objetivo $f(\sigma_{\text{trial}})$ com a iteração t e o domínio com três inclusões circulares não condutoras reais (espaços vazios) e as soluções obtidas pelo algoritmo (linha tracejada), considerando $\tilde{q}_a = 0$, com resfriamento geométrico da temperatura de aceitação e (a) $\tilde{q}_v = 0$, (b) $\tilde{q}_v = 0.7$ e (c) $\tilde{q}_v = 1.0$ 105
- 5.13 Comportamento da função objetivo $f(\sigma_{\text{trial}})$ com a iteração t e o domínio com a inclusão não condutora real (espaço vazio) e as soluções obtidas pelo algoritmo (linha tracejada), considerando $\tilde{q}_a = 0$, com resfriamento geométrico da temperatura de aceitação e (a) $\tilde{q}_v = 0$, (b) $\tilde{q}_v = 0.7$ e (c) $\tilde{q}_v = 1.0$ 106
- A.1 (a) Definição da função $\ln(x)$ como sendo a área sob a curva $f(t) = 1/t$, entre $t = 1$ e $t = x$ e (b) o comportamento da função $\ln(x)$ crescendo monotonicamente com x 110
- A.2 Comportamento da função $f_{\tilde{q}}(t) = 1/t^{1-\tilde{q}}$. Para $\tilde{q} = 0$ e $\tilde{q} = 1/2$ temos, respectivamente, a hipérbole equilátera $f_0 = 1/t$ e a hipérbole assimétrica $f_{1/2} = 1/\sqrt{t}$. Com $\tilde{q} = 1$ e $\tilde{q} = 3/2$, obtemos as funções $f_1(t) = 1$ e $f_{3/2} = \sqrt{t}$. Já $\tilde{q} = 2$ fornece a função linear $f_2 = t$, que corresponde à mudança de concavidade das leis de potência. 111
- A.3 Comportamento da função $\ln_{\tilde{q}}(x)$, definida na Eq. (A.3), para $\tilde{q} = 0$, $\tilde{q} = 1/2$, $\tilde{q} = 1$, $\tilde{q} = 3/2$ e $\tilde{q} = 2$ 112
- A.4 Comportamento da função $\exp_{\tilde{q}}(x)$, definida na Eq. (A.9), para $\tilde{q} = 0$, $\tilde{q} = 1/2$, $\tilde{q} = 1$, $\tilde{q} = 3/2$ e $\tilde{q} = 2$ 113

B.5	(a) Função densidade de probabilidade (pdf) conjunta de duas variáveis Z_1 e Z_2 aleatórias independentes com distribuição normal padrão e as curvas de nível desta pdf com vista (b) tridimensional e (c) no plano $Z_1 \times Z_2$	119
B.6	Histogramas de distribuições $\tilde{q}_v$ -gaussiana, geradas pela sub-rotina <code>qgasdev.c</code> , e a curva analítica (linha sólida) da pdf expressa na Eq. (B.39) para (a) $\tilde{q}_v \rightarrow -\infty$, (b) $\tilde{q}_v = -1$, (c) $\tilde{q}_v = 0$, (d) $\tilde{q}_v = 1/3$, (e) $\tilde{q}_v = 2/3$ e $\tilde{q}_v = 5/6$	124
C.7	Representação dos modelos (a) real e (b) numérico. Em ambos, tem-se um domínio condutor quadrado de lado unitário com a quina inferior esquerda localizadas na origem de um sistema cartesiano $x0y$. No modelo real, considera-se uma inclusão não condutora de lado 0.1 centrada no ponto (0.7, 0.3). No modelo numérico, considerou-se uma inclusão prospectiva de lado 0.1, cujo centro ocupou 6561 posições de uma rede regular entre (0.1, 0.1) e (0.9, 0.9).	127
C.8	Potenciais elétricos aplicados no contorno externo (esquerda) e superfície de erro (direita) dos padrões de excitação (a) Dirac, (b) triangular e (c) senoidal.	128

Lista de Tabelas

2.1	Formas compactas da função de regularização generalizada dada pela Eq. (2.27), para alguns valores de $\tilde{q}_v$	26
4.1	Coeficiente de atenuação de raios X para alguns tecidos biológicos. . .	69
4.2	Espectros de raios X de referência com seus limites inferior e superior de energia e o número de faixas de energia.	75
5.1	Valores mínimo, máximo, médio e desvio padrão da coordenada x_p do centro e do raio R_p da inclusão prospectiva para as três partes do Teste 2, considerando 50 execuções.	98

Sumário

Lista de Figuras	xv
Lista de Tabelas	xxiii
1 Introdução	1
2 Problemas inversos e função de regularização generalizada	5
2.1 Da caverna de Platão à tomografia computadorizada	5
2.2 Problema direto $\times$ problema inverso	8
2.3 Modelagem de um problema inverso e os critérios de Hadamard . . .	11
2.4 A equação integral de Fredholm e a regularização da solução	15
2.5 Função de regularização generalizada	20
2.6 Conclusão	26
3 Otimização e algoritmo de recozimento simulado generalizado	29
3.1 A formulação de um problema de otimização	30
3.2 Otimização determinística $\times$ otimização estocástica	32
3.3 Método Monte Carlo e critério de Metropolis	36
3.4 O surgimento do algoritmo de recozimento simulado	38
3.5 A distribuição de visitação e o cronograma de resfriamento	42
3.6 Algoritmo de recozimento simulado generalizado	45
3.7 Nova generalização do algoritmo de recozimento simulado	48
3.8 Desempenho do algoritmo proposto	54
3.9 Conclusão	58

4	Reconstruindo o espectro de um feixe de raios X	65
4.1	Raios X e espectro de fluência	66
4.2	O problema inverso da reconstrução do espectro de raios X	68
4.3	Algoritmo de otimização e função objetivo	70
4.4	Experiências numéricas	75
4.5	Conclusão	77
5	Problema inverso da tomografia de impedância elétrica	81
5.1	Apresentação da TIE	82
5.2	Formulação do problema inverso da TIE	85
5.3	Algoritmo de recozimento simulado para a TIE	90
5.4	Experiências numéricas	94
5.4.1	Detecção de defeito em um fio condutor unidimensional	94
5.4.2	Desempenho do algoritmo em função do parâmetro $\tilde{q}_v$	99
5.4.3	Ajuste da solução numérica com o domínio real	102
5.5	Conclusão	104
6	Conclusões	107
	Apêndice A - Funções logaritmo e exponencial generalizadas	109
A.1	Função logaritmo generalizada	109
A.2	Função exponencial generalizada	112
A.3	Generalização dos operadores algébricos	114
	Apêndice B - Método Box-Müller generalizado	117
B.1	Geração da distribuição gaussiana clássica	117
B.2	Generalização do método Box-Müller	119
B.3	Implementação e avaliação do método Box-Müller	121
	Apêndice C - Padrões de excitação na tomografia de impedância elétrica	125
C.1	Os principais padrões de excitação	125
C.2	Geração das superfícies de erro e resultados	126

Referências

131

Introdução

Compreender as leis fundamentais que regem o Universo é o maior de todos os problemas inversos. Desde que tornou-se consciente de sua existência e começou a desenvolver os conceitos de causa/efeito, o homem procurou ter algum entendimento sobre o mundo que o cerca. Curiosos e muitas vezes temerosos com os mais variados e espetaculares fenômenos naturais, buscamos algum sentido que nos conforte e nos faça acreditar que existe alguma ordem em toda essa complexidade. No entanto, por meio de nossos limitados sentidos, estamos condenados a observar apenas uma pequena fração dos “efeitos” desse espetáculo e, apesar de nossos incansáveis esforços, ainda buscamos compreender as “causas”.

É nesse ponto que se destaca o papel fundamental da metodologia científica, que estabelece regras para a construção do conhecimento objetivo. A despeito dessas regras ainda proporcionarem calorosas discussões entre intelectuais da ciência e da filosofia, em geral elas buscam selecionar, entre os diferentes modelos que concorrem para descrever determinado fenômeno, aquele que mais se ajusta às observações e que seja o mais simples possível. Em suma, o método científico procura garantir que os modelos e teorias que descrevem o Universo sejam *otimizados*, descartando tudo aquilo que não for relevante.

A modelagem de processos na física e engenharia frequentemente resulta em problemas inversos. Resolvê-los, no entanto, pode ser uma tarefa difícil, visto que eles são classificados como mal-postos. Considere um processo $y = \wp(x)$ que, ao receber uma informação de entrada x , fornece como saída a resposta y . O *problema direto* consiste na determinação da saída y , conhecendo-se o dado de entrada x

e do processo $\wp(\cdot)$. Já o *problema inverso* pode ser definido de duas formas: i) considerando que conhecemos os dados de saída y e o processo $\wp(\cdot)$, desejamos determinar a informação de entrada x e ii) conhecendo tanto a entrada x e a saída y , desejamos determinar qual é o processo $\wp(\cdot)$. Essa inversão gera as dificuldades típicas dos problemas inversos, como a não unicidade e a instabilidade da solução.

A resolução de um problema inverso, tratado com um problema de otimização, requer a minimização de uma função objetivo, que é composta por duas partes: um termo de erro, que mede a discrepância entre os dados observados e os obtidos pelo modelo teórico; e uma função de regularização, que utiliza informações *a priori* do problema para penalizar soluções que divergem excessivamente de uma estimativa inicial ou sem significado físico. Em geral, a função objetivo é não convexa, reque-rendo o uso de métodos de otimização estocásticos, capazes de escapar das bacias de mínimos locais e convergir para o mínimo global. Além disso, a escolha adequada da função de regularização e sua ponderação é fundamental para garantir o melhor compromisso entre o ajuste do modelo aos dados e a regularização da solução.

O objetivo deste estudo é contribuir com a difícil tarefa de resolver problemas inversos, principalmente aqueles relacionados à área de Física Médica. Desenvolvemos uma nova generalização do algoritmo de recozimento simulado (SA)¹ e uma função de regularização, baseados nas funções logaritmo e exponencial generalizadas. O algoritmo SA, proposto inicialmente em meados dos anos 80, é baseado no conceito termodinâmico de minimização da energia e fundamenta-se em três pilares: i) distribuição de visitação no espaço de soluções; ii) critério de aceitação de cada nova solução; e iii) cronograma de resfriamento da temperatura, que controla a estocasticidade do processo. Introduzindo dois parâmetros, $\tilde{q}_a \in \mathbb{R}$ e $\tilde{q}_v \in \mathbb{R}$, generalizamos o critério de aceitação de Metropolis, a distribuição de visitação e o cronograma de resfriamento da temperatura. Diferente das propostas encontradas na literatura, que usualmente baseiam-se em operadores algébricos *ou* logarítmicos, nossa generalização unifica esses dois tipos de operação em uma formulação única e simples.

Também propomos uma função de regularização generalizada, introduzindo um parâmetro $\tilde{q}_r \in \mathbb{R}$. A variação desse parâmetro permite que nossa função tran-

¹ *Simulated Annealing*, em inglês.

site continuamente entre as regularizações entrópica e de Tikhonov, contendo essas como casos particulares quando $\tilde{q}_r = 0$ e $\tilde{q}_r \rightarrow \infty$, respectivamente. A contribuição mais importante da nossa generalização, no entanto, é permitir ponderar o quanto as correlações entre os elementos do vetor solução serão levadas em conta na regularização.

A metodologia adotada para avaliar o algoritmo proposto foi a realização de experiências numéricas, principalmente procurando explorar sua eficiência dentro do espaço de parâmetros. Inicialmente, escolhemos três funções objetivos analíticas para serem minimizadas, uma unidimensional e as outras multidimensionais, todas contendo múltiplos pontos de mínimo (não-convexas). Nestas primeiras experiências, obtivemos resultados que validam a eficiência do algoritmo proposto e indicam fortemente a existência de um regime ótimo de parâmetros, relacionado à divergência do segundo momento da distribuição de visitação.

Em seguida, tratamos de dois importantes problemas inversos na área de Física Médica. O primeiro consiste na determinação da distribuição de fluência de um feixe de raios X, usando as informações de sua curva de atenuação. Este problema tem fundamental importância prática, visto que a qualidade de uma fonte de raios X pode ser caracterizada pelo espectro de fluência do feixe que ela emite. No entanto, em geral, esse espectro é medido diretamente por meio de técnicas custosas e que exigem mão de obra especializada. O segundo problema refere-se à reconstrução da imagem do interior de um objeto por meio da tomografia de impedância elétrica. Em essência, essa promissora técnica consiste na determinação da distribuição de condutividade interna do objeto por meio da aplicação de um estímulo (potencial/corrente) sobre seu contorno e na medição da resposta (corrente/potencial). A resolução do problema direto da tomografia de impedância elétrica, que consiste em um problema de valor de contorno, foi tema de minha dissertação de mestrado, na qual estudei e implementei o método dos elementos de contorno [1, 2].

Experiências numéricas para resolver os problemas do espectro de raios X e da tomografia de impedância elétrica foram realizadas e, novamente, os resultados confirmam a eficiência do algoritmo e reforçam existência do regime ótimo de parâmetros. Destacamos que, os estudos sobre a tomografia de impedância elétrica contaram com a colaboração da Profa. Dra. Vanessa Rolnik e foram publicados no

International Journal of Modern Physics C [3], na Revista Brasileira de Ensino de Física [4] e apresentados no XIII *Latin American Workshop on Nonlinear Phenomena*, em 2013, na Argentina [5]. Já os trabalhos sobre o espectro de raios X foi proposto e contou com a colaboração do Prof. Dr. Alessandro Martins da Costa, que apresentou os resultados no XVIII Congresso Brasileiro de Física Médica, em 2013, sediado na cidade de São Pedro, Brasil, e no *9th International Topical Meeting on Industrial Radiation and Radioisotope Measurement Applications*, realizado em 2014, na cidade de Valência, Espanha [6].

A tese está organizada da seguinte forma: no Cap. 2, apresentamos uma revisão sobre problemas inversos, destacando suas dificuldades inerentes, como a não unicidade da solução e sua instabilidade em relação aos dados de entrada. Em seguida, discutimos como restringir o espaço de soluções através da regularização da solução e apresentamos as funções de regularização de Tikhonov e entrópica. Finalizamos o capítulo apresentando nossa proposta de função de regularização generalizada, que contém as duas anteriores como casos particulares. No Cap. 3, revisamos os conceitos básicos sobre problemas de otimização e discutimos alguns métodos para resolvê-los, contrapondo os métodos determinísticos e estocásticos. Em seguida, destacamos o algoritmo de recozimento simulado e suas principais generalizações presentes na literatura. Finalizamos apresentando nossa generalização do algoritmo de recozimento simulado e mostrando experiências numéricas para validá-lo. Nos Caps. 4 e 5, aplicamos nosso algoritmo na resolução dos problemas inversos da determinação do espectro de raios X e da tomografia de impedância elétrica, respectivamente. Por meio de simulações numéricas, mostramos que o algoritmo é eficiente na resolução desses dois problemas, apesar de terem formulações bastante diferentes. Finalizamos no Cap. 6 apresentando as discussões e conclusões.

Problemas inversos e função de regularização generalizada

Crianças lidam frequentemente com problemas inversos quando são desafiadas com as clássicas brincadeiras do tipo “O que é, o que é?”. Mesmo que não tenham consciência disso, esse tipo de charada está no cerne de muitos dos mais difíceis e importantes problemas enfrentados pelas mais diversas áreas da ciência, tais como a matemática, a física, a engenharia, entre outras.

Apresentamos neste capítulo uma breve revisão sobre problemas inversos e suas principais dificuldades. Discutimos o conceito de regularização, destacando a regularização de Tikhonov e a regularização entrópica. Finalmente, propomos uma alternativa à regularização unificada de Velho *et al.* [7] usando a função logaritmo generalizada. Introduzindo um parâmetro $\tilde{q}_r \in \mathbb{R}$, mostramos que nossa função transita continuamente entre as regularizações entrópica e de Tikhonov, contendo estas como casos particulares para $\tilde{q}_r = 0$ e $\tilde{q}_r \rightarrow \infty$, respectivamente. A ideia por trás dessa generalização é permitir, por meio do parâmetro $\tilde{q}_r$, dosar o quanto a regularização levará em conta as possíveis correlações entre os elementos do vetor solução.

2.1 Da caverna de Platão à tomografia computadorizada

Imagina homens numa morada subterrânea, em forma de caverna, com uma entrada aberta à luz; esses homens estão aí desde a infância, de

pernas e pescoço acorrentados, de modo que não podem mexer-se nem ver senão o que está diante deles, pois as correntes os impedem de voltar a cabeça; a luz chega-lhes de uma fogueira acesa numa colina que se ergue por detrás deles. [8]

Um dos mais antigos problemas inversos encontrados na literatura aparece na clássica alegoria de Platão, conhecida como *Mito das Cavernas*, publicada em seu célebre livro, *A República*. Metaforizando a condição limitada do conhecimento humano, Platão imagina seres humanos que vivem presos em uma caverna e que nunca tiveram contato com o mundo exterior. Limitados a observar apenas uma parede na qual são projetadas as sombras dos objetos externos à caverna, os prisioneiros acabam por ter uma visão incompleta e distorcida da realidade [9]. Apesar de ter sido apresentado apenas como um argumento filosófico, o problema enfrentado pelos prisioneiros da caverna de Platão tem aplicações práticas fundamentais no mundo atual.

O físico alemão W. C. Röntgen foi o primeiro ganhador do Prêmio Nobel da história, em 1901. Trabalhando com os tubos de raios catódicos, tão amplamente utilizado em pesquisas básicas no final do Século XIX, Röntgen detectou, em 1895, um novo tipo de radiação, que tinha grande poder de penetração, a qual denominou de raios X [10]. Desde então, os raios X têm sido amplamente utilizados na geração de imagens internas de objetos, principalmente na medicina diagnóstica.

A radiografia simples da mão de uma pessoa pode ser encarada como a versão atual do problema enfrentado pelos desafortunados prisioneiros da gruta platônica. De fato, sabemos que os diferentes tecidos biológicos apresentam diferentes comportamentos quando são atravessados por raios X. Enquanto músculos e gorduras permitem que raios X os atravessem com facilidade, os ossos são praticamente opacos a esse tipo de radiação. Essa diferença de transparência/opacidade dos materiais aos raios X é caracterizada pelo coeficiente de atenuação μ , que será discutido no Cap. 4.

Com isso, a imagem em uma chapa radiográfica é produzida pelo contraste entre as regiões que recebem intensidades diferentes de raios X, após estes atravessarem os diferentes tecidos biológicos que constituem o corpo do paciente. Em outras palavras, uma imagem radiográfica pode ser vista como a “sombra” das partes

mais atenuadoras de raios X (ossos) do interior do corpo projetadas na chapa, como mostra a Fig. (2.1).

Figura 2.1 – Imagem através de raios X. (a) A imagem sobre a chapa radiográfica pode ser vista como a “sombra” projetada pelos tecidos mais atenuadores de raios X (ossos) em contraste com os tecidos menos atenuadores (tecidos moles). (b) Primeira imagem radiográfica da história, produzida por Röntgen, da mão esquerda de sua esposa, Anna Bertha Ludwig.

Não é difícil notar que, somente uma simples projeção bidimensional da “sombra” da mão sobre a chapa não permite determinar de forma unívoca sua forma tridimensional, tornando a imagem radiográfica incompleta e distorcida, como a “realidade” percebida pelos habitantes da caverna de Platão. Vamos, então, tratar desse problema com mais cautela, para podermos compreender o significado de um problema inverso e suas dificuldades inerentes.

Dada uma fonte de luz (ou raios X) fixa e um objeto qualquer tridimensional, a sombra projetada por ele num dado plano é unívoca, ou seja, neste plano só existe uma forma possível para a sombra deste objeto. De fato, pode-se até utilizar as leis da óptica geométrica e algumas poucas ferramentas matemáticas para prever de maneira inequívoca a forma da sombra do objeto no plano considerado. Por sua vez, o grande desafio da alegoria de Platão surge porque o *inverso* não é verdadeiro! Não há leis físicas ou ferramentas matemáticas que permitam determinar uma única forma para um objeto tridimensional usando apenas as informações de sua sombra

projetada em um único plano. De fato, pode-se encontrar diferentes objetos que produzem sombras idênticas, como mostra a Fig. (2.2-a), condenando definitivamente os “espeleólogos” platônicos a um conhecimento limitado da realidade externa à caverna.

No entanto, os protagonistas de Platão ficariam surpresos se pudessem viajar no tempo para os dias de hoje. Passados dois milênios após Platão escrever *A República*, o problema de reconstruir a forma de um objeto a partir da projeção de sua sombra tornou-se tarefa cotidiana nos centros médicos de diagnóstico por imagem. Os estudos publicados por Allen M. Cormack e Godfrey N. Hounsfield na década de 1970 [11, 12] renderam-lhes o Prêmio Nobel de Fisiologia e Medicina de 1979 e possibilitaram, juntamente com o vertiginoso avanço da computação, o desenvolvimento dos modernos tomógrafos computadorizados.

Da mesma forma que na radiografia simples, na Tomografia Computadorizada (TC) o paciente é colocado entre uma fonte de raios X e um arranjo de detectores (equivalente eletrônico da chapa radiográfica), que medem a intensidade da radiação após esta atravessar a seção do corpo a ser imageada. O sistema é então rotacionado em torno do corpo produzindo diversas “sombras” em vários ângulos diferentes. De forma mais rigorosa, o processo permite determinar a atenuação sofrida pelo feixe de raios X em diferentes direções. Os dados obtidos são enviados a um computador munido de um algoritmo que reconstrói o coeficiente de atenuação dos pontos internos da seção do corpo, resultando em uma imagem desta seção, como mostra a Fig. (2.2-b).

2.2 Problema direto $\times$ problema inverso

Segundo Groetsch, definir o que é um problema inverso não é uma tarefa fácil, mesmo que saibamos identificar um quando nos deparamos com ele [13]. Essa dificuldade surge porque um *problema inverso* sempre aparece associado ao seu correspondente *problema direto*. Na introdução de seu trabalho de 1976, J. B. Keller destaca a arbitrariedade dessa classificação:

We call two problems inverses of one another if the formulation of each involves all or part of the solution of the other. Often, for historical rea-

Figura 2.2 – A dificuldade em determinar a forma de um objeto iluminado a partir de sua sombra. (a) Esquema bidimensional mostrando que dois objetos iluminados diferentes podem projetar sombras iguais em um anteparo. (b) Técnica da tomografia computadorizada na qual a imagem de uma seção do corpo de um paciente é reconstruída a partir de diversas projeções desta seção em diferentes planos.

sons, one of the two problems has been studied extensively for some time, while the other is newer and not so well understood. In such cases, the former is called the direct problem, while the latter is called the inverse problem. [14].

Em seguida, Keller ilustra com os seguinte exemplos:

1. *What is the question to which the answer is "Washington Irving"?*;
2. *What is the question to which the answer is "Nine W"?*;

3. *What is the question to which the answer is "Chicken Sukiyaki"?*;

cujas soluções são divulgadas apenas no Apêndice, no final do trabalho ¹.

Especificamente na matemática, um problema típico se resume em obter uma solução desconhecida a partir de uma determinada informação conhecida. Portanto, classificá-lo como problema direto ou inverso pode depender simplesmente do que deve ser considerado como dado de entrada e o que deve ser considerado como dado de saída. Considere, por exemplo, a operação de multiplicação ($\times$) de dois números x_1 e x_2 , resultando em um único número y , ou seja, $y = x_1 \times x_2$. Neste caso, podemos definir como problema direto a determinação de y a partir do conhecimento dos valores x_1 e x_2 . Por exemplo, para os dados de entrada $x_1 = 4$ e $x_2 = 5$, a solução do problema direto é $y = 20$. Por outro lado, considere que conhecemos o dado de saída y e desejamos determinar os dados de entrada x_1 e x_2 . Devemos, então, determinar dois números que resultem em $y = 20$ ao serem multiplicados. Neste caso, podemos dizer que temos um *problema inverso*.

Apesar de relativamente simples, o exemplo acima ilustra o quanto pode ser arbitrário definir o que é um problema direto e inverso. Matematicamente, não há nada que impeça de invertermos a classificação acima, ou seja, considerar a determinação de x_1 e x_2 a partir de y como *problema direto* e a determinação de y a partir x_1 e x_2 como *problema inverso*. Além disso, podemos notar uma das grandes dificuldades que acompanham os problemas inversos, a não unicidade da solução. De fato, sabemos que não há apenas um par de números que multiplicados resultem no número 20. Portanto, parte da dificuldade no tratamento de problemas inversos relaciona-se à complementação das informações que devem ser fornecidas.

A multiplicação de dois números também revela-se de importância prática fundamental. Como se sabe, o processo de criptografia consiste em codificar uma informação de forma que ela possa ser transmitida em segurança até o destinatário. Para isso, é necessário que se defina um processo de cifragem, combinado com uma chave de segurança, que é utilizado para a codificação da mensagem pelo remetente. Esse processo consiste basicamente em tornar o conteúdo da mensagem ininteligível até que ela chegue ao destinatário. Este, por sua vez, ao recebê-la, deve ser capaz

¹1. *What is the capital of the United States, Max?*, 2. *Do you spell your name with a "V", Herr Wagner?* e 3. *What is the name of the sole surviving Kamikaze pilot?* [14]

de reverter a codificação, ou seja, tornar seu conteúdo novamente legível. Portanto, não é difícil notar que o processo de codificação/decodificação de uma mensagem pode ser visto, matematicamente, como um problema *direto/inverso*.

Durante muito tempo o processo de codificação foi realizado adotando-se uma mesma chave de segurança, tanto para a codificação quanto para a decodificação, chamada de *chave simétrica*. No entanto, há um problema de segurança neste tipo de codificação, pois a mesma chave de cifragem deve ser conhecida tanto pelo remetente, que irá codificar a mensagem, quanto pelo destinatário, que irá decodificá-la. Isso faz com que a própria chave de segurança tenha que ser transmitida entre remetente e destinatário, correndo o risco de ser interceptada.

Para evitar esse problema, desenvolveu-se o conceito de *chave assimétrica*, que usa chaves diferentes para a codificação e decodificação. Em uma de suas versões mais simples, o processo de codificação assimétrica utiliza como chave de cifragem um único número N , dado pelo produto de n números primos $q_1, q_2, \dots, q_n$. O processo deve ser tal que para codificar uma mensagem, seja necessário conhecer somente o número N , enquanto que para decodificá-la, deve-se conhecer os fatores primos $q_1, q_2, \dots, q_n$. Desta maneira, a chave de codificação N pode ser divulgada publicamente de forma que qualquer um possa utilizá-la para codificar uma informação. Por sua vez, como a fatoração de um número em seus fatores primos é unívoca, somente quem conhece os fatores $q_1, q_2, \dots, q_n$ poderá decodificá-la.

Naturalmente que através de técnicas de criptoanálise, pode-se tentar descobrir quais são os fatores primos $q_1, q_2, \dots, q_n$ que definem uma determinada chave de codificação N . No entanto, se o número N for suficientemente grande, a tarefa de fatorá-lo em seus números primos pode se tornar impraticável [15]. As técnicas de cripto-análise que buscam descobrir os números primos de uma chave assimétrica tratam, neste contexto, de resolver problemas inversos.

2.3 Modelagem de um problema inverso e os critérios de Hadamard

Não é difícil encontrar exemplos de problemas *direto/inverso* nas mais diferentes áreas da ciência [9]. Um clássico vem da geofísica e consiste em estimar a

distribuição de massa (densidade) no interior da Terra. Na verdade, estudos sobre esse problema impulsionaram o desenvolvimento teórico e conceitual dos problemas inversos [16, 17, 18], visto que o objetivo é descrever o interior do nosso planeta a partir de dados disponíveis em sua superfície.

Sem dúvidas, não temos como acessar diretamente a distribuição de massa interna do nosso planeta. Para se ter uma ideia, o maior poço já perfurado pelo homem para acessar o interior da Terra tem pouco mais de 12 km de profundidade, o que deve representar menos do que um pequeno arranhão comparado aos mais de 12 700 km do diâmetro da Terra. Por sua vez, podemos construir um modelo matemático² que, recebendo uma dada distribuição de densidade de massa no interior do planeta (dados de entrada), fornece o campo gravitacional em sua superfície (dados de saída), o que pode ser definido como *problema direto*. Na prática, entretanto, os dados disponíveis para mensuração são os valores da gravidade na superfície do planeta e o que se deseja determinar é a distribuição de densidade em seu interior. Neste caso, temos o *problema inverso*, ou seja, devemos ser capazes de inverter o modelo matemático de forma que ele receba a gravidade superficial como dado de entrada e forneça, como saída, a distribuição de densidade no interior do planeta.

Diferentemente dos problemas puramente matemáticos, nos quais é praticamente arbitrário definir o que é um *problema direto* e o que é um *problema inverso*, nos problemas baseados em processos físicos, essa arbitrariedade é menos evidente. Uma das principais razões para isso é que os processos físicos carregam consigo os conceitos de *causa/efeito*. No exemplo da geofísica exposto acima, podemos claramente reconhecer a distribuição de massa no interior do planeta como a *causa* e a gravidade em sua superfície como o *efeito*.

Desta forma, Oleg M. Alifanov, em seu livro *Inverse Heat Transfer Problems* [19], associa o problema direto ao processo *causa* $\rightarrow$ *efeito*, ou seja, determinar os efeitos a partir do conhecimento das causas, e o problema inverso à reversão *efeito* $\rightarrow$ *causa* deste processo, ou seja, determinar as causas a partir do conhecimento dos efeitos. Um bom exemplo ilustrativo é a derivação da Lei da Gravitação Universal por Isaac Newton a partir do conhecimento das trajetórias dos planetas descritas por Johannes Kepler. Neste caso, pode-se classificar as forças gravitacionais sobre os

²Modelo baseado na Lei da Gravitação Universal de Newton

planetas como as *causas* e a órbitas dos planetas como os *efeitos*. Newton, portanto, resolveu um problema inverso, ou seja, determinou as *causas* a partir dos *efeitos* [20].

Para generalizar a definição de problema *direto/inverso*, considere um sistema físico qualquer que desejamos descrever através de um modelo matemático. Assumimos que existe um conjunto de parâmetros que, aplicados ao modelo, descrevem completamente o sistema. No entanto, sabemos que, na prática, muitos desses parâmetros não podem ser medidos ou observados diretamente. Seleccionamos, então, alguns parâmetros observáveis cujos valores dependem daqueles que não são mensuráveis. Desta forma, resolver o *problema direto* consiste em prever, a partir do modelo, os valores dos parâmetros observáveis, conhecidos os valores dos não observáveis. Por sua vez, resolver o *problema inverso* significa inferir os valores dos parâmetros não observáveis a partir dos valores medidos para os observáveis [21].

O modelo matemático de um sistema físico corresponde a um processo $y = \wp(x)$ que, ao receber uma informação de entrada x , fornece como saída a resposta y . O *problema direto* consiste na determinação da saída y a partir do conhecimento do dado de entrada x e do processo $\wp(\cdot)$, como mostra a Fig. (2.3-a). A esse problema direto, podemos associar dois tipos diferentes de *problemas inversos*. Primeiramente, podemos considerar que conhecemos o dado de saída y e o processo $\wp(\cdot)$ e desejamos determinar a informação de entrada x , como mostra a Fig. (2.3-b). Segundo, podemos conhecer tanto a entrada x e a saída y e desejamos determinar qual é o processo $\wp(\cdot)$ que transforma x em y , como ilustrado na Fig. (2.3-c).

Essa inversão traz consigo as dificuldades típicas dos problemas inversos, principalmente devido à pobreza intrínseca dos dados observáveis e aos erros nas medidas experimentais. Além disso, na prática ainda devemos lidar com as dificuldades que surgem devido a própria modelagem matemática do problema direto. Quando um modelo matemático é criado para descrever um processo físico, é comum adotar-se determinadas aproximações ou desprezar-se certos efeitos para fim de simplificação. Isso, por sua vez, pode ter consequências desastrosas e imprevisíveis quando se faz a inversão do problema.

Segundo a definição de Hadamard, um problema bem-posto é aquele cuja solução *i)* existe, *ii)* é única e *iii)* depende continuamente dos dados de entrada [22]. Ainda de acordo com Hadamard, um problema mal-posto não possui sentido

Figura 2.3 – Esquemas de um problema *direto/inverso*. (a) Problema direto: deve-se determinar a saída y conhecendo-se os dados de entrada x e o processo $\varphi(\cdot)$. Dois tipos de problemas inversos: (b) deve-se determinar os dados de entrada x conhecendo-se o dado de saída y e o processo $\varphi(\cdot)$ e (c) deve-se determinar qual é o processo $\varphi(\cdot)$ conhecendo-se os dados de entrada x e saída y .

físico, ou seja, segundo ele, somente problemas puramente matemáticos teriam a característica de serem mal-postos. Atualmente, no entanto, sabemos que inúmeros problemas em física e engenharia são modelados como *problemas inversos* e são mal-postos. Mas há também um consenso de que os problemas mal-postos possuem uma “extensão bem-posta”, ou seja, pode-se restringir os efeitos do mau-condicionamento através de regularizações adequadas, que utilizam informações *a priori* sobre o processo a ser descrito [21].

Retomemos ao problema da geofísica de determinar a densidade no interior da Terra. Uma importante contribuição dos trabalhos de Backus e Gilbert [16, 17, 18] foi a introdução do conceito de *funcional bruto*, *funcional total* ou simplesmente *funcional*³, que pode ser visto como uma regra que associa um único número real (escalar) a cada possível modelo (candidato à solução) do problema. Seguindo o trabalho de Pujol [23], podemos ilustrar esse conceito considerando que $\rho(r)$ representa a densidade de uma camada (casca) esférica da Terra compreendida entre r e $r + dr$, onde r é o raio medido a partir do centro do planeta. Neste caso, a massa

³Nos textos originais de Bakus e Gilbert, o termo é definido como *gross Earth functional*.

$M(\rho)$ da Terra pode ser considerada como um funcional do modelo $\rho(r)$ dado por

$$M(\rho) = \int_0^{R_T} \rho(r)G(r)dr, \quad (2.1)$$

onde R_T é o raio da Terra e $G(r) = 4\pi r^2$ é denominado de núcleo operador dos dados ⁴.

Desta forma, a cada modelo $\rho_1(r), \rho_2(r), \dots, \rho_N(r)$ para a densidade da Terra, pode-se associar um valor de funcional $M_1(\rho_1), M_2(\rho_2), \dots, M_N(\rho_N)$. Em outras palavras, pode-se obter diferentes massas $M_1, M_2, \dots, M_N$ para a Terra, dependendo do modelo de distribuição de densidade em seu interior. No entanto, a resolução do problema inverso consiste em determinar qual modelo de densidade fornece o valor real para a massa da Terra. Considerando que a medida real da massa da Terra seja M_T , o problema inverso consiste em encontrar um modelo de densidade $\rho_*(r)$ tal que $\int_0^R \rho_*(r)G(r)dr = M_T$.

2.4 A equação integral de Fredholm e a regularização da solução

Muitos problemas inversos podem ser modelados através de equações que têm a forma da Eq. (2.1) [9]. Esse tipo de equação é denominada de equação integral linear de *Fredholm* do primeiro tipo, cuja forma geral é

$$y(s) = \int_a^b K(s,t)x(t)dt, \quad (2.2)$$

onde $x(t)$ e $y(s)$ são funções que representam os dados de entrada (*input*) e saída (*output*) do sistema, respectivamente, e $K(s,t)$ é a função núcleo, que modela o processo que transforma $x(t)$ em $y(s)$.

Nos pioneiros trabalhos de V. K. Ivanov [24, 25], D. L. Phillips [26] e S. Twomey [27], pode-se encontrar uma extensa discussão sobre existência e estabilidade de soluções para Eq. (2.2), bem como alguns métodos para resolvê-la. Philips, em especial, mostrou que, dependendo da função núcleo $K(s,t)$ e dos possíveis erros nos dados de entrada $y(s)$, não é possível determinar uma solução única para a função $x(t)$, mas somente uma família $\mathcal{X}$ de soluções. Com isso, o segundo critério de

⁴Definido como *data kernel*, no original de Backus e Gilbert.

Hadamard não é satisfeito, caracterizando o intrínseco problema da não unicidade de solução dos problema inversos [26].

Especificamente para processos físicos, essa não unicidade de solução se deve à perda de informação na sequência temporal *causa* $\rightarrow$ *efeito*. O *problema direto* associado um processo físico evolui no sentido natural do tempo, ou seja, no sentido no qual a entropia do sistema aumenta e a quantidade de informação disponível diminui. Já o *problema inverso* se propõe a reverter o fluxo temporal, ou seja, partir de um estado de maior entropia (menos informação) para um de menor entropia (mais informação).

Para lidar com essas dificuldades intrínsecas dos problemas inversos, deve-se utilizar informações *a priori* do sistema e criar funções de regularização adequadas que restrinjam o espaço de soluções. Em termos matemáticos, deve-se selecionar a melhor solução do conjunto $\mathcal{X}$ que satisfaça algum critério pré-definido. Em seu trabalho de 1962, por exemplo, Phillips propõe resolver a Eq. (2.2) considerando que a solução $x_*(t)$ deve ser contínua e suave. Ele apresenta, então, uma proposta para regularizar a solução utilizando suas segundas derivadas, impondo a condição

$$\int_a^b [x''_*(t)]^2 dt = \min_{x \in \mathcal{X}} \int_a^b [x''(t)]^2 dt, \quad (2.3)$$

ponderada por um fator γ que equaliza a magnitude da regularização [26].

Similar à proposta de Phillips, uma das regularizações mais difundidas atualmente na resolução de problemas mal-postos foi proposta pelo matemático russo A. N. Tikhonov [28]. Para descrevê-la, vamos expressar a Eq. (2.2) na forma

$$\mathcal{K}x = y \quad (2.4)$$

onde $\mathcal{K} : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ é um operador que transforma os elementos do espaço de soluções $\mathcal{X}$ em elementos do espaço $\mathcal{Y}$, sendo $x \in \mathcal{X}$ e $y \in \mathcal{Y}$.

Como descrito por J. N. Franklin [29], a proposta de Tikhonov é resolver a Eq. (2.4) através da minimização do funcional $\|\mathcal{K}x - y\|_2^2 + \gamma\Omega(x)$, onde $\|\cdot\|_2$ é norma euclidiana e

$$\Omega(x) = \int_a^b [x(t)^2 + x'(t)^2] dt \quad (2.5)$$

é uma função que regulariza a solução $x(t)$, ponderada pelo parâmetro $\gamma > 0$, e $x'(t)$ é a primeira derivada da solução $x(t)$ em relação a t . Em essência, os termos $x(t)^2$ e $x'(t)^2$ no integrando da Eq. (2.5) penalizam, respectivamente, soluções muito grandes e soluções que não são contínuas e suaves. De acordo com a necessidade, pode-se valorizar uma dessas penalizações em detrimento da outra, ou até mesmo considerar apenas uma delas. Para isso, desmembra-se a função de regularização (2.5) reescrevendo-a na forma

$$\Omega(x) = \gamma_1 \int_a^b x(t)^2 dt + \gamma_2 \int_a^b x'(t)^2 dt, \quad (2.6)$$

sendo γ_1 e γ_2 os pesos dados aos termos $x(t)$ e $x'(t)$, respectivamente.

A despeito de que as funções $x(t)$ e $y(s)$ nas Eqs. (2.2–2.5) sejam contínuas, elas podem ser discretizadas, principalmente quando utiliza-se métodos de resolução numéricos. Particionando-se o intervalo $[a, b]$ por n pontos $a = t_1 < t_2, \dots < t_n = b$, a integral (2.2) pode ser substituída pelo somatório $\sum_{j=1}^n k_{ij} x_j = y_j$, para $i = 1, 2, \dots, n$, onde $k_{ij} = \mathcal{K}(s_i, t_j)$ e $y_j = y(s_i)$. Desta forma, pode-se expressar a Eq. (2.4) na forma matricial

$$\mathbf{K}\mathbf{x} = \mathbf{y}, \quad (2.7)$$

onde $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ é um vetor coluna contendo n incógnitas, $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$ é um vetor coluna contendo os dados conhecidos do problema e $\mathbf{K}$ é a matriz operadora representando o modelo que transforma $\mathbf{x}$ em $\mathbf{y}$. Esse formalismo matricial também pode ser utilizado em problemas nos quais a solução x e os dados conhecidos y já são discretos. Nestes casos, os componentes do vetor $\mathbf{y}$ representam n medidas *reais* obtidas experimentalmente e $\mathbf{K}\mathbf{x}$ contém os valores previstos pelo *modelo matemático* para essas medidas.

Com essa formulação, pode-se resolver a Eq. (2.7) minimizando o funcional

$$f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{K}\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2 + \gamma R(\mathbf{x}), \quad (2.8)$$

onde $R(\mathbf{x})$ é uma função de regularização. Em termos matemáticos, a solução $\mathbf{x}_*$ da

Eq. (2.7) deve satisfazer

$$\mathbf{x}_* = \arg \min f(\mathbf{x}) = \arg \min \{ \|\mathbf{K}\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2 + \gamma R(\mathbf{x}) \}. \quad (2.9)$$

Dependendo das características do problema a ser resolvido, pode-se utilizar diferentes alternativas para regularizar a solução. A escolha adequada para a função de regularização $R(\mathbf{x})$ é fundamental na obtenção de uma solução estável e satisfatória. Essa escolha deve ser realizada cuidadosamente, considerando as informações *a priori* sobre o problema e o que se espera para a solução $\mathbf{x}_*$.

Vimos que na regularização de Tikhonov, dada pela Eq. (2.5), a parcela $x(t)^2$ penaliza soluções muito grandes, enquanto que a parcela $x'(t)^2$ penaliza soluções não suaves. Para um problema discreto (ou discretizado), essas parcelas podem ser escritas, respectivamente, como os quadrados das normas euclidianas $\|\mathbf{x}\|_2^2$ e $\|\mathbf{\Delta}\|_2^2$ do vetor solução, $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$, e do vetor de primeiras diferenças dos elementos do vetor solução, $\mathbf{\Delta} = (\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_{n-1})^T$, onde $\delta_k = x_{k+1} - x_k$, para $k = 1, 2, \dots, n-1$. Com isso, a regularização de Tikhonov é expressa como

$$R_T(\mathbf{x}) = \gamma_1 \sum_{k=1}^n x_k^2 + \gamma_2 \sum_{k=1}^{n-1} \delta_k^2. \quad (2.10)$$

Com a finalidade de comparar sistemas diferentes, propomos normalizar os vetores $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ e $\mathbf{\Delta} = (\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_{n-1})^T$, reescrevendo-os como

$$\tilde{\mathbf{x}} = (\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \dots, \tilde{x}_n)^T, \quad \text{onde} \quad \tilde{x}_i = \frac{|x_i|^2 + \xi}{\sum_{k=1}^n |x_k|^2}, \quad (2.11)$$

$$\tilde{\mathbf{\Delta}} = (\tilde{\delta}_1, \tilde{\delta}_2, \dots, \tilde{\delta}_n)^T, \quad \text{onde} \quad \tilde{\delta}_j = \frac{|x_{j+1} - x_j|^2 + \xi}{\sum_{k=1}^{n-1} |x_{k+1} - x_k|^2}, \quad (2.12)$$

sendo $i = 1, 2, \dots, n$ e $j = 1, 2, \dots, n-1$, onde $\xi > 0$ é uma pequena translação que garante $\tilde{x}_i > 0$ e $\tilde{\delta}_j > 0$.⁵ Com essas normalizações (Eqs. 2.11 e 2.12), podemos reescrever a regularização de Tikhonov como

$$R_\infty(\mathbf{x}) = \lambda_1 \sum_{k=1}^n \tilde{x}_k + \lambda_2 \sum_{k=1}^{n-1} \tilde{\delta}_k, \quad (2.13)$$

⁵Como veremos adiante, essa translação será importante na Eq. (2.27).

com novos parâmetros de ponderação λ_1 e λ_2 .⁶

Finalizando essa revisão sobre funções de regularização, apresentamos a *regularização entrópica*, que baseia-se na *entropia de Shannon* [30]. Considerado um dos mais importantes conceitos na Teoria da Informação, a entropia de Shannon é uma medida da quantidade de informação (ou de incerteza) contida em uma dada mensagem.

Considere um processo $\mathcal{P}$ composto por um conjunto de possíveis eventos, $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2, \dots, \mathcal{E}_n$, cujas únicas informações disponíveis são suas probabilidades de ocorrências, $P(\mathcal{E}_1) = p_1, P(\mathcal{E}_2) = p_2, \dots, P(\mathcal{E}_n) = p_n$, com $p_1 + p_2 + \dots + p_n = 1$. No contexto da Teoria da Informação, o processo pode ser a transmissão de uma mensagem e os eventos os possíveis símbolos (letras, números etc) que podem ser transmitidos. Em seu trabalho, Shannon resgata o conceito de entropia proposta por Boltzmann no contexto da mecânica estatística, e define a grandeza

$$S = - \sum_{i=1}^n p_i \ln p_i, \quad (2.14)$$

como uma medida da incerteza que temos sobre a ocorrência do processo. Segundo Shannon, essa definição é a única que satisfaz os seguintes critérios:

- i) S é contínua em relação à p_i ;
- ii) se $p_i = 1/n$ para todo i , $S_{\max} = \ln n$ é uma função monotônica crescente em função de n ;
- iii) se um processo $\mathcal{P}$ for desmembrado em dois sub-processos $\mathcal{P}_1$ e $\mathcal{P}_2$, o valor de $S_{\mathcal{P}}$ para o processo original pode ser escrito como a soma ponderada dos valores individuais $S_{\mathcal{P}_1}$ e $S_{\mathcal{P}_2}$ dos sub-processos.

Em seguida, Shannon aponta algumas propriedades da entropia S que fundamentam seu uso como medida da incerteza de um processo. Entre elas, vale destacar duas situações extremas. Primeiramente, quando todas as probabilidades $p_i \rightarrow 0$, exceto uma que tende para 1, tem-se $S = 0$, correspondendo um estado onde não há incerteza sobre a ocorrência do processo. Por outro lado, para um dado valor de n , a entropia S tende ao valor máximo $\ln n$, quando todos os eventos são igualmente prováveis ($p_i = 1/n$, para qualquer i), indicando o estado de maior incerteza

⁶O índice ∞ na Eq. (2.13) será explicado adiante, durante a apresentação da nossa proposta de regularização generalizada.

sobre a ocorrência do processo. Desta maneira, convém definir o índice entrópico, $\tilde{S} = S/\ln n$, que varia entre 0 (máxima certeza) e 1 (máxima incerteza), permitindo comparar sistemas com tamanhos diferentes.

Baseando-se na entropia de Shannon, H. F. de C. Velho & F. M. Ramos propõem, em 1997, a regularização entrópica,

$$R_0(\mathbf{x}) = - \left[\frac{\lambda_1}{\ln n} \sum_{k=1}^n \tilde{x}_k \ln \tilde{x}_k + \frac{\lambda_2}{\ln(n-1)} \sum_{k=1}^{n-1} \tilde{\delta}_k \ln \tilde{\delta}_k \right], \quad \text{para } n > 2, \quad (2.15)$$

onde $\ln n$ e $\ln(n-1)$ são as entropias máximas associadas aos vetores $\tilde{\mathbf{x}}$ e $\tilde{\mathbf{\Delta}}$, respectivamente [31]⁷. Aplicando-a no problema inverso da reconstrução da distribuição de condutividade geoeletrica, os autores concluem que a forma entrópica de regularização restringe as possíveis soluções a um conjunto limitado de modelos com baixa entropia e que podem conter tanto regiões suaves como regiões com descontinuidades abruptas.

Considerando a entropia não-extensiva, proposta por C. Tsallis em 1988 [32], Velho *et al.* propõem, em 2006, uma teoria de regularização unificada [7]. Neste trabalho, os autores mostram que as regularizações entrópica e de Tikhonov podem ser recuperadas, a partir da entropia de Tsallis, para dois valores particulares do parâmetro de não-extensividade q : $q = 1$ (entrópica) e $q = 2$ (Tikhonov).

Na próxima seção, apresentaremos nossa proposta de regularização generalizada, baseada na generalização da função logaritmo. A principal contribuição de nossa formulação é sua flexibilidade. Com a introdução de um parâmetro, nossa função de regularização generalizada consegue transitar continuamente entre as regularizações entrópica e de Tikhonov, contendo-as como casos particulares.

2.5 Função de regularização generalizada

Whenever a new scientific viewpoint is proposed, either correct or wrong, it usually attracts quite extreme opinions. One of the questions that is regularly asked is the following: “Do I really need this? Is it not possible

⁷Da mesma forma que o índice ∞ da Eq. (2.13), o índice 0 na Eq. (2.15) será entendido na próxima seção, a partir da nossa função de regularização generalizada.

to work all this out just with the concepts that we already have, and that have been lengthy tested? [33]

No prefácio de seu livro *Introduction to nonextensive statistical mechanics*, o físico greco-brasileiro Constantino Tsallis apresenta uma série de argumentos validando sua forma entrópica generalizada. Proposta inicialmente em 1988 [32], a entropia de Tsallis surge como base para generalizar a mecânica estatística clássica de Boltzmann-Gibbs.

Considere um sistema composto por n configurações acessíveis (micro-estados) e seja $\{p_i\}$, com $i = 1, 2, \dots, n$, as probabilidades associadas a cada configuração. Pode-se definir uma forma geral de entropia, S_g , do sistema como a média

$$S_g = \left\langle k \ln_g \left(\frac{1}{p_i} \right) \right\rangle = k \sum_{i=1}^n p_i \ln_g \left(\frac{1}{p_i} \right), \quad (2.16)$$

onde $\ln_g(x)$ é uma função logaritmo generalizada pré-definida e $k > 0$ é uma constante [34]. Como se sabe, a estatística de Boltzmann-Gibbs fundamenta-se na entropia clássica

$$S_{BG} = -k_B \sum_{i=1}^n p_i \ln p_i, \quad (2.17)$$

onde k_B é a constante de Boltzman, e que pode ser obtida a partir da Eq. (2.16) quando $\ln_g(x) = \ln(x)$. A maximização da Eq. (2.17), considerando as restrições

$$\sum_{i=1}^n p_i = 1 \quad \text{e} \quad \sum_{i=1}^n p_i E_i = \langle E \rangle, \quad (2.18)$$

onde $\{E_i\}$ e $\langle E \rangle$ são números reais, produz a distribuição de probabilidade do *ensemble canônico clássico*,

$$p_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{\sum_{i=1}^n e^{-\beta E_i}}, \quad (2.19)$$

sendo $\beta = 1/k_B T$ e $T > 0$ um número real positivo (temperatura termodinâmica).

Com a introdução de um parâmetro $q \in \mathbb{R}$, Tsallis inicia seu artigo de 1988 propondo a forma entrópica generalizada

$$S_q = k_B \frac{1 - \sum_{i=1}^n p_i^q}{q - 1}, \quad (2.20)$$

que, no limite $q \rightarrow 1$, reassume a forma da entropia de Boltzmann-Gibbs, dada pela Eq. (2.17). Em seguida, Tsallis propõe uma generalização do *ensemble canônico*. Considerando as restrições da Eq. (2.18) e maximizando a Eq. (2.20), ele obtêm a distribuição de probabilidade generalizada,

$$p_i = \frac{[1 - \beta(q-1)E_i]^{1/(q-1)}}{\sum_{i=1}^n [1 - \beta(q-1)E_i]^{1/(q-1)}}, \quad (2.21)$$

que fornece a distribuição de Boltzmann (Eq. 2.19), como caso particular, quando $q \rightarrow 1$. A partir dessa generalização da estatística de Boltzmann-Gibbs, Tsallis propõe em 1994 uma generalização para as funções logaritmo e exponencial,

$$\ln_q(x) = \frac{x^{1-q} - 1}{1-q} \quad \text{e} \quad \exp_q(x) = [1 + (1-q)x]_+^{1/(1-q)}, \quad (2.22)$$

que retornam para as funções tradicionais $\ln(x)$ e $\exp(x)$ no limite $q \rightarrow 1$ [35].

Seguindo os estudos de L. Nivanen *et al.* [36] e E. P. Borges [37], uma formulação alternativa de generalizar as funções logaritmo e exponencial foi proposta recentemente por T. Arruda *et al.* [38] e A. S. Martinez *et al.* [39]. Nestes trabalhos, os autores, baseando-se em argumentos puramente geométricos, definem a função $\tilde{q}$ -logaritmo como a área sob a curva $f(t) = 1/t^{1-\tilde{q}}$, no intervalo entre $t = 1$ e $t = x$,

$$\ln_{\tilde{q}}(x) = \int_1^x \frac{dt}{t^{1-\tilde{q}}} = \lim_{\tilde{q}' \rightarrow \tilde{q}} \frac{x^{\tilde{q}'} - 1}{\tilde{q}'} = \begin{cases} \frac{x^{\tilde{q}} - 1}{\tilde{q}}, & \text{se } \tilde{q} \neq 0, \\ \ln(x), & \text{se } \tilde{q} = 0, \end{cases} \quad (2.23)$$

e a função $\tilde{q}$ -exponencial como a função inversa da função $\ln_{\tilde{q}}(x)$,

$$\exp_{\tilde{q}}(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } \tilde{q}x < -1, \\ \lim_{\tilde{q}' \rightarrow \tilde{q}} (1 + \tilde{q}'x)^{1/\tilde{q}'}, & \text{se } \tilde{q}x \geq -1, \end{cases} \quad (2.24)$$

onde $\tilde{q} \in \mathbb{R}$ é um parâmetro de generalização. Uma descrição detalhada dessas funções generalizadas e suas propriedades é apresentada no Apêndice A.

A partir da Eq. (2.23) e considerando que $\sum_{i=1}^n p_i = 1$, pode-se reescrever a

Eq. (2.20) como

$$S_q = k_B \frac{\sum_{i=1}^n p_i - \sum_{i=1}^n p_i^q}{q-1} = -k_B p_i \sum_{i=1}^n \frac{p_i^{q-1} - 1}{q-1} = -k_B p_i \sum_{i=1}^n \ln_{q-1}(p_i), \quad (2.25)$$

e, usando a Eq. (2.24), a Eq. (2.21) torna-se

$$p_i = \frac{\exp_{q-1}(-\beta E_i)}{\sum_{i=1}^n \exp_{q-1}(-\beta E_i)}. \quad (2.26)$$

Observe que no regime de alta temperatura, $\beta = 1/(k_B T) \rightarrow 0$, $\exp_{1-q}(-\beta) \rightarrow 1$, e $p_i = 1/n$, ou seja, todas as configurações são igualmente acessíveis. Neste limite, temos o máximo da entropia, $S_q = k_B \ln_{1-q}(n)$, onde usamos $\ln_{1-q}(x) = \ln_{q-1}(-x)$ (ver Apêndice A).

As propriedades da entropia, consideradas fundamentais na física estatística, são a aditividade e a extensividade. A entropia de Boltzmann-Gibbs conserva essas duas propriedades apenas para sistemas cujas partes constituintes são independentes. A contribuição fundamental da estatística de Tsallis, por sua vez, é conseguir manter a propriedade de extensividade da entropia para sistemas cujas partes apresentam correlação, mesmo que a aditividade não seja conservada. O trabalho de L. Assirati *et al.* [40], por exemplo, ilustra como a correlação pode influenciar aplicações que usam a entropia como base. Neste estudo, os autores comparam as entropias de Boltzmann-Gibbs-Shannon e de Tsallis no reconhecimento de padrões em imagens de satélite e mostram que esta última apresenta melhores resultados.

No contexto dos problemas inversos, é de se esperar que, em geral, os elementos do vetor solução não sejam independentes entre si. Com isso, a função de regularização deve ser capaz de detectar essas correlações. A partir da função $\tilde{q}$ -logaritmo (Eq. 2.23) e as normalizações dadas pelas Eqs. (2.11) e (2.12), propomos a função de regularização generalizada

$$R_{\tilde{q}_r}(\mathbf{x}) = \tilde{\lambda}_1 \sum_{k=1}^n \tilde{x}_k \ln_{\tilde{q}_r} \tilde{x}_k + \tilde{\lambda}_2 \sum_{k=1}^{n-1} \tilde{\delta}_k \ln_{\tilde{q}_r} \tilde{\delta}_k, \quad \text{para } n > 3, \quad (2.27)$$

onde $\tilde{q}_r \in \mathbb{R}$ é um parâmetro de generalização e $\tilde{\lambda}_1$ e $\tilde{\lambda}_2$ são parâmetro de ponderação,

definidos como

$$\tilde{\lambda}_1 = -\frac{\lambda_1^{\tilde{q}_r+1}}{\ln_{\tilde{q}_r} n} \quad \text{e} \quad \tilde{\lambda}_2 = -\frac{\lambda_2^{\tilde{q}_r+1}}{\ln_{\tilde{q}_r}(n-1)}, \quad (2.28)$$

que levam em conta o valor máximo da entropia na configuração de equiprobabilidade.

A principal contribuição da nossa função de regularização generalizada é sua versatilidade em função do parâmetro $\tilde{q}_r$. De fato, a Eq. (2.27) contém as regularizações entrópica (Eq. 2.15) e de Tikhonov (Eq. 2.10), como casos particulares, quando $\tilde{q}_r = 0$ e $\tilde{q}_r \rightarrow \infty$, respectivamente. Ademais, pode-se transitar continuamente entre essas duas regularizações para $0 < \tilde{q}_r < \infty$. Com isso, pode-se dosar o quanto a função de regularização levará em conta as possíveis correlações entre os elementos do vetor solução.

Inicialmente, analisemos nossa função de regularização generalizada, considerando $\tilde{q}_r = 0$. Neste caso, temos $\ln_{\tilde{q}_r}(\tilde{x}) = \ln(\tilde{x})$, e os parâmetros das Eq. (2.28) tornam-se $\tilde{\lambda}_1 = -\lambda_1/\ln n$ e $\tilde{\lambda}_2 = -\lambda_2/\ln(n-1)$. Com isso, as Eqs. (2.27) e (2.28) assumem a forma da regularização entrópica, dada pela Eq. (2.15), conservando a aditividade da entropia.

Para $\tilde{q}_r \neq 0$, por sua vez, perde-se a propriedade da aditividade da entropia, visto que $\ln_{\tilde{q} \neq 0}(ab) \neq \ln_{\tilde{q} \neq 0}(a) + \ln_{\tilde{q} \neq 0}(b)$. Contudo, a função de regularização passa a considerar as possíveis correlações entre os elementos do vetor solução. Neste caso, lembrando da definição de $\ln_{\tilde{q}}(x)$, dada pela Eq. (2.23), a Eq. (2.27) torna-se

$$R_{\tilde{q}_r \neq 0}(\mathbf{x}) = \left[\frac{-\lambda_1^{\tilde{q}_r+1}}{\frac{n^{\tilde{q}_r}-1}{\tilde{q}_r}} \sum_{k=1}^n \tilde{x}_k \left(\frac{\tilde{x}_k^{\tilde{q}_r}-1}{\tilde{q}_r} \right) \right] + \left[\frac{-\lambda_2^{\tilde{q}_r+1}}{\frac{(n-1)^{\tilde{q}_r}-1}{\tilde{q}_r}} \sum_{k=1}^{n-1} \tilde{\delta}_k \left(\frac{\tilde{\delta}_k^{\tilde{q}_r}-1}{\tilde{q}_r} \right) \right],$$

que pode ser reorganizada, obtendo-se

$$R_{\tilde{q}_r \neq 0}(\mathbf{x}) = \frac{\lambda_1^{\tilde{q}_r+1}}{n^{\tilde{q}_r}-1} \sum_{k=1}^n \left(\tilde{x}_k - \tilde{x}_k^{\tilde{q}_r+1} \right) + \frac{\lambda_2^{\tilde{q}_r+1}}{(n-1)^{\tilde{q}_r}-1} \sum_{k=1}^{n-1} \left(\tilde{\delta}_k - \tilde{\delta}_k^{\tilde{q}_r+1} \right). \quad (2.29)$$

A regularização de Tikhonov (Eq. 2.13) pode ser obtida, a partir da Eq. (2.29), no caso limite $\tilde{q}_r \rightarrow \infty$,

$$R_{\infty}(\mathbf{x}) = \lim_{\tilde{q}_r \rightarrow \infty} \left[\frac{\lambda_1^{\tilde{q}_r+1}}{n^{\tilde{q}_r}-1} \sum_{k=1}^n \left(\tilde{x}_k - \tilde{x}_k^{\tilde{q}_r+1} \right) + \frac{\lambda_2^{\tilde{q}_r+1}}{(n-1)^{\tilde{q}_r}-1} \sum_{k=1}^{n-1} \left(\tilde{\delta}_k - \tilde{\delta}_k^{\tilde{q}_r+1} \right) \right]. \quad (2.30)$$

Analisando as normalizações dadas pela Eqs. (2.11) e (2.12), temos que $\tilde{x}_k, \tilde{\delta}_k \in (0, 1]$. Na verdade, pode-se obter $\tilde{x}_k = \tilde{\delta}_k = 1$ apenas quando os vetores $\tilde{\mathbf{x}}$ e $\tilde{\mathbf{\Delta}}$ contiverem um, e apenas um elemento não nulo ⁸. No entanto, neste caso teríamos $R_{\tilde{q}_r}(\mathbf{x}) = 0$, para qualquer valor de $\tilde{q}_r$, e a regularização seria irrelevante. Esse caso corresponde à entropia de Shannon (Eq. 2.14) nula, o que não acrescenta informação sobre o sistema. Portanto, considerando $0 < \tilde{x}_k, \tilde{\delta}_k < 1$, temos

$$\lim_{\tilde{q}_r \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^n \left(\tilde{x}_k - \tilde{x}_k^{\tilde{q}_r+1} \right) = \sum_{k=1}^n \tilde{x}_k \quad \text{e} \quad \lim_{\tilde{q}_r \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^{n-1} \left(\tilde{\delta}_k - \tilde{\delta}_k^{\tilde{q}_r+1} \right) = \sum_{k=1}^n \tilde{\delta}_k. \quad (2.31)$$

Devemos também garantir que os fatores $\lambda_1^{\tilde{q}_r+1}/(n^{\tilde{q}_r} - 1)$ e $\lambda_2^{\tilde{q}_r+1}/[(n-1)^{\tilde{q}_r} - 1]$ na Eq. (2.30) sejam números reais finitos. Analisando o primeiro desses termos, considere que

$$\alpha_1 = \frac{\lambda_1^{\tilde{q}_r+1}}{n^{\tilde{q}_r} - 1}, \quad (2.32)$$

seja número real finito. Aproximando $n^{\tilde{q}_r} - 1 \approx n^{\tilde{q}_r}$, visto que $n^{\tilde{q}_r} \gg 1$, temos

$$\lambda_1^{\tilde{q}_r+1} = \alpha_1 n^{\tilde{q}_r},$$

$$\lambda_1 = \alpha_1^{1/(\tilde{q}_r+1)} n^{\tilde{q}_r/(\tilde{q}_r+1)},$$

que, no limite $\tilde{q}_r \rightarrow \infty$, resulta em $\lim_{\tilde{q}_r \rightarrow \infty} \alpha_1^{1/(\tilde{q}_r+1)} n^{\tilde{q}_r/(\tilde{q}_r+1)} = n$. Portanto, para que o termo $\lambda_1^{\tilde{q}_r+1}/(n^{\tilde{q}_r} - 1)$ seja finito, devemos ter λ_1 na mesma ordem de grandeza de n . Analogamente, devemos ter λ_2 da mesma ordem de $n - 1 \approx n$, de forma que

$$\alpha_2 = \frac{\lambda_1^{\tilde{q}_r+1}}{(n-1)^{\tilde{q}_r} - 1}, \quad (2.33)$$

também seja um número real e finito. Com isso, e considerando as Eqs. (2.31 – 2.33), a Eq. (2.30) pode ser expressa como $R_{\infty}(\mathbf{x}) = \alpha_1 \sum_{k=1}^n \tilde{x}_k + \alpha_2 \sum_{k=1}^{n-1} \tilde{\delta}_k$, que equivale à regularização de Tikhonov (Eq. 2.13).

Mostramos na Tab. (2.1) a forma de nossa regularização generalizada, $R_{\tilde{q}_r}(\mathbf{x})$, para alguns valores do parâmetro $\tilde{q}_r$. Como já discutido, para $\tilde{q}_r = 0$ e $\tilde{q}_r \rightarrow \infty$,

⁸Nesta análise, desconsideramos o número ξ , introduzido nas Eqs. (2.11) e (2.12), para garantir que $|x_i|^2 + \xi > 0$ e $|x_{j+1} - x_j|^2 + \xi > 0$.

Tabela 2.1 – Formas compactas da função de regularização generalizada dada pela Eq. (2.27), para alguns valores de $\tilde{q}_r$.

$\tilde{q}_r$	$R_{\tilde{q}_r}(\mathbf{x})$
$-\infty$	∞
$\vdots$	$\vdots$
-2	$\frac{n^2}{\lambda_1(1-n^2)} \sum_{k=1}^n \left(\frac{\tilde{x}_k^2 - 1}{\tilde{x}_k} \right) + \frac{(n-1)^2}{\lambda_2[1-(n-1)^2]} \sum_{k=1}^{n-1} \left(\frac{\tilde{\delta}_k^2 - 1}{\tilde{\delta}_k} \right)$
-1	$\frac{n}{1-n} \sum_{k=1}^n (\tilde{x}_k - 1) + \frac{1-n}{n-2} \sum_{k=1}^{n-1} (\tilde{\delta}_k - 1)$
0	$-\frac{\lambda_1}{\ln n} \sum_{k=1}^n \tilde{x}_k \ln \tilde{x}_k - \frac{\lambda_2}{\ln(n-1)} \sum_{k=1}^{n-1} \tilde{\delta}_k \ln \tilde{\delta}_k$
1	$\frac{\lambda_1^2}{n-1} \sum_{k=1}^n (\tilde{x}_k - \tilde{x}_k^2) + \frac{\lambda_2^2}{n-2} \sum_{k=1}^{n-1} (\tilde{\delta}_k - \tilde{\delta}_k^2)$
2	$\frac{\lambda_1^3}{n^2-1} \sum_{k=1}^n (\tilde{x}_k - \tilde{x}_k^3) + \frac{\lambda_2^3}{(n-1)^2-1} \sum_{k=1}^{n-1} (\tilde{\delta}_k - \tilde{\delta}_k^3)$
$\vdots$	$\vdots$
∞	$\alpha_1 \sum_{k=1}^n \tilde{x}_k + \alpha_2 \sum_{k=1}^{n-1} \tilde{\delta}_k$

obtemos as regularizações entrópica e de Tikhonov, respectivamente. Já para $\tilde{q}_r \rightarrow -\infty$, a função diverge e, para $\tilde{q}_r < -1$, deve-se ter $\tilde{x}_k, \tilde{\delta}_k \neq 0$.

Finalizamos destacando, novamente, que a contribuição marcante de nossa proposta é permitir obter diferentes formas de regularização com uma única formulação. Além disso, variando-se o parâmetro de generalização $\tilde{q}_r$, é possível dosar o quanto a função de regularização levará em conta as possíveis correlações entre os elementos do vetor solução.

2.6 Conclusão

Neste capítulo, apresentamos um breve histórico e uma revisão bibliográfica sobre problemas inversos. Destacamos as dificuldades intrínsecas que aparecem na resolução destes tipos de problemas, tais como a não unicidade e a instabilidade das soluções. Discutimos que tais dificuldades podem ser enfrentadas através da

regularização da solução, utilizando-se informações *a priori* do sistema em estudo. Mais especificamente, revisamos a clássica regularização de Tikhonov (Eq. 2.10) e a regularização entrópica (Eq. 2.15), que é baseada na entropia de Shannon. Finalmente, propomos uma função de regularização generalizada (Eq. 2.27), baseada na generalização da função logaritmo. Com a introdução de um parâmetro, $\tilde{q}_r \in \mathbb{R}$, mostramos que nossa função é capaz de transitar continuamente entre as regularizações entrópica e de Tikhonov, e que contém essas como casos particulares para $\tilde{q}_r = 0$ e $\tilde{q}_r \rightarrow \infty$, respectivamente. Desta maneira, com o parâmetro de generalização conseguimos levar em conta as possíveis correlações que existem entre os elementos do vetor solução. No próximo capítulo, discutiremos os conceitos básicos dos problemas de otimização e apresentaremos o algoritmo de *recozimento simulado*, um dos mais difundidos algoritmos de otimização estocásticos.

Otimização e algoritmo de recozimento simulado generalizado

A essência do conceito de otimização pode ser sintetizada nas palavras do filósofo e teólogo inglês Guilherme de Ockham: “*É vão fazer com mais o que pode ser feito com menos*”. Conhecida como *navalha de Ockham*, essa ideia tornou-se os dos mais importantes paradigmas do método científico, através do qual deve-se sempre optar pela explicação mais simples possível para descrever a natureza. A aceitação do modelo heliocêntrico de Copérnico sobre o modelo geocêntrico ptolomaico, por exemplo, representa uma boa ilustração da *navalha de Ockham* [41].

Podemos dizer que ela mesma, a natureza, é econômica. Sistemas físicos, químicos e biológicos buscam a otimização. Os átomos de um sólido, por exemplo, tendem a formar redes cristalinas que minimizam a energia livre do sistema. O processo de enovelamento de uma proteína ocorre de forma que sua configuração tridimensional final é a que possui menor energia livre. Até a propagação da luz é otimizada, seguindo caminhos que minimizam o tempo de percurso [42].

Pessoas, empresas e profissionais das mais variadas áreas também lidam com problemas de otimização diariamente. Qual o melhor caminho escolher para ir de casa para o trabalho? Qual é a melhor sequência de operações em uma linha de produção para minimizar os custos? Quanto e em quais ações investir na bolsa de valores para obter ganho máximo? Como organizar a logística de distribuição de um produto para maximizar sua difusão e minimizar os custos de transporte? Qual deve ser a dose de radiação aplicada em um paciente para maximizar a destruição de células cancerosas com risco mínimo? Esses são alguns poucos exemplos de

problemas nos quais deseja-se obter a máxima eficiência de um processo com o mínimo de custo ou risco.

3.1 A formulação de um problema de otimização

De uma maneira geral, um problema de otimização requer a definição clara das *variáveis ajustáveis*, que caracterizam o sistema, e de uma *função objetivo*, que traduz o desempenho (ou custo) do processo a ser otimizado, em função das *variáveis ajustáveis*. Por exemplo, considere que uma indústria deseja minimizar o uso de alumínio na produção de um recipiente cilíndrico, cuja capacidade volumétrica deve ser $V = 350 \text{ cm}^3$. Neste caso, as variáveis ajustáveis são o raio R e a altura h do recipiente e a função objetivo é a área de sua superfície $A(R, h) = 2\pi R^2 + 2\pi Rh$. Portanto, deve-se encontrar o par de parâmetros (R, h) que minimizem a função objetivo $A(R, h)$ e que satisfaça a condição $\pi R^2 h = 350 \text{ cm}^3$.

Para generalizar a formulação de um problema de otimização, considere que $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in \mathcal{D}$ seja um vetor coluna, definido em um domínio $\mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^n$, contendo n variáveis ajustáveis que caracterizam um sistema a ser otimizado. Considere também que $f(\mathbf{x})$ seja a função objetivo que mede o desempenho/custo deste sistema em função de $\mathbf{x}$. A função objetivo deve ser definida de forma a associar um único número real a cada possível solução $\mathbf{x}$, isto é, $f : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$. Com isso, resolver um problema de otimização se resume em determinar a solução ótima $\mathbf{x}_* = (x_{*1}, x_{*2}, \dots, x_{*n})^T$ que minimize a função objetivo $f(\mathbf{x})$, ou seja, $f(\mathbf{x}_*) < f(\mathbf{x}) \quad \forall \quad \mathbf{x} \in \mathcal{D}$, tal que $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}_*$, e que satisfaça condições de restrições pré-definidas. Em termos matemáticos, podemos escrever

$$\mathbf{x}_* = \arg \min_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} \{f(\mathbf{x})\}, \quad \text{sujeito a} \quad \begin{cases} g_i(\mathbf{x}) = a_i & \text{para } i = 1, 2, \dots, k \\ h_j(\mathbf{x}) \leq b_j & \text{para } j = 1, 2, \dots, \ell \end{cases} \quad (3.1)$$

onde $g_i(\mathbf{x}) = a_i$ são k restrições de igualdade e $h_j(\mathbf{x}) \leq b_j$ são ℓ restrições de desigualdades do vetor $\mathbf{x}$.

De acordo com a forma da função objetivo e das características do vetor solução, um problema de otimização pode ser classificado de diferentes formas. A identi-

ficação precisa dessa classificação, por sua vez, é fundamental na escolha do método adequado para resolver o problema. Por exemplo, podemos ter *otimização restrita* e *otimização irrestrita*, dependendo se as variáveis ajustáveis do vetor solução devem satisfazer ou não restrições pré-estabelecidas. A formulação dada pela Eq. (3.1), por exemplo, corresponde a um problema de otimização *restrito* devido às restrições $g_i(\mathbf{x}) = a_i$ e $h_j(\mathbf{x}) \leq b_j$. É possível também relaxar as restrições substituindo-as por termos de penalização (função de regularização), que desencorajam o algoritmo de explorar determinadas regiões do espaço de soluções.

Pode-se também classificar um problema de otimização em *discreto* ou *contínuo*. No primeiro caso, o espaço de soluções do vetor $\mathbf{x}$ é composto por um conjunto finito ou infinito de pontos discretos contáveis. Por exemplo, se $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$, onde $\mathcal{D} \subseteq \mathbb{Z}^n$, temos um problema de otimização *discreto*. Já em um problema de otimização *contínuo*, temos $\mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^n$, ou seja, o espaço de soluções é composto por um conjunto infinito de pontos não contáveis. De uma maneira geral, é mais fácil resolver um problema de otimização contínuo visto que a função objetivo $f(\mathbf{x})$ pode possuir primeira e segunda derivadas definidas.

Especialmente importante é identificar se a função objetivo $f(\mathbf{x})$ é *convexa* ou *não-convexa*, o que implica em o problema possuir um único ponto de mínimo ou múltiplos pontos de mínimo. Matematicamente, uma função $f(\mathbf{x})$ é dita convexa se, para quaisquer dois pontos $\mathbf{x}_1$ e $\mathbf{x}_2$ pertencentes ao seu domínio, o gráfico de $f(\mathbf{x})$ entre $\mathbf{x}_1$ e $\mathbf{x}_2$ encontra-se sempre abaixo da linha reta que liga pontos $(\mathbf{x}_1, f(\mathbf{x}_1))$ e $(\mathbf{x}_2, f(\mathbf{x}_2))$, como mostra a Fig. (3.1-a). Caso contrário, a função é classificada como *não-convexa*, como ilustrado na Fig. (3.1-b).

Essa classificação da função objetivo, por sua vez, permite definir um ponto de mínimo em *mínimo local* e *mínimo global*. Um ponto $\mathbf{x}_* \in \mathcal{D}$ é dito um *mínimo local* da função $f(\mathbf{x})$ quando existe uma vizinhança $\mathcal{V} \subseteq \mathcal{D}$, em torno de $\mathbf{x}_*$, tal que $f(\mathbf{x}_*) \leq f(\mathbf{x})$ para todo $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$. Particularmente neste caso, o mínimo é classificado como *fraco*, visto que $\mathbf{x}_*$ pode não ser o único minimizador de $f(\mathbf{x})$ na vizinhança $\mathcal{V}$. Por sua vez, se $f(\mathbf{x}_*) < f(\mathbf{x}) \quad \forall \quad \mathbf{x} \in \mathcal{V}$, tal que $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}_*$, o ponto $\mathbf{x}_*$ é classificado como mínimo *forte*. Finalmente, quando a vizinhança $\mathcal{V}$ se estender para todo o domínio $\mathcal{D}$, ou seja, se $f(\mathbf{x}_*) < f(\mathbf{x}) \quad \forall \quad \mathbf{x} \in \mathcal{D}$, tal que $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}_*$, o ponto $\mathbf{x}_*$ é considerado um *mínimo global*.

Figura 3.1 – Exemplos unidimensionais de uma função (a) convexa, que possui um único ponto de mínimo, e uma função (b) não-convexa, que possui mais de um ponto de mínimo. Em uma função convexa, todos os pontos do gráfico $f(x)$ entre dois pontos quaisquer $(x_1, f(x_1))$ e $(x_2, f(x_2))$ estão abaixo da linha reta que liga esses pontos, o que não ocorre com a função não-convexa.

3.2 Otimização determinística × otimização estocástica

São conhecidos diversos métodos para resolver problemas de otimização. No geral, eles se baseiam em processos de busca iterativa no qual parte-se de uma solução inicial e, a cada iteração, uma nova solução candidata é gerada e comparada com a anterior, até que um critério de parada seja satisfeito. Por sua vez, dependendo da forma como cada nova solução é gerada e do critério de aceitá-la ou não, o método de otimização pode ser classificado como *determinístico* ou *estocástico*.

Nos *métodos de otimização determinísticos*, as soluções candidatas são geradas através regras pré-definidas de forma a garantir, a cada iteração, a minimização mais eficiente da função objetivo. Entre os métodos determinísticos, destaca-se o *método da inclinação máxima*. Neste, a cada iteração k , a nova solução candidata $\mathbf{x}^{(k+1)}$ é gerada a uma distância $\alpha^{(k)}$ da solução atual $\mathbf{x}^{(k)}$ e na direção oposta do gradiente da função objetivo $f(\mathbf{x})$, ou seja,

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \alpha^{(k)} \nabla f^{(k)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.2)$$

onde $\nabla f^{(k)} = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right]^T$ é o gradiente da função objetivo no ponto $\mathbf{x}^{(k)}$. Pode-se definir um tamanho de passo fixo $\alpha^{(k)} = \alpha$ para todo o processo. No entanto, a medida que a solução $\mathbf{x}$ se aproxima do ponto de mínimo, passos excessivamente grandes podem dificultar a convergência para a solução ótima. Desta forma, é comum definir uma regra que otimize o tamanho do passo a cada iteração. Uma maneira de fazer isso é, a cada iteração k , resolver um problema de otimização secundário, no qual deve-se determinar o valor de α que minimize $f(\mathbf{x}^{(k)} - \alpha \nabla f^{(k)})$.

Uma variação do método da inclinação máxima é o conhecido *método de Newton-Raphson*. Baseado na mesma recursividade da Eq. (3.2), a proposta desse algoritmo é acelerar a convergência para a solução ótima através da substituição do passo $\alpha(k)$ pela inversa da matriz Hessiana, $\mathbf{H}^{-1}(\mathbf{x})$, onde

$$\mathbf{H}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}.$$

Pode-se mostrar que, para uma função objetivo quadrática, o método de Newton-Raphson converge muito mais rapidamente para a solução ótima do que o método da inclinação máxima. Por outro lado, para funções objetivos mais complexas, ele pode se tornar instável e divergir do ponto de mínimo [43]. Uma solução é

combinar o método da inclinação máxima para buscas distantes do mínimo e usar método de Newton-Raphson para buscas mais refinadas nas vizinhanças do ponto ótimo. Obviamente que, neste caso, surge a dificuldade de definir *longe* e *perto* do ponto de mínimo.

Já nos *métodos de otimização estocásticos*, cada nova solução é gerada de forma aleatória, seguindo uma distribuição de probabilidade pré-definida. Além disso, dependendo do método, pode-se eventualmente aceitar soluções que aumentam o valor da função objetivo. A essência dessa aleatoriedade é permitir uma busca mais ampla através do espaço de soluções, evitando convergências prematuras para soluções *não-ótimas*. Especificamente para funções objetivos não-convexas, a estocasticidade na geração/aceitação das soluções candidatas permite que o processo escape de bacias de mínimos locais e tenha maior probabilidade de convergir para o mínimo global, como ilustrado na Fig. (3.2).

Figura 3.2 – Buscas pelo mínimo da função objetivo $f(x)$, através do espaço de soluções realizadas por um método (a) determinístico e (b) estocástico. No método determinístico, há convergência prematura para um mínimo local. No algoritmo estocástico, por sua vez, a aleatoriedade na geração das soluções e a possibilidade de aceitar eventuais aumentos na função objetivo torna-o capaz de poder escapar dos mínimos locais e convergir para o mínimo global.

Além disso, diferentemente da maioria dos métodos determinísticos, tais como

inclinação máxima e Newton-Raphson, os métodos estocásticos não requerem informações detalhadas da função objetivo, tais como o gradiente ou a matriz Hessiana. Em geral, eles não requerem sequer que a função objetivo seja contínua e diferenciável. Finalmente, eles também são mais robustos para problemas nos quais as informações que geram a função custo contém ruídos [43].

Existem diferentes algoritmos de otimização estocásticos, variando entre si principalmente na forma como cada nova solução é gerada e no critério de aceitação dessa solução. Cada um deles pode apresentar vantagens e desvantagens, dependendo do tipo de problema que deve ser considerado. O exemplo mais básico de um algoritmo de otimização estocástico é a *busca aleatória simples*¹, que pode ser resumido nos seguintes passos:

1. Gere uma solução inicial arbitrária $\mathbf{x}_*$;
2. Calcule a função objetivo $f(\mathbf{x}_*)$;
3. Gere uma nova solução $\mathbf{x}_{\text{trial}}$ por meio de uma distribuição de probabilidade pré-definida
4. Calcule a nova função objetivo $f(\mathbf{x}_{\text{trial}})$;
5. Se $f(\mathbf{x}_{\text{trial}}) < f(\mathbf{x}_*)$, faça $\mathbf{x}_* = \mathbf{x}_{\text{trial}}$;
6. Se a solução atual $\mathbf{x}_*$ satisfazer o critério de parada, escreva o resultado e PARE. Senão, retorne ao passo 3.

Apesar da simplicidade e facilidade de implementação, esse algoritmo pode não ser muito eficiente. Em primeiro lugar, a exploração do espaço de soluções é realizada de forma “cega” (*blind*), ou seja, não há uma heurística eficiente para gerar cada nova solução a partir da solução atual. Além disso, o critério de aceitação é inflexível, não permitindo soluções que aumentem o valor da função objetivo.

Na próxima seção, apresentaremos um dos mais difundidos algoritmos de otimização estocásticos, conhecido como *recozimento simulado*. Como veremos, esse algoritmo é baseado em conceitos da termodinâmica e da mecânica estatística, no qual a temperatura assume a função de controlar a estocasticidade do processo. Ademais, ele apresenta uma proposta de geração de soluções que otimiza a exploração do espaço de busca e um critério de aceitação que dificulta a convergência para mínimos locais.

¹*Simple Random Search*, em inglês.

3.3 Método Monte Carlo e critério de Metropolis

Um dos eventos mais marcantes do século 20 ocorreu em 6 de agosto de 1945, quando a cidade de Hiroshima, no Japão, foi praticamente dizimada pela explosão da primeira bomba atômica utilizada contra uma população civil. Conta-se que, no dia seguinte, quando Albert Einstein soube do ataque, lastimou-se e arrependeu-se profundamente, pois sabia que, indiretamente, havia contribuído com a tragédia. Em 1939, quando a Segunda Grande Guerra ainda se iniciava, Einstein foi procurado pelo físico húngaro Leó Szilárd, que o convenceu a escrever uma carta ao presidente dos EUA, alertando-o sobre a possibilidade do uso de armas nucleares pelos alemães [44]. Três anos mais tarde, o governo americano implementa o grandioso Projeto Manhattan, que reuniu centenas de cientistas, engenheiros e técnicos e um astronômico orçamento para o desenvolvimento e construção da bomba atômica [45].

Dentre as grandes mentes convocadas para compor a base intelectual do Projeto Manhattan, em Los Alamos, no Novo México, estava o físico greco-americano Nicholas C. Metropolis. Tendo trabalhado com Enrico Fermi na construção do primeiro reator nuclear nos primeiros anos da guerra, em Chicago, Metropolis retoma suas pesquisas após a vitória dos Aliados e tem seu nome imortalizado no meio acadêmico com a publicação do artigo *Equation of State Calculations by Fast Computing Machines*, em 1953 [46]. Escrito com a colaboração de A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller e E. Teller, o trabalho propõe uma nova abordagem de amostragem do método Monte Carlo para descrever grandezas macroscópicas de um sistema a partir de sua estrutura microscópica. O resultado marcante desse trabalho, conhecido atualmente como *critério de Metropolis*, descreve uma regra de aceitação ou não de cada nova configuração amostrada do sistema.

A partir da mecânica estatística, sabemos que um mesmo estado macroscópico de um sistema termodinâmico pode ser obtido a partir de inúmeros microestados diferentes. No *ensemble canônico*, quando um sistema está em equilíbrio a uma dada temperatura T , a probabilidade de encontrá-lo em um dado microestado específico i é proporcional ao peso de Boltzmann, $e^{-E_i/k_B \cdot T}$, onde E_i é a energia do sistema no microestado i e k_B é a constante de Boltzmann. Com isso, a energia média $\langle E \rangle$ do

sistema é obtida calculando-se a média sobre todos seus microestados

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^n E_i e^{-E_i/k_B T}, \quad (3.3)$$

onde $Z = \sum_{i=1}^n e^{-E_i/k_B T}$ é a função de partição e $n \in \mathbb{N}$ é o número de micro-estados (configurações) acessíveis ao sistema.

No trabalho de Metropolis *et al.*, ao invés de pesar as configurações do sistema de acordo com o peso de Boltzmann para calcular a energia média através da Eq. (3.3), configurações aleatórias são geradas e escolhidas com probabilidade proporcional a $e^{-E_i/k_B T}$.

So the method we employ is actually a modified Monte Carlo scheme, where, instead of choosing configurations randomly, then weighting them with $\exp(-\Delta E/kT)$, we choose configurations with a probability $\exp(-\Delta E/kT)$ and weight them evenly. [46]

Desta forma, o equilíbrio termodinâmico é obtido através de um processo iterativo no qual, a cada passo, gera-se modificações aleatórias na configuração do sistema e calcula-se a diferença $\Delta E = E_2 - E_1$, entre a energia E_2 da nova configuração e a energia E_1 da configuração anterior. Caso $\Delta E \leq 0$, aceita-se com certeza a nova configuração. No entanto, mesmo quando $\Delta E > 0$, a nova solução não é descartada de imediato, podendo ser aceita com certa probabilidade. Considerando-se que as probabilidades do sistema ter as energias E_1 e E_2 são, respectivamente, $p(E_1) = e^{-E_1/k_B T}$ e $p(E_2) = e^{-E_2/k_B T}$, a probabilidade de aceitar a nova solução é

$$\frac{p(E_2)}{p(E_1)} = \frac{e^{-E_2/k_B T}}{e^{-E_1/k_B T}} = e^{-(E_2-E_1)/k_B T} = e^{-\Delta E/k_B T}. \quad (3.4)$$

Após um número suficientemente grande de novas configurações (passos do processo iterativo), Metropolis *et al.* propõem a determinação da energia média do sistema como $\langle E \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N E_k$, onde E_k é a energia do sistema no k -ésimo passo e N é o número de passos executados. Desta forma, obtemos uma média temporal da energia do sistema que, de acordo com o teorema ergódico, no equilíbrio termodinâmico, é igual à média configuracional dada pela Eq. (3.3).

Essa equivalência ergódica entre as médias configuracional e temporal fundamenta o algoritmo de Metropolis, pois a distribuição de Boltzmann obedece ao *princípio do balanço detalhado* (PBD). Como se sabe, o PBD é a condição suficiente para que um sistema atinja uma distribuição de equilíbrio termodinâmico. Nesta condição, cada microprocesso deve ser equilibrado pelo correspondente microprocesso reverso. Para um ensemble de sistemas físicos no qual r e s são dois micro-estados quaisquer, o PBD é satisfeito quando

$$\pi(s)P(r \leftarrow s) = \pi(r)P(s \leftarrow r), \quad (3.5)$$

onde $P(r \leftarrow s)$ é a probabilidade por unidade de tempo do sistema atingir o micro-estado r a partir do micro-estado s , $P(s \leftarrow r)$ é a probabilidade do sistema atingir o micro-estado s a partir do micro-estado r e $\pi(r)$ e $\pi(s)$ são as probabilidades de encontrar o sistema nos micro-estados r e s , respectivamente,

O algoritmo de Metropolis, como ficou conhecido, é amplamente utilizado e citado por pesquisadores em todo o mundo. Em 1970 e em 1975, por exemplo, R. Friedberg & J. E. Cameron, [47] e A. B. Bortz *et al.* [48], respectivamente, estudaram o clássico modelo de spin de Ising utilizando a amostragem proposta por Metropolis *et al.*. Em 1984, Geman & Geman [49] propõem o uso do critério de Metropolis na reconstrução de imagens degradadas e, em 1985, ele é utilizado por V. Cerny na determinação de uma solução aproximada para o clássico problema do *caixeiro viajante* [50].

3.4 O surgimento do algoritmo de recozimento simulado

Apresentado inicialmente pelo matemático austríaco K. Menger [51], o *problema do caixeiro viajante* (TSP)² foi e continua sendo um dos problemas de otimização combinatória mais estudados, principalmente por ser um problema de formulação simples, mas de difícil resolução. O objetivo do TSP é, dado um número N de pontos (cidades) e as distâncias entre eles, determinar o trajeto de menor custo (comprimento total) que o *caixeiro* deve realizar para conseguir visitar uma única

² *Travelling Salesman Problem*, em inglês.

vez cada cidade e retornar ao ponto de partida.

Originalmente, Menger propõe analisar todas as combinações de trajeto possíveis para determinar o de menor percurso total (*busca pela força bruta*), mas alerta que essa heurística torna-se impraticável quando N for relativamente grande.

We call this the messenger problem, because in practice the problem has to be solved by every postman, and also by many travelers: finding the shortest path joining all of a finite set of points whose distances from each other are given. Of course, the problem can be solved by a finite number of trials. No rule is known that would reduce the number of trials to less than the number of permutations of the given points. [51]

De fato, essa é a grande dificuldade do TSP. Em seu livro *In Pursuit of the Traveling Salesman: Mathematics at the Limits of Computation*, William J. Cook conta que, na década de 60 do século passado, uma campanha publicitária ofereceu um prêmio de US\$10.000,00 para quem resolve-se o TSP, considerando 33 cidades dos EUA. Ainda segundo estimativas do autor, mesmo o super-computador IBM Roadrunner Cluster, considerado um dos mais rápidos do mundo, levaria enfadonhos 28 trilhões de anos para analisar todas os possíveis trajetos [52].

Em ciência da computação, o tempo de processamento para a resolução de um dado problema, em geral, cresce com o tamanho do problema. Mais especificamente, esse tempo é definido como sendo aquele obtido no pior caso da execução do algoritmo para a resolução do problema e é denotado por $T(n)$, onde n é a quantidade de dados de entrada. Classifica-se como *problema-P* aquele cujo tempo de resolução computacional aumenta polinomialmente com o tamanho n do problema, ou seja, $T(n) \sim O(n^k)$, sendo k uma constante. Em geral, problemas da classe P são considerados computacionalmente fáceis de tratar e de resolução relativamente rápida. A resolução exata do TSP por meio da busca pela força bruta, por sua vez, está longe de ser um *problema-P*, visto que requer um tempo computacional proporcional à $O(n!)$.

Em 1983, Kirkpatrick *et al.* propõem o algoritmo recozimento simulado (SA)³ para resolver o TSP [53]. No método proposto, a dificuldade encontrada pela busca

³*Simulated Annealing*, no título original em inglês.

através da força bruta é contornada tratando-se o TSP como um problema de otimização estocástico. O algoritmo SA baseia-se no mesmo processo iterativo de amostragem e critério de aceitação propostos por Metropolis *et al.*, mas com um importante diferencial: é introduzido um cronograma de resfriamento da temperatura T (*cooling schedule*) a fim de controlar a estocasticidade do processo. A ideia é fazer uma analogia com o processo de “recozimento” (*annealing*), utilizado na metalurgia para obtenção de materiais com alto grau de dureza. Essa técnica consiste no aquecimento de um sólido até seu ponto de fusão, seguido de um gradual resfriamento até sua recristalização. Durante a diminuição gradual da temperatura, os átomos se organizam a fim de formarem uma estrutura cristalina com energia mínima.

Em um problema de otimização, essa analogia é feita considerando a função objetivo $f(\mathbf{x})$ como sendo a energia e o vetor $\mathbf{x}$ representando uma dada configuração dos átomos do sistema. Especificamente no algoritmo SA, parte-se de uma solução inicial arbitrária $\mathbf{x}_0$ a uma dada temperatura inicial T_0 pré-definida. Mantendo a temperatura fixa, realiza-se um processo iterativo de geração de novas soluções candidatas. Cada nova solução $\mathbf{x}_{\text{new}}$ é confrontada com a solução anterior $\mathbf{x}_{\text{old}}$ e aceita com probabilidade

$$p(\mathbf{x}_{\text{old}} \leftarrow \mathbf{x}_{\text{new}}) = \begin{cases} 1, & \text{se } \Delta f \leq 0, \\ e^{-\Delta f/T}, & \text{se } \Delta f > 0, \end{cases} \quad (3.6)$$

onde $\Delta f = f(\mathbf{x}_{\text{new}}) - f(\mathbf{x}_{\text{old}})$ é a variação da função objetivo ⁴.

É fundamental notar que, quando $f(\mathbf{x}_{\text{new}}) > f(\mathbf{x}_{\text{old}})$, a probabilidade $p(\mathbf{x}_{\text{old}} \leftarrow \mathbf{x}_{\text{new}})$, dada pela Eq. (3.6), depende tanto da temperatura T quanto da diferença $\Delta f = f(\mathbf{x}_{\text{new}}) - f(\mathbf{x}_{\text{old}})$. Especificamente, quanto maior for o aumento na função objetivo devido à nova solução, menor será a probabilidade dela ser aceita. Já em relação à temperatura ocorre o inverso, ou seja, menores temperaturas tornam menos provável a aceitação de soluções que geram aumento na função objetivo, como mostra a Fig. (3.3).

Desta forma, analogamente ao processo de “recozimento” da siderurgia, após o algoritmo tentar um número suficiente de soluções candidatas, a temperatura é

⁴Na Eq. (3.6), a constante de Boltzmann k_B é renormalizada e adotada com valor unitário para que a razão $\Delta f/T$ seja adimensional.

Figura 3.3 – Critério de Metropolis: probabilidade $p(\Delta f, T)$ de aceitar soluções que geram aumento na função objetivo $f(\mathbf{x})$ em função da diferença $\Delta f = f(\mathbf{x}_{\text{new}}) - f(\mathbf{x}_{\text{old}})$ e da temperatura T .

resfriada e um novo processo iterativo de busca de novas soluções se inicia. Com isso, no início do processo de otimização, quando a temperatura é alta, há uma grande probabilidade de aceitação de soluções que aumentam a função objetivo e o algoritmo consegue explorar amplamente o espaço de soluções. À medida que a temperatura é resfriada, essa probabilidade diminui e a busca torna-se cada vez mais local. Finalmente, quando a temperatura for pequena o suficiente ($T \rightarrow 0$), a probabilidade de aceitar soluções que aumentam a função objetivo tende para zero.

É essa possibilidade de aceitação de soluções que aumentam a função objetivo que diferencia o algoritmo SA dos demais métodos de otimização. Além disso, a estocasticidade desse mecanismo de aceitação é controlado pela temperatura T que, por sua vez, é ajustada a cada iteração através de um cronograma de resfriamento adequado. Tudo isso, torna o algoritmo capaz de escapar de bacias de mínimos locais e encontrar a bacia que contém o mínimo global, como ilustrado na Fig. (3.2).

3.5 A distribuição de visitação e o cronograma de resfriamento

Existem diversos parâmetros e procedimentos que devem ser cuidadosamente definidos para um bom desempenho do algoritmo SA. Entre eles estão a temperatura inicial, o número de tentativas de novas soluções antes de resfriar a temperatura, a sistemática de geração de cada nova solução (*distribuição de visitação*) e o cronograma de resfriamento da temperatura (*cooling schedule*).

A distribuição de visitação corresponde à regra adotada para gerar cada nova solução x_{new} a partir da solução atual x_{old} . Considerando um problema de otimização contínuo, essa regra pode ser escrita, de maneira geral, como

$$x_{\text{new}} = x_{\text{old}} + \sigma\xi, \quad (3.7)$$

onde ξ é um número aleatório que segue uma distribuição de probabilidade pré-definida, $\xi \sim G(x)$, e σ é a amplitude (desvio padrão) do deslocamento da nova solução em relação à solução anterior. No trabalho de Metropolis *et al.* [46], por exemplo, a posição de cada molécula na nova configuração do sistema é escolhida dentro de um intervalo pré-definido com uma distribuição de probabilidade *uniforme* centrado na posição atual. Neste caso, o número aleatório ξ da Eq. 3.7 segue a distribuição

$$G_U(x) = \begin{cases} 1/2, & \text{se } -1 \leq x \leq 1, \\ 0, & \text{se } x < -1 \text{ ou } x > 1, \end{cases} \quad (3.8)$$

sendo σ a amplitude de visitação em torno da solução atual.

Pode-se também explorar o espaço de busca de forma menos restrita adotando-se uma visitação *gaussiana*. Para isso, ξ segue uma distribuição normal padrão

$$G_N(x) = \frac{e^{-x^2/2}}{\sqrt{2\pi}}, \quad (3.9)$$

e σ assume o papel do desvio padrão da distribuição de visitação.

Independente da distribuição adotada, a estocasticidade do processo de geração de novas soluções pode ser controlada durante o processo de otimização. Para isso, define-se a amplitude (desvio padrão) da distribuição de visitação como função da temperatura T , ou seja, $\sigma = \sigma(T)$. Desta forma, a temperatura assume um papel fundamental no algoritmo SA, pois define tanto a probabilidade de aceitação de soluções que geram aumento na função objetivo, quanto a amplitude (desvio padrão) da distribuição de visitação.

A escolha adequada de um cronograma de resfriamento é, neste contexto, crucial para garantir a convergência para a solução ótima num tempo computacional aceitável. De fato, uma diminuição excessivamente rápida da temperatura acaba restringindo a busca precocemente e o processo corre o risco de ficar aprisionado em uma bacia de mínimo local. Por outro lado, um resfriamento muito lento pode onerar computacionalmente o processo de busca [54, 55]. Portanto, deve-se escolher um resfriamento que forneça o melhor compromisso entre possibilidade de exploração do espaço de busca e o tempo computacional.

O algoritmo original proposto por Kirkpatrick *et al.* [53] para resolver o TSP adotou o *resfriamento geométrico*, no qual a temperatura $T^{(t)}$ cai exponencialmente com o tempo t ,

$$T^{(t)} = \alpha^t T^{(0)}, \quad (3.10)$$

onde $T^{(0)}$ é a temperatura inicial ($t = 0$) e $\alpha \in (0, 1)$ é a taxa de resfriamento. Nos trabalhos de Kim *et al.* [56], Herrera [57] e Menin *et al.* [4], por exemplo, utilizou-se o algoritmo SA para resolver o problema inverso da tomografia de impedância elétrica adotando-se o resfriamento geométrico com taxa de resfriamento variando entre $\alpha = 0.8$ e $\alpha = 0.99$.

Em 1984, Geman & Geman [49] propõem um método para restaurar imagens degradadas através de uma busca estocástica que combina conceitos de probabilidade Bayesiana com o critério de aceitação de Metropolis. O ponto de destaque neste trabalho, no entanto, é a proposta de um resfriamento logarítmico,

$$T^{(t)} = \frac{T^{(0)}}{\ln(1+t)}, \quad (3.11)$$

e a prova matemática de que este cronograma, combinado com o critério de Metropolis (Eq. 3.6), garante a convergência para o mínimo global, no limite $t \rightarrow \infty$. Em 1988, B. Hajek otimiza a proposta de Geman & Geman e mostra que o valor da temperatura inicial $T^{(0)}$ na Eq. (3.11) deve ser maior ou igual do que a “profundidade” da bacia de mínimo local mais profunda [58].

Considerando o alto custo computacional de um resfriamento logarítmico, Szu & Hartley [59] apresentam, em 1987, o algoritmo de recozimento simulado rápido (FSA).⁵ Ao invés de utilizar uma distribuição de visitação uniforme ou gaussiana (visitação local), Szu & Hartley propõem que a geração de novas soluções sigam uma distribuição de probabilidade de Cauchy-Lorentz

$$G_C(x) = \frac{1}{\pi(1+x^2)}. \quad (3.12)$$

Diferentemente da distribuição normal dada pela Eq. (3.9), a distribuição de Cauchy-Lorentz não tem segundo momento (variância) definido. Essa particularidade permite que, ocasionalmente, soluções sejam geradas longe da solução atual, processo usualmente conhecido como *voos de Levy*, dificultando o aprisionamento precoce em bacias de mínimo local e permitindo uma busca mais irrestrita pelo espaço de soluções. Segundo Szu & Hartley, isso permite fazer um resfriamento mais rápido e ainda assim garantir a convergência para o mínimo global. Os autores propõem, então, o uso de um resfriamento no qual a temperatura decresce de acordo com uma função hiperbólica da iteração t ,

$$T^{(t)} = \frac{T^{(0)}}{1+t}. \quad (3.13)$$

Para avaliar a eficiência do método, Szu & Hartley realizam testes numéricos utilizando a função objetivo unidimensional $f(x) = x^4 - 16x^2 + 5x$, que contém dois mínimos, um local em $x \approx 2.75$ e outro global em $x \approx -2.9$. Os resultados mostram que o *Simulated Annealing Rápido* consegue escapar mais facilmente da bacia do mínimo local e converge mais rapidamente para o mínimo global do que o *Simulated Annealing* clássico.

Uma breve revisão sobre os principais cronogramas de resfriamento pode ser

⁵ *Fast Simulated Annealing*, no título original em inglês.

encontrada na Ref. [55]. Neste trabalho, os autores também propõem uma forma alternativa de definir a temperatura T ,

$$T = \frac{\overline{\Delta f}}{\ln(p)}, \quad (3.14)$$

onde $\overline{\Delta f}$ é a média da diferença na função objetivo nos últimos m passos nos quais houve decréscimo no valor de f e p é probabilidade de aceitação de soluções que geram aumento na função objetivo. Com isso, os autores propõem que o resfriamento da temperatura T seja realizado indiretamente, diminuindo-se o valor de p através de um fator pré-definido (por exemplo, 0.99), a partir de um valor inicial próximo de 1.

3.6 Algoritmo de recozimento simulado generalizado

Como discutido no Cap. 2, em seu trabalho de em 1988, Tsallis apresenta uma generalização para a entropia de Boltzmann-Gibbs, introduzindo um parâmetro $q \in \mathbb{R}$,

$$S_q = k_B \frac{1 - \sum_{i=1}^n p_i^q}{q - 1}, \quad (3.15)$$

onde $n \in \mathbb{N}$ é o número de possíveis configurações (microestados) de um sistema, $\{p_i\}$ as probabilidades associadas a cada configuração e k_B é uma constante [32]. No mesmo trabalho, Tsallis também apresenta uma generalização do *ensemble canônico*, através da distribuição de probabilidade generalizada,

$$p_i = \frac{[1 - \beta(q-1)E_i]^{1/(q-1)}}{\sum_{i=1}^n [1 - \beta(q-1)E_i]^{1/(q-1)}}, \quad (3.16)$$

onde E_i é a energia do sistema no estado i , e que fornece a distribuição de Boltzmann (Eq. 2.19) como caso particular, quando $q \rightarrow 1$.

Nesse contexto, Tsallis & Stariolo propõem, em 1996, o algoritmo de recozimento simulado generalizado (GSA) ⁶ [60]. Através da introdução de dois parâ-

⁶ *Generalized Simulated Annealing*, no título original em inglês.

metros, $q_A \in \mathbb{R}$ e $q_V \in \mathbb{R}$, relacionados ao critério de aceitação e à distribuição de visitação, o GSA unifica o SA e o FSA em uma única formulação.

A partir da distribuição de probabilidade dada pela Eq. (3.16), Tsallis & Stariolo definem a probabilidade de aceitar uma nova solução $\mathbf{x}_{\text{new}}$, dada a solução atual $\mathbf{x}_{\text{old}}$, como

$$p_{q_A}(\mathbf{x}_{\text{old}} \leftarrow \mathbf{x}_{\text{new}}) = \begin{cases} 1, & \text{se } \Delta f \leq 0, \\ \frac{1}{[1 + (q_A - 1)\Delta f/T_A^{(t)}]^{1/(q_A-1)}}, & \text{se } \Delta f > 0, \end{cases} \quad (3.17)$$

onde $\Delta f = f(\mathbf{x}_{\text{new}}) - f(\mathbf{x}_{\text{old}})$ é a variação da função objetivo e $T_A^{(t)} > 0$ é a temperatura de aceitação na iteração t . Em seguida, os autores unificam as distribuições gaussiana e de Cauchy, definindo uma distribuição de visitação generalizada,

$$G_{q_V}(x) = \left(\frac{q_V - 1}{\pi}\right)^{1/2} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{q_V-1}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{q_V-1} - \frac{1}{2}\right)} \times \frac{[T_V^{(t)}]^{-1/(3-q_V)}}{\left[1 + (q_V - 1)\frac{x^2}{[T_V^{(t)}]^{2/(3-q_V)}}\right]^{1/(q_V-1)}}, \quad (3.18)$$

e propõem uma generalização para o cronograma de resfriamento da temperatura,

$$T_V^{(t)} = T_V^{(0)} \frac{2^{q_V-1} - 1}{(1+t)^{q_V-1} - 1}, \quad (3.19)$$

onde $T_V^{(t)}$ é a temperatura de visitação na iteração t .

Para avaliar o GSA, Tsallis & Stariolo apresentam simulações numéricas nas quais deve-se minimizar a função $f(x) = \sum_{i=1}^4 (x_i^2 - 8)^2 + 5 \sum_{i=1}^4 x_i + E_o$ (sendo $E_o \approx 57,3$). Neste ponto, é importante notar que os autores fixam $q_A = 1$ pra todas as simulações, variando-se apenas o valor de q_V . Desta forma, o critério de aceitação generalizado proposto na Eq. (3.17) não é analisado, visto que ele reassume a forma do critério de Metropolis clássico (Eq. 3.6) no limite $q_A \rightarrow 1$. Portanto, os autores se restringiram em analisar apenas a distribuição de visitação (Eq. 3.18) e o cronograma de resfriamento (Eq. 3.19), mostrando que, para $q_V = 2.5$ e $q_V = 2.7$, o GSA converge mais rapidamente e com menos flutuações na função objetivo do que para $q_V = 1$ (*simulated annealing clássico*) e $q_V = 2$ (*simulated annealing rápido*).

O critério de aceitação proposto na Eq. (3.17) foi amplamente discutido em diversos trabalhos encontrados na literatura, principalmente porque ele não obedece o princípio do balanço detalhado (PBD). Na verdade, um ano antes da publicação de Tsallis & Stariolo de 1996, T. J. Penna [61] apresentou uma análise da Eq. (3.17), que já havia sido proposta em 1994 [62], em função do parâmetro q_A , na resolução do problema do caixeiro viajante. Adotando um resfriamento geométrico da temperatura (Eq. 3.10), com $\alpha = 0.9$, Penna conclui que o desempenho do algoritmo melhora a medida que o valor de q_A diminui em direção a $q_A \rightarrow -\infty$.

Em 1996, I. Andricioaei & J. E. Straub [63] reformulam o critério de Tsallis & Stariolo e definem a probabilidade p_{q_A} de aceitar uma nova solução como

$$p_{q_A} = \min \left[1, \left(\frac{1 - [1 - q_A(T)]\beta f_{\text{new}}}{1 - [1 - q_A(T)]\beta f_{\text{old}}} \right)^{q_A(T)/[1 - q_A(T)]} \right], \quad (3.20)$$

onde f_{new} e f_{old} são os valores da função objetivo após e antes da tentativa da nova solução, respectivamente. Os autores também propõem que o parâmetro $q_A(T)$ decresça monotonicamente com a temperatura T , de forma que $\lim_{T \rightarrow 0} q_A(T) = 1$.

No ano seguinte, Xiang *et al.* [64] aplicam o GSA para resolver o problema do Modelo de Thomson, que consiste em distribuir um número N de cargas elétricas discretas em uma esfera de forma que a energia potencial do sistema seja mínima. Mas, diferentemente do GSA de Tsallis & Stariolo, os autores propõem que o parâmetro q_A na Eq. (3.17) varie linearmente com o tempo, $q_A = -3 - \lambda t$, onde λ é um parâmetro que deve ser ajustado de acordo com o problema. Através de simulações numéricas considerando $N = 12$ e $N = 51$, os autores mostram que, para $\lambda = 0.85$, o GSA converge mais rapidamente do que para um valor fixo de q_A .

Ainda em 1997, U. H. E. Hansmann [65] adota uma formulação alternativa para o critério de Metropolis e propõe um algoritmo para minimizar a energia de uma pequena molécula polipeptídica⁷. Para isso, Hansmann deriva uma expressão para o valor ótimo do parâmetro de generalização, $q_A = 1 + 1/n_F$, sendo n_F o número de graus de liberdade da molécula, e reescreve o critério de Tsallis como $p_{q_A} = [1 + \beta(f_{\text{new}} - f_0)/n_F]^{-n_F - 1}$, onde f_{new} é a energia para uma dada configuração da molécula e f_0 é a energia do estado fundamental. Os resultados numéricos obtidos

⁷O autor usa como exemplo a molécula Met-enkephalin (Tyr-Gly-Gly-Phe-MEt), cuja energia do estado fundamental é ≈ -11.0 kcal/mol.

pelo autor mostram que o algoritmo proposto atinge a energia do estado fundamental da molécula com mais frequência do que o SA clássico.

Já em 2009, N. Crokidakis *et al.* [66] aplicam a estatística não-extensiva de Tsallis ao modelo de spin de Ising para calcular magnetização, susceptibilidade magnética e calor específico em função da temperatura, considerando o critério de aceitação

$$p_{q_A} = \left[\frac{e_{q_A}^{-f_{\text{new}}/kT}}{e_{q_A}^{-f_{\text{old}}/kT}} \right]^{q_A}, \quad (3.21)$$

onde $e_{q_A}(x) = [1 + (1 - q_A)x]_+^{1/(1-q_A)}$.

A proposta de Crokidakis *et al.* é contestada, em 2012, no trabalho de R. Silva *et al.* [67]. Neste, os autores argumentam que o critério dado pela Eq. (3.21) não segue o balanço detalhado de energia na equação mestra, visto que

$$\frac{e_q^{-E_{\text{new}}/kT}}{e_q^{-E_{\text{old}}/kT}} \neq e_q^{-(E_{\text{new}} - E_{\text{old}})/kT}, \quad (3.22)$$

e mostram que o método é não-local, ou seja, a alteração em um spin da rede requer que a energia de todo o sistema seja reavaliada. Considerando as funções $\tilde{q}$ -exponencial e $\tilde{q}$ -logaritmo (ver Apêndice A), Silva *et al.* propõem uma nova *equação mestra*, que rege as taxas de transições de um spin entre dois estados diferentes, e reformulam o critério de aceitação (Eq. 3.21), recuperando a localidade e o princípio do balanço detalhado de energia.

3.7 Nova generalização do algoritmo de recozimento simulado

Apresentamos agora a nossa proposta de generalização do algoritmo de recozimento simulado ($\tilde{q}$ -SA), baseada nas funções $\tilde{q}$ -logaritmo e $\tilde{q}$ -exponencial. Como apresentamos no Cap. 2, essas funções generalizadas foram propostas por Arruda *et al.* [38] e Martinez *et al.* [39]. A função $\tilde{q}$ -logaritmo, definida como a área sob a

curva $f(t) = 1/t^{1-\tilde{q}}$ no intervalo entre $t = 1$ e $t = x$, é dada por

$$\ln_{\tilde{q}}(x) = \begin{cases} \frac{x^{\tilde{q}} - 1}{\tilde{q}}, & \text{se } \tilde{q} \neq 0, \\ \ln(x), & \text{se } \tilde{q} = 0, \end{cases} \quad (3.23)$$

enquanto que a função $\tilde{q}$ -exponencial, inversa da função $\ln_{\tilde{q}}(x)$, é

$$\exp_{\tilde{q}}(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } \tilde{q}x < -1, \\ \lim_{\tilde{q}' \rightarrow \tilde{q}} (1 + \tilde{q}'x)^{1/\tilde{q}'}, & \text{se } \tilde{q}x \geq -1, \end{cases} \quad (3.24)$$

onde $\tilde{q} \in \mathbb{R}$ é um parâmetro de generalização. Lembrando que uma discussão mais detalhada dessas funções generalizadas é apresentada no Apêndice A.

Como vimos, o processo de otimização através do algoritmo de recozimento simulado é realizado iterativamente e é fundamentado em três pilares:

- i. distribuição de visitação para geração de soluções candidatas;
- ii. critério de aceitação de cada nova solução candidata e;
- iii. cronograma de resfriamento das temperaturas para controlar a estocasticidade do processo.

A partir da definição da função exponencial generalizada (Eq. 3.24), podemos reescrever a Eq. (3.16) e definir a probabilidade $p(\mathbf{x}_i)$ de encontrar um sistema em uma configuração $\mathbf{x}_i$ como

$$p(\mathbf{x}_i) = \frac{\exp_{\tilde{q}}[-\beta f(\mathbf{x}_i)]}{\sum_{i=1}^n \exp_{\tilde{q}}[-\beta f(\mathbf{x}_i)]}. \quad (3.25)$$

Considerando duas soluções candidatas, $\mathbf{x}_{\text{old}}$ e $\mathbf{x}_{\text{new}}$, e sendo $\beta = 1/T_a$, onde T_a é a temperatura de visitação, vamos generalizar o critério de Metropolis, introduzindo um parâmetro $\tilde{q}_a \in \mathbb{R}$. A partir da operação divisão,

$$a \oslash_{\tilde{q}} b = [a^{\tilde{q}} - b^{\tilde{q}} + 1]^{1/\tilde{q}},$$

mostrada na Eq. (A.19) do Apêndice A, definimos a probabilidade $p_{\tilde{q}_a}(\mathbf{x}_{\text{new}} \leftarrow \mathbf{x}_{\text{old}})$ de aceitar uma nova solução $\mathbf{x}_{\text{new}}$, dada a solução atual $\mathbf{x}_{\text{old}}$, como

$$p_{\tilde{q}_a}(\mathbf{x}_{\text{new}} \leftarrow \mathbf{x}_{\text{old}}) = p(\mathbf{x}_{\text{new}}) \oslash_{\tilde{q}_a} p(\mathbf{x}_{\text{old}}) = \exp_{\tilde{q}_a} \left[-\frac{f(\mathbf{x}_{\text{new}})}{T_a} \right] \oslash_{\tilde{q}_a} \exp_{\tilde{q}_a} \left[-\frac{f(\mathbf{x}_{\text{old}})}{T_a} \right].$$

Usando a relação

$$\exp_{\tilde{q}}(a) \oslash_{\tilde{q}} \exp_{\tilde{q}}(b) = \exp_{\tilde{q}}(a - b),$$

também definida no Apêndice A, obtemos

$$p_{\tilde{q}_a}(\mathbf{x}_{\text{new}} \leftarrow \mathbf{x}_{\text{old}}) = \exp_{\tilde{q}_a} \left[-\frac{f(\mathbf{x}_{\text{new}}) - f(\mathbf{x}_{\text{old}})}{T_a} \right],$$

que resulta no critério de Metropolis generalizado

$$p_{\tilde{q}_a}(\mathbf{x}_{\text{new}} \leftarrow \mathbf{x}_{\text{old}}) = \begin{cases} 1, & \text{se } f(\mathbf{x}_{\text{new}}) \leq f(\mathbf{x}_{\text{old}}), \\ \exp_{\tilde{q}_a} \left(-\frac{\Delta f}{T_a} \right), & \text{se } f(\mathbf{x}_{\text{new}}) > f(\mathbf{x}_{\text{old}}), \end{cases} \quad (3.26)$$

onde $\Delta f = f(\mathbf{x}_{\text{new}}) - f(\mathbf{x}_{\text{old}})$ é a variação da função objetivo. Com essa formulação, o critério de Metropolis clássico (Eq. 3.6) é recuperado para $\tilde{q}_a = 0$.

Para gerar cada nova solução $\mathbf{x}_{\text{new}}$, propomos que cada elemento $x_{\text{old}}^{(k)}$ da solução atual $\mathbf{x}_{\text{old}}$ seja alterado, um de cada vez, transformando-se em um novo elemento $x_{\text{new}}^{(k)}$ de acordo com a distribuição

$$x_{\text{new}}^{(k)} = x_{\text{old}}^{(k)} + T_v G_{\tilde{q}_v}(x), \quad \text{para } k = 1, 2, \dots, n, \quad (3.27)$$

onde T_v é a temperatura de visitaço e

$$G_{\tilde{q}_v}(x) = \sqrt{\frac{\tilde{q}_v}{2\pi}} \frac{\Gamma(1/\tilde{q}_v)}{\Gamma(1/\tilde{q}_v - 1/2)} \exp_{-\tilde{q}_v} \left(-\frac{x^2}{2} \right) \quad (3.28)$$

 a funo densidade de probabilidade (pdf) gaussiana generalizada, sendo $\tilde{q}_v$ o parmetro de generalizao da distribuio de visitao.

De acordo com Martinez *et al.*, o segundo momento da pdf dada pela Eq. (3.28)

$$\langle x^2 \rangle_{\tilde{q}_v} = \frac{2}{2 - 3\tilde{q}_v}, \quad (3.29)$$

e só é positivo definido para $\tilde{q}_v < 2/3$ [39]. Consequentemente, o mesmo limite aplica-se ao desvio padrão. Essa possibilidade de divergência do segundo momento da Eq. (3.28) aumenta a eficácia do processo de otimização, pois a escolha adequada do parâmetro $\tilde{q}_v$ permite ao algoritmo transitar de uma busca local para uma busca global e vice-versa. Também pode-se notar que a Eq. (3.28) retorna à distribuição normal tradicional (Eq. 3.9) e à distribuição de Cauchy (Eq. 3.12) para $\tilde{q}_v = 0$ e $\tilde{q}_v = 1$, respectivamente. No trabalho de R. Tinós & S. Yang, por exemplo, a distribuição gaussiana generalizada é usada para gerar novas gerações no algoritmo evolucionário, com o parâmetro $\tilde{q}_v$ podendo ser adaptado durante o processo [68].

A estocasticidade do processo de otimização (critério de aceitação e distribuição de visitação) é controlada pelo cronograma de resfriamento das temperaturas T_a e T_v . Em nosso algoritmo, propomos que essas temperaturas sejam resfriadas com o tempo t segundo os cronogramas

$$T_a^{(t)} = T_a^{(0)} \frac{\ln_{\tilde{q}_a}(2)}{\ln_{\tilde{q}_a}(t+1)}, \quad (3.30)$$

$$T_v^{(t)} = T_v^{(0)} \frac{\ln_{\tilde{q}_v}(2)}{\ln_{\tilde{q}_v}(t+1)}. \quad (3.31)$$

A partir das Eqs. (3.30) e (3.31), pode-se recuperar os cronogramas de resfriamento logarítmico tradicional (Eq. 3.11) e de Szu & Hartley (Eq. 3.13), fazendo $\tilde{q}_a = \tilde{q}_v = 0$ e $\tilde{q}_a = \tilde{q}_v = 1$, respectivamente. Com relação à temperatura de visitação, T_a , pode-se ainda optar pelo resfriamento geométrico, no qual a temperatura cai exponencialmente com o tempo, $T_a^{(t)} = \alpha^t T_a^{(0)}$, onde $\alpha \in (0, 1)$ é a taxa de resfriamento (Eq. 3.10). A Fig. (3.4) ilustra o comportamento da pdf $\tilde{q}$ -gaussiana, dada pela Eq. (3.28), e do cronograma de resfriamento generalizado, dado pela Eq. (3.31), para alguns valores de $\tilde{q}_v$.

A escolha adequada para as temperaturas iniciais de aceitação e visitação também é importante para o desempenho do algoritmo. A temperatura inicial de visitação $T_v^{(0)}$, por exemplo, deve ser definida de forma que, no início do processo de otimização, o algoritmo consiga explorar amplamente o espaço de soluções. Para isso, deve-se utilizar informações *a priori* sobre o domínio $\mathcal{D}$ e definir $T_v^{(0)}$ da ordem da dimensão desse domínio, que dependerá das especificidades do problema.

Figura 3.4 – Comportamento, para $\tilde{q}_v = 0$, $\tilde{q}_v = 2/3$, $\tilde{q}_v = 1$ e $\tilde{q}_v = 4/3$, da (a) distribuição de visitação gaussiana generalizada, $G_{\tilde{q}_v}(x)$, em função de x (Eq. 3.28), e (b) da temperatura de visitação T_v , em função da iteração t , considerando a cronograma de resfriamento generalizado (Eq. 3.31).

Já para garantir que o processo consiga escapar de bacias de mínimos locais, a temperatura inicial de aceitação, $T_a^{(0)}$, deve ser da ordem da profundidade da bacia de mínimo local mais profunda. Neste caso, propomos em nosso algoritmo uma caminhada aleatória inicial, na qual μ soluções, $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_\mu$, são geradas, através de uma distribuição uniforme, varrendo todo o domínio $\mathcal{D}$. Calculando-se os valores $f(\mathbf{x}_1), f(\mathbf{x}_2), \dots, f(\mathbf{x}_\mu)$, determina-se a maior diferença encontrada para a função objetivo, $\Delta f_\mu = \max [f(\mathbf{x}_i)] - \min [f(\mathbf{x}_i)]$, para $i = 1, 2, \dots, \mu$. Finalmente, escolhe-se uma probabilidade inicial, $p_0 \in (0, 1)$, de aceitar soluções que aumentam a função objetivo e, usando o critério dado pela Eq. (3.26),

$$p_{\tilde{q}_a}(\mathbf{x}_{\text{new}} \leftarrow \mathbf{x}_{\text{old}}) = \exp_{\tilde{q}_a}(-\Delta f/T_a),$$

$$p_0 = \exp_{\tilde{q}_a}(-\Delta f_\mu/T_a^{(0)}),$$

$$\ln_{\tilde{q}_a}(p_0) = -\Delta f_\mu/T_a^{(0)},$$

definimos a temperatura inicial de visitação como

$$T_a^{(0)} = -\frac{\Delta f_\mu}{\ln_{\tilde{q}_a}(p_0)}. \quad (3.32)$$

Apresentamos agora o nosso algoritmo de recozimento simulado generalizado, $\tilde{q}$ -SA. Sendo um método de otimização iterativo, deve-se adotar um critério de parada. Em geral, podemos ter duas opções: i) interromper o processo após um número máximo de iterações pré-definido ou ii) interromper o processo quando o erro obtido for menor do que um valor mínimo desejado. A despeito de nosso algoritmo aceitar qualquer um dos dois critérios, nos nossos estudos escolhemos o primeiro. Com isso, fixamos o custo computacional e avaliamos o algoritmo por meio dos erros finais obtidos nas simulações. Considerando t_{max} o número máximo de iterações e r o número de tentativas de novas soluções a cada iteração t , segue o algoritmo:

1. escolha os parâmetros da simulação: $t_{\max}$, r , $\tilde{q}_a$, $\tilde{q}_v$ e α ;
2. defina a temperatura inicial, $T_v^{(0)}$, a partir das dimensões do domínio $\mathcal{D}$;
3. gere μ soluções aleatórias $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_\mu$ e calcule $f(\mathbf{x}_1), f(\mathbf{x}_2), \dots, f(\mathbf{x}_\mu)$;
4. calcule $\Delta f_\mu = \max [f(\mathbf{x}_i)] - \min [f(\mathbf{x}_i)]$, para $i = 1, 2, \dots, \mu$;
5. defina a temperatura inicial, $T_a^{(0)}$, usando a Eq. (3.32);
6. gere uma solução inicial aleatória $\mathbf{x}_{\text{old}}$;
7. calcule o valor da função objetivo $f(\mathbf{x}_{\text{old}})$;
8. para t de 1 até $t_{\max}$, faça:
 - (a) repetir r vezes os seguintes passos:
 - i. gere uma nova solução $\mathbf{x}_{\text{new}}$, usando a Eq. (3.27);
 - ii. calcule o novo valor da função objetivo $f(\mathbf{x}_{\text{new}})$;
 - iii. faça $\Delta f = f(\mathbf{x}_{\text{new}}) - f(\mathbf{x}_{\text{old}})$;
 - iv. considere o critério dado pela Eq. (3.26):
 - se $\Delta f \leq 0$, então $\mathbf{x}_{\text{old}} = \mathbf{x}_{\text{new}}$;
 - senão, se $\exp_{\tilde{q}_a} \left(-\Delta f / T_a^{(t)} \right) > X \sim U(0, 1)$, então $\mathbf{x}_{\text{old}} = \mathbf{x}_{\text{new}}$;
 - (b) diminua a temperatura $T_a^{(t)}$ usando a Eq. (3.30) ou a Eq. (3.10);
 - (c) diminua a temperatura $T_v^{(t)}$ usando a Eq. (3.31);
9. saída dos resultados

3.8 Desempenho do algoritmo proposto

Nesta seção, apresentamos algumas experiências numéricas realizadas para avaliar nosso algoritmo, $\tilde{q}$ -SA. O algoritmo proposto (Seção 3.7) foi implementado, em linguagem C, e três funções objetivos foram escolhidas para testar o código. Para a geração de números aleatórios com distribuição $\tilde{q}$ -gaussiana, criamos uma sub-rotina com o método Box-Müller generalizado, proposto por W. Thistleton *et al.* [69]. Os fundamentos do método e os detalhes da implementação da sub-rotina são mostrados no Apêndice B.

A primeira função objetivo escolhida, utilizada como exemplo no trabalho de

Szu & Hartley [59], corresponde a uma função unidimensional, dada por

$$f_1(x) = x^4 - 16x^2 + 5x, \quad (3.33)$$

e que possui dois mínimos, um local e outro global, em $x_* \approx -2.9$, no qual o valor da função é $f_1(x_*) \approx -78.3$, como mostra a Fig. (3.5-a). A segunda função corresponde a uma versão quadridimensional da Eq. (3.33), estudada no trabalho de Tsallis & Stariolo [60], dada por

$$f_2(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^4 (x_i^2 - 8)^2 + 5 \sum_{i=1}^4 x_i + 57.3, \quad (3.34)$$

Essa função, por sua vez, possui quinze mínimos locais e um mínimo global, em $\mathbf{x}_* = [-2.9, -2.9, -2.9, -2.9]$, cujo valor é $f_2(\mathbf{x}) \approx 0$. Finalmente, escolhemos uma função n -dimensional com múltiplos mínimos locais, dada por

$$f_3(\mathbf{x}) = 4189.829n - \sum_{i=1}^n \sin\left(\frac{\pi}{2} \sqrt{|x_i|}\right) + 100 \sum_{i=1}^n \sin\left(\frac{\pi}{10} x_i\right). \quad (3.35)$$

Para $n = 1$, essa função possui um mínimo global em $x_* \approx 435.4$ com valor de função $f_3(x_*) \approx -106.1$, como mostra a Fig. (3.5-b). Entretanto, para testar a robustez do nosso algoritmo, escolhemos $n = 10$ e, neste caso, o valor mínimo da função dada pela Eq. (3.35) ocorre em $\mathbf{x}_* = [435.4, 435.4, \dots, 435.4]$ e vale $f_3(\mathbf{x}_*) \approx -1061$.

O objetivo principal dos experimentos foi avaliar o desempenho do algoritmo em função dos parâmetros $\tilde{q}_a$ e $\tilde{q}_v$ e em função dos dois tipos de resfriamento da temperatura de aceitação: geométrico (Eq. 3.10) e $\tilde{q}_a$ -logarítmico (Eq. 3.30). Para cada tipo de resfriamento e para cada função objetivo de referência $f_i(\mathbf{x})$, para $i = 1, 2$ e 3 , selecionamos 10×10 pares $(\tilde{q}_a, \tilde{q}_v)$ diferentes, no intervalo $[0, 0.2, 0.4, \dots, 1.8] \times [0, 0.2, 0.4, \dots, 1.8]$. Para cada par $(\tilde{q}_a, \tilde{q}_v)$, o programa foi executado 50 vezes, considerando $t_{\max} = 200$, $r = 10$ e $p_0 = 0.9$, obtendo-se 50 valores mínimos para as funções objetivos, com os quais calculou-se as médias $\langle f_i(x) \rangle$. Também determinamos a taxa percentual de sucesso, que representa o numero relativo de vezes que o algoritmo atingiu a bacia de minimo global. Os resultados para as funções objetivos $f_1(x)$, $f_2(\mathbf{x})$ e $f_3(\mathbf{x})$ são mostrados, respectivamente, nas Figs. (3.6), (3.7) e (3.8).

É notável que o desempenho do algoritmo é bastante influenciada, tanto pelos cronogramas de resfriamento, quanto pelos parâmetros $\tilde{q}_a$ e $\tilde{q}_v$. Além disso, pode-se

Figura 3.5 – Funções objetivos de referência (a) $f_1(x) = x^4 - 16x^2 + 5x$, e $f_3(\mathbf{x}) = 4189.829n - \sum_{i=1}^n \sin\left(\frac{\pi}{2} \sqrt{|x_i|}\right) + 100 \sum_{i=1}^n \sin\left(\frac{\pi}{10} x_i\right)$, com $n = 1$.

perceber que, para todas as funções objetivos estudadas, a eficiência do algoritmo melhora com o aumento dos parâmetros $\tilde{q}_a$ e $\tilde{q}_v$. Também é possível distinguir dois comportamentos diferentes desse aumento de eficiência, dependendo do cronograma de resfriamento adotado.

Especificamente, quando adota-se o resfriamento $\tilde{q}_a$ -logarítmico, a taxa percentual de sucesso aumenta e, conseqüentemente, $\langle f(x) \rangle$ diminui, com o aumento do parâmetro $\tilde{q}_a$. Já a variação do parâmetro $\tilde{q}_v$ influencia pouco no processo, considerando esse tipo de resfriamento. Já para o resfriamento geométrico, verifica-se o oposto, ou seja, pouca influência do parâmetro $\tilde{q}_a$ e uma melhora significativa na eficiência do algoritmo (aumento na taxa percentual de sucesso e diminuição de $\langle f(x) \rangle$), a medida que o parâmetro $\tilde{q}_v$ aumenta.

Analisemos agora os resultados obtidos para cada função objetivo, separadamente. Como é de se esperar, a função objetivo $f_1(x)$ não ofereceu dificuldades para ser otimizada, visto que é unidimensional e contém apenas duas bacias de mínimo. Mesmo assim, fica evidente que a taxa de sucesso é muito maior considerando o resfriamento geométrico e com valores de $\tilde{q}_v > 0.8$, como mostra a Fig. (3.6-b). O interessante é que, mesmo para as funções $f_2(\mathbf{x})$ e $f_3(\mathbf{x})$, visivelmente mais complicadas do que a função $f_1(x)$, as taxas de sucessos também foram consideravelmente

melhores considerando o resfriamento geométrico e $\tilde{q}_v > 0.8$. Para destacar esses resultados, mostramos na Fig. (3.9) o comportamento da taxa de sucesso (%) do algoritmo, considerando o resfriamento geométrico da temperatura, para a função objetivo $f_3(\mathbf{x})$.

Esse comportamento comum, verificado para as três funções objetivos de referência, sugere que o algoritmo proposto tem um regime ótimo de eficiência: resfriamento da temperatura de aceitação geométrico (Eq. 3.10) e $\tilde{q}_v > 0.8$. Além disso, visto que neste regime ótimo, o algoritmo apresentou boa taxa de sucesso para diferentes funções objetivos, espera-se que ele ofereça boa eficiência na resolução de diferentes problemas de otimização, mesmo que sejam multidimensionais e contenham inúmeros mínimos locais.

Finalmente, para ilustrar o processo de busca do nosso algoritmo, apresentamos nas Figs. (3.10) e (3.11) a evolução da função objetivo $f_1(x)$ (Eq. 3.33) e da variável x , com a interação t , para algumas combinações de parâmetros $\tilde{q}_a$ e $\tilde{q}_v$, considerando os resfriamentos da temperatura de aceitação $\tilde{q}_a$ -logarítmico e geométrico, respectivamente. Especificamente para o resfriamento $\tilde{q}_a$ -logarítmico, selecionamos as combinações de parâmetros $(\tilde{q}_a = 0, \tilde{q}_v = 0)$, $(\tilde{q}_a = 1.0, \tilde{q}_v = 0)$ e $(\tilde{q}_a = 1.8, \tilde{q}_v = 0)$. Já para o resfriamento geométrico, escolhemos $(\tilde{q}_a = 0, \tilde{q}_v = 0)$, $(\tilde{q}_a = 0, \tilde{q}_v = 1.0)$ e $(\tilde{q}_a = 0, \tilde{q}_v = 1.8)$.

No caso da Fig. (3.10-a), que corresponde à combinação $(\tilde{q}_a = 0$ e $\tilde{q}_v = 0)$, com resfriamento $\tilde{q}_a$ -logarítmico, a função objetivo $f_1(x)$ e coordenada x sofrem grandes flutuações e não convergem para o mínimo global ($f_1(x) \approx -78.3$ e $x \approx -2.9$). Ainda considerando o resfriamento $\tilde{q}_a$ -logarítmico, os resultados obtidos com as combinações $(\tilde{q}_a = 1.0, \tilde{q}_v = 0)$ e $(\tilde{q}_a = 1.8, \tilde{q}_v = 0)$, mostrados nas Figs. (3.10-b) e (3.10-c) mostram uma melhora na convergência, tanto da função objetivo como da solução x , embora ainda haja flutuações consideráveis durante o processo. Já os resultados mostrados na Fig. (3.11), que correspondem ao resfriamento geométrico da temperatura de visitaço, mostram que, para as três combinações $(\tilde{q}_a = 0, \tilde{q}_v = 0)$, $(\tilde{q}_a = 0, \tilde{q}_v = 1.0)$ e $(\tilde{q}_a = 0, \tilde{q}_v = 1.8)$ selecionas, tanto a função objetivo $f_1(x)$ como a coordenada x convergem mais rapidamente para a solução ótima e com menos oscilação do que no resfriamento $\tilde{q}_a$ -logarítmico.

Figura 3.6 – Resultados para a função objetivo $f_1(x)$: superfícies representando o valor médio da função objetivo $\langle f(x) \rangle$ (à esquerda) e o número relativo de acertos (%) na bacia de mínimo global (à direita), considerando o resfriamento da temperatura de aceitação (a) $\tilde{q}_a$ -logarítmico (Eq. 3.30) e (b) geométrico (Eq. 3.10).

3.9 Conclusão

Neste capítulo, apresentamos os conceitos gerais sobre problemas de otimização e apontamos alguns dos principais métodos para resolvê-los. Especificamente,

Figura 3.7 – Resultados para a função objetivo $f_2(\mathbf{x})$: superfícies representando o valor médio da função objetivo $\langle f(x) \rangle$ (à esquerda) e o numero relativo de acertos (%) na bacia de mínimo global (à direita), considerando o resfriamento da temperatura de aceitação (a) $\tilde{q}_a$ -logarítmico (Eq. 3.30) e (b) geométrico (Eq. 3.10).

discutimos as diferenças fundamentais entre os métodos *determinísticos* e *estocásticos*, destacando que estes são mais adequados para problemas cujas funções objetivos contêm múltiplos mínimos locais. Dentre os métodos de otimização estocásticos, destacamos o algoritmo *Simulated Annealing* (SA) e apresentamos seus fundamen-

Figura 3.8 – Resultados para a função objetivo $f_2(\mathbf{x})$: superfícies representando o valor médio da função objetivo $\langle f(x) \rangle$ (à esquerda) e o numero relativo de acertos (%) na bacia de mínimo global (à direita), considerando o resfriamento da temperatura de aceitação (a) $\tilde{q}_a$ -logarítmico (Eq. 3.30) e (b) geométrico (Eq. 3.10).

tamentos básicos: critério de aceitação, distribuição de visitação e cronograma de resfriamento. Mostramos também as principais propostas de generalização do algoritmo SA. Finalmente, apresentamos um novo algoritmo de recozimento simulado generalizado, $\tilde{q}$ -SA, utilizando as funções logaritmo e exponenciais generalizadas,

Figura 3.9 – Comportamento da taxa de sucesso, considerando o resfriamento geométrico da temperatura, para a função objetivo $f_3(\mathbf{x})$, com $\tilde{q}_r = 0$, $\tilde{q}_r = 0.4$, $\tilde{q}_r = 0.8$ e $\tilde{q}_r = 1.2$. É evidente a melhora no desempenho do algoritmo para $\tilde{q}_v > 0.8$, reforçando a tese de que o regime ótimo ocorre quando o segundo momento da distribuição $\tilde{q}_v$ -gaussiana (Eq. 3.28) diverge.

unificando as propostas apresentadas na literatura. Avaliamos o desempenho do algoritmo proposto através de experiências numéricas nas quais escolhemos três funções objetivos de referência para serem minimizadas. Os resultados mostraram que o algoritmo proposto apresenta um regime de melhor desempenho, quando consideramos o resfriamento da temperatura de aceitação geométrico (Eq. 3.19), distribuição

Figura 3.10 – Resfriamento $\tilde{q}_a$ -logarítmico da temperatura de aceitação: evolução da função objetivo $f_1(x)$ (à esquerda) e da variável x (à direita) com a iteração t para algumas combinações dos parâmetros $\tilde{q}_a$ e $\tilde{q}_v$: (a) $\tilde{q}_a = 0$ e $\tilde{q}_v = 0$; (b) $\tilde{q}_a = 1.0$ e $\tilde{q}_v = 0$; e (c) $\tilde{q}_a = 1.8$ e $\tilde{q}_v = 0$.

Figura 3.11 – Resfriamento geométrico da temperatura de aceitação: evolução da função objetivo $f_1(x)$ (à esquerda) e da variável x (à direita) com a iteração t para algumas combinações dos parâmetros $\tilde{q}_a$ e $\tilde{q}_v$: (a) $\tilde{q}_a = 0$ e $\tilde{q}_v = 0$; (b) $\tilde{q}_a = 0$ e $\tilde{q}_v = 1.0$; e (c) $\tilde{q}_a = 0$ e $\tilde{q}_v = 1.8$.

de visitação $\tilde{q}_v$ -gaussiana (Eq. 3.28) e resfriamento de temperatura de visitação $\tilde{q}_v$ -logarítmica (Eq. 3.31), com $\tilde{q}_v > 0.8$. Por fim, concluímos que nosso algoritmo é robusto e versátil, visto que apresentou bons resultados, mesmo considerando diferentes funções objetivos. Nos próximos capítulos, validaremos nosso algoritmo utilizando-o na resolução de dois importantes problemas práticos: a determinação do espectro de fluência de um feixe de raios X a partir da sua curva de atenuação e a reconstrução numérica da imagem no interior de um corpo através da tomografia de impedância elétrica.

Reconstruindo o espectro de um feixe de raios X

A qualidade de um feixe de raios X pode ser caracterizada pelo seu espectro de fluência energética. No entanto, a medição direta desse espectro é uma tarefa custosa e requer qualificação. Uma abordagem alternativa que tem sido proposta é reconstruí-lo numericamente usando os dados da curva de atenuação do feixe.

Neste capítulo, discutimos o problema inverso da reconstrução do espectro de um feixe de raios X, a partir de sua curva de atenuação. Apresentamos uma proposta para resolver o problema através do nosso algoritmo de otimização, combinando com uma nova função de regularização. Experiências numéricas foram realizadas e os resultados mostram que os espectros reconstruídos pelo nosso algoritmo ajustam-se com bastante precisão aos espectros adotados como referência. Além disso, os resultados também corroboram as conclusões obtidas a partir das experiências do Cap. 3 de que o algoritmo apresenta desempenho otimizado quando o segundo momento da distribuição de visitação diverge.

Os trabalhos desenvolvidos neste capítulo foram propostos pelo Prof. Dr. Alessandro Martins da Costa e contou com sua colaboração no desenvolvimento dos estudos. Ele apresentou os resultados no XVIII Congresso Brasileiro de Física Médica, em 2013, sediado na cidade de São Pedro, Brasil, e no *9th International Topical Meeting on Industrial Radiation and Radioisotope Measurement Applications*, realizado em 2014, na cidade de Valência, Espanha [6].

4.1 Raios X e espectro de fluência

Como discutido no Cap. 2, a descoberta dos raios X, por W. C. Röntgen, em 1895, foi fundamental para o desenvolvimento da medicina diagnóstica durante o século 20. Na verdade, atualmente os raios X são utilizados nas mais diferentes áreas, tais como tratamento de câncer, sistemas de segurança em aeroportos, ensaios de controle de qualidade não destrutivos, entre outros. Uma extensa revisão sobre a descoberta dos raios X e seus impactos tecnológicos podem ser encontrados na Ref. [70].

Atualmente, sabemos que os raios X correspondem à radiação eletromagnética com comprimento de onda na faixa de $0,01 \text{ nm} \sim 10 \text{ nm}$ e, conseqüentemente, com frequências na ordem de $10^{16} \text{ Hz} \sim 10^{19} \text{ Hz}$. A geração de raios X ocorre quando elétrons sofrem uma transição de nível energético em um átomo (*raios X característico*) ou quando elétrons com alta energia são bruscamente desacelerados ao atingir um alvo metálico (*efeito Bremsstrahlung*). Nos tubos catódicos, por exemplo, os elétrons liberados por um filamento aquecido (*cátodo*) são acelerados através de uma tensão V e atingem um disco de tungstênio (*anodo*), produzindo fótons de raios X, como mostra a Fig. (4.1-a).

O número N de fótons emitidos por um feixe de raios X por unidade de área A é medido pela fluência, $\Psi = dN/dA$, cuja unidade, no Sistema Internacional, é m^{-2} . Já a energia E transmitida por unidade de área é denominada de fluência energética, $\Phi = dE/dA$, medido em J m^{-2} . Considerando que em um feixe de raios X poli-energético há uma composição de fótons com diferentes energias, o espectro de fluência energética $\Phi(E)$ corresponde à fluência energética para cada intervalo de energia entre E e $E + dE$, cuja forma típica é mostrada na Fig. (4.1-b).

O conhecimento do espectro de fluência $\Phi(E)$ de um feixe de raios X é fundamental para caracterizar a qualidade deste feixe. Normalmente, este espectro é determinado experimentalmente através de um detector de estado sólido. Esta técnica, no entanto, é consideravelmente custosa e requer mão de obra especializada, justificando a contínua busca por abordagens alternativas. Uma das propostas que tem chamado a atenção da comunidade acadêmica nas últimas décadas é a reconstrução numérica do espectro de um feixe de raios X utilizando-se os dados de sua

Figura 4.1 – (a) Esquema da emissão de um feixe de raios X através de um tubo de raios catódicos: os elétrons são liberados pelo cátodo e acelerados por uma fonte de tensão até atingir o ânodo de tungstênio, emitindo raios X. (b) Forma típica do espectro de um feixe raios X: a fluência $\Phi(E)$ mede a quantidade de fótons em cada intervalo de energia entre E e $E + dE$ do espectro.

curva de atenuação.

Um dos pioneiros neste tipo de abordagem foi L. Silberstein que, em 1933, apresentou um método no qual usou uma aproximação analítica da curva de atenuação e obteve a forma do espectro através da transformada de Laplace [71]. Já em 1936, G. E. Bell discute a técnica proposta por Silberstein e testa seu desempenho utilizando curvas experimentais [72]. Algumas décadas mais tarde, J. W. Twidell apresenta um código computacional que reconstrói iterativamente o espectro de raios X através da minimização do erro entre os dados de atenuação experimental e numérico [73]. Já em 1983, Kramer & Von Seggern publicam dois artigos de revisão sobre o tema mostrando resultados obtidos pelo método dos mínimos quadrados [74, 75] e, um anos depois, Rubio & Mainardi aplicam a transformada de Laplace para reconstruir espectros incluindo linhas características [76].

Nos últimos anos, diversos estudos têm sido publicados tratando tanto dos aspectos experimentais como computacionais do problema de reconstrução do espectro de raios X [77, 78, 79]. Especificamente, em 1998, A. Nisbet *et al.* propõem o

uso do algoritmo de recozimento simulado na reconstrução de espectros na faixa de 6 MeV e 25 MeV [80]. Os autores definem uma função objetivo composta pelo erro quadrático entre os dados de atenuação experimental e numérico acrescido a uma função de regularização. No entanto, o trabalho não especifica a forma dessa função e nem como cada nova solução é gerada a partir da anterior.

Neste contexto, apresentamos nosso algoritmo de otimização, baseado na generalização do SA, para resolver o problema inverso de reconstruir a distribuição de fluência de um feixe de raios X. No início dos trabalhos, definimos uma função objetivo que media apenas a discrepância entre os dados de atenuação experimentais e os obtidos computacionalmente. Entretanto, resultados preliminares de simulações numéricas mostraram a necessidade de uma função de regularização. Optamos, então, por acrescentamos uma função de regularização suavizadora à função objetivo e os novos resultados obtidos foram bastante satisfatórios.

Nas próximas seções, descrevo a formulação teórica do problema inverso da reconstrução do espectro de raios X. Apresento a função objetivo a ser minimizada, contendo nossa proposta para a função de regularização, e os passos fundamentais do algoritmo. Finalmente, mostro e discuto os resultados das experiências numéricas realizadas para validar o algoritmo.

4.2 O problema inverso da reconstrução do espectro de raios X

Quando um feixe de raios X atravessa um objeto (o corpo de um paciente, por exemplo), os fótons interagem com a matéria fazendo com que parte da energia do feixe seja perdida (absorvida e/ou espalhada). A caracterização de cada material quanto à sua transparência/opacidade aos raios X é quantificada pelo coeficiente de atenuação linear μ .

Considere um feixe monoenergético de raios X com fluência energética Φ que incide em uma placa de espessura t de um dado material, como mostra a Fig. (4.2-a). A fluência Φ' do feixe atenuado decai exponencialmente com a espessura t ,

$$\Phi' = \Phi e^{-\mu t}, \quad (4.1)$$

onde μ é coeficiente de atenuação linear do material. Para que o argumento do exponencial na Eq. (4.1) seja adimensional, o coeficiente de atenuação μ , no Sistema Internacional, deve ser medido em m^{-1} . A Tab. 4.1 mostra os valores dos coeficientes de atenuação para alguns tecidos biológicos [81].

Tabela 4.1 – Coeficiente de atenuação de raios X para alguns tecidos biológicos.

Tecido	$\mu (\text{m}^{-1})$
Osso	35.0
Músculo	20.4
Sangue	20.4
Gordura	18.5

Podemos estender esse exemplo considerando um feixe poli-energético com distribuição de fluência energética $\Phi(E)$ que atravessa n placas atenuadoras de espessuras $t_1, t_2, \dots, t_n$ e densidades $\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_n$, como mostra a Fig. (4.2). Neste caso, a fluência atenuada, $\Phi'(E)$, do feixe é

$$\Phi'(E) = \Phi(E) \exp \left[-\frac{\mu}{\rho} \sum_{j=0}^n \rho_j t_j \right], \quad (4.2)$$

onde μ/ρ é coeficiente de atenuação mássica do material, que depende da energia E .

Figura 4.2 – Atenuação de um feixe poli-energético de raios X ao atravessar n placas atenuadoras com espessuras $t_1, t_2, \dots, t_n$ e densidades $\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_n$. A relação entre as distribuições de fluência energética incidente $\Phi(E)$ e atenuada $\Phi'(E)$ é dada pela Eq. (4.2).

Pode-se adotar uma forma mais conveniente para medir a atenuação de um feixe de raios X através da *atenuação relativa*, $T(n)$, definida como

$$T(n) = \frac{\int_0^{E_{\max}} \Phi(E)(\mu_{\text{en}}/\rho) \exp \left[-(\mu/\rho) \sum_{j=0}^n \rho_j t_j \right] E dE}{\int_0^{E_{\max}} \Phi(E)(\mu_{\text{en}}/\rho) E dE}, \quad (4.3)$$

onde μ_{en}/ρ é o coeficiente mássico de absorção de energia, que depende de E , e $E_{\max}$ é máxima energia do espectro, que pode ser estimada como $E_{\max} = eV$, sendo V a tensão aplicada e $e \approx 1,602 \times 10^{-19}$ C a carga elementar.

Para lidar com o problema computacionalmente, discretizamos a distribuição de fluência energética $\Phi(E)$ em um vetor $\Phi = [\phi^{(0)}, \phi^{(1)}, \dots, \phi^{(k-1)}]$, substituindo a integral da Eq. (4.3) por um somatório. Com isso, a transmissão relativa $T(n)$ torna-se o vetor $\mathbf{T} = [T^{(0)}, T^{(1)}, \dots, T^{(m-1)}]$, cujos elementos são

$$T^{(n)} = \frac{\sum_{s=0}^{k-1} a_{n,s} \phi^{(s)}}{\sum_{s=0}^{k-1} a_{0,s} \phi^{(s)}}, \quad \text{para } n = 0, 2, \dots, m-1, \quad (4.4)$$

onde m é o número de medidas de atenuação e

$$a_{n,s} = \int_{E(s)}^{E(s+1)} (\mu_{\text{en}}/\rho)(E) \exp \left[-(\mu/\rho)(E) \sum_{j=0}^n \rho_j t_j \right] E dE. \quad (4.5)$$

Podemos, então, definir o *problema direto* da reconstrução do espectro de raios X como sendo a determinação do vetor transmissão $\mathbf{T}$, conhecendo-se a distribuição de fluência Φ , como mostra a Fig. (4.3-a). Já o *problema inverso* consiste na reconstrução do vetor Φ a partir dos dados de transmissão $\mathbf{T}$, como esquematizado na Fig. (4.3-b).

4.3 Algoritmo de otimização e função objetivo

Considere que desejamos determinar o espectro de fluência Φ_{actual} de um dado feixe de raios X e que temos m medidas experimentais de atenuação relativa, $\mathbf{T}_{\text{actual}} = [T_{\text{actual}}^{(0)}, T_{\text{actual}}^{(1)}, \dots, T_{\text{actual}}^{(m-1)}]$, deste feixe. Tratado como um problema de otimização, a busca pela solução é realizada iterativamente gerando-se uma sequência de soluções candidatas. Para cada solução candidata

Figura 4.3 – Esquema do problema direto/inverso da reconstrução do espectro de um feixe de raios X: (a) o problema direto corresponde à determinação da atenuação $\mathbf{T}$ conhecendo-se o espectro de distribuição de fluência Φ e (b) o problema inverso consiste em reconstruir o espectro de fluência Φ , a partir de $\mathbf{T}$.

$\Phi_{\text{trial}} = [\phi_{\text{trial}}^{(0)}, \phi_{\text{trial}}^{(2)}, \dots, \phi_{\text{trial}}^{(k-1)}]$, calcula-se a transmissão relativa numérica $\mathbf{T}_{\text{num}} = [T_{\text{num}}^{(0)}, T_{\text{num}}^{(1)}, \dots, T_{\text{num}}^{(m-1)}]$ através da Eq. (4.4), que é confrontada com a transmissão relativa experimental $\mathbf{T}_{\text{actual}}$ através da função objetivo

$$f(\Phi_{\text{trial}}) = \frac{1}{m} \sum_{n=0}^{m-1} \left| T_{\text{num}}^{(n)} - T_{\text{actual}}^{(n)} \right|^2 + \lambda R(\Phi_{\text{trial}}), \quad (4.6)$$

onde $R(\Phi_{\text{trial}})$ é uma função de regularização e λ é um parâmetro de regularização.

Retomemos nossa proposta de generalização do algoritmo de recozimento simulado, $\tilde{q}$ -SA, apresentada no Cap. 3, que é baseada nas funções $\tilde{q}$ -logaritmo e

$\tilde{q}$ -exponencial generalizadas

$$\begin{aligned} \ln_{\tilde{q}}(x) &= \begin{cases} \frac{x^{\tilde{q}} - 1}{\tilde{q}}, & \text{se } \tilde{q} \neq 0, \\ \ln(x), & \text{se } \tilde{q} = 0, \end{cases} \\ \exp_{\tilde{q}}(x) &= \begin{cases} 0, & \text{se } \tilde{q}x < -1, \\ \lim_{\tilde{q}' \rightarrow \tilde{q}} (1 + \tilde{q}'x)^{1/\tilde{q}'}, & \text{se } \tilde{q}x \geq -1, \end{cases} \end{aligned} \quad (4.7)$$

onde $\tilde{q} \in \mathbb{R}$ é um parâmetro de generalização [39, 38].

No nosso algoritmo, cada nova solução candidata Φ_{new} gerada é comparada com a anterior Φ_{old} e aceita com probabilidade

$$p(\Phi_{\text{old}} \leftarrow \Phi_{\text{new}}) = \begin{cases} 1, & \text{se } \Delta f \leq 0, \\ \exp_{\tilde{q}_a}(-\Delta f/T_a), & \text{se } \Delta f > 0, \end{cases} \quad (4.8)$$

onde $\Delta f = f(\Phi_{\text{new}}) - f(\Phi_{\text{old}})$ é a variação da função objetivo, T_a é a temperatura de aceitação e $\tilde{q}_a$ é o parâmetro de generalização da aceitação.

Para gerar a nova solução Φ_{new} , cada componente $\phi_{\text{old}}^{(s)}$ da solução atual Φ_{old} é alterado, um de cada vez, gerando um novo componente $\phi_{\text{new}}^{(s)}$ através da distribuição de visitaço

$$\phi_{\text{new}}^{(s)} = \phi_{\text{old}}^{(s)} + T_v G_{\tilde{q}_v}(\phi), \quad \text{for } s = 0, 2, \dots, k-1, \quad (4.9)$$

onde T_v é a temperatura de visitaço e

$$G_{\tilde{q}_v}(\phi) = \sqrt{\frac{\tilde{q}_v}{2\pi}} \frac{\Gamma(1/\tilde{q}_v)}{\Gamma(1/\tilde{q}_v - 1/2)} \exp_{-\tilde{q}_v} \left(-\frac{\phi^2}{2} \right), \quad (4.10)$$

 a funo densidade de probabilidade (pdf) gaussiana generalizada padro e $\tilde{q}_v \in \mathbb{R}$ o parmetro de generalizao da visitao.

A estocasticidade da busca controlada pelos cronogramas de resfriamento das temperaturas de aceitao $T_a^{(t)}$ e visitao $T_v^{(t)}$ com a iterao t . A partir dos resultados dos testes apresentados no Cap. 3, adotamos o resfriamento geomtrico para a temperatura de aceitao

$$T_a^{(t)} = \alpha^t T_a^{(0)}, \quad (4.11)$$

onde $\alpha \in (0, 1)$ é a taxa de resfriamento, e o resfriamento $\tilde{q}_v$ -logarítmico para a temperatura de visitação

$$T_v^{(t)} = T_v^{(0)} \frac{\ln_{\tilde{q}_v}(2)}{\ln_{\tilde{q}_v}(t+1)}. \quad (4.12)$$

A escolha adequada para a função de regularização $R(\Phi_{\text{trial}})$ é de fundamental importância para garantir que o algoritmo consiga convergir para uma solução satisfatória. Particularmente nesse trabalho, adotamos uma função de regularização que garanta a suavidade do espectro, penalizando diferenças grandes entre dois elementos vizinhos do vetor Φ_{trial} . Para isso, definimos

$$R(\Phi_{\text{trial}}) = \frac{1}{k-1} \sum_{s=1}^{k-1} \left| \hat{\phi}_{\text{trial}}^{(s)} - \hat{\phi}_{\text{trial}}^{(s-1)} \right|, \quad (4.13)$$

onde $\hat{\phi}_{\text{trial}}^{(s)}$ são os elementos da distribuição de fluência normalizada

$$\hat{\Phi}_{\text{trial}} = \frac{\Phi_{\text{trial}}}{\max[\Phi_{\text{trial}}]}. \quad (4.14)$$

A regularização dada pela Eq. (4.13) corresponde à de Tikhonov de primeira ordem. Já a proposta de normalização (Eq. 4.14) faz com que a função de regularização, $R(\Phi_{\text{trial}})$, seja da mesma ordem de grandeza do erro absoluto quadrático médio, $\frac{1}{m} \sum_{n=1}^m |T^{(n)} - S^{(n)}|^2$, visto que $T^{(n)}$ e $S^{(n)}$ são transmissões relativas e, portanto, $T^{(n)}, S^{(n)} \leq 1$. Na prática, isso pode facilitar a escolha do parâmetro de ponderação λ , além de fazer com que a função objetivo, dada pela Eq. (4.6), seja adimensional.

Para garantir que o processo consiga escapar de bacias de mínimos locais, a temperatura inicial de aceitação, $T_a^{(0)}$ deve ser maior do que a profundidade da bacia de mínimo local mais profunda. Para estimar $T_a^{(0)}$, propomos uma caminhada aleatória inicial na qual μ soluções $\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_\mu$ são geradas e suas correspondentes funções objetivos $f(\Phi_1), f(\Phi_2), \dots, f(\Phi_\mu)$ calculadas. A partir da maior diferença encontrada para a função objetivo, $\Delta f_\mu = \max[f(\Phi_i)] - \min[f(\Phi_i)]$, para $i = 1, 2, \dots, \mu$, definimos

$$T_a^{(0)} = -\frac{\Delta f_\mu}{\ln_{\tilde{q}_a}(p_0)}, \quad (4.15)$$

onde $p_0 \in (0, 1)$ é a probabilidade inicial de aceitação de soluções que aumentam a função objetivo, que é escolhida próxima de 1 para garantir que o algoritmo seja capaz de escapar de bacias de mínimos locais.

Para garantir uma exploração eficiente do espaço de soluções, a temperatura de visitação inicial, $T_v^{(0)}$, deve ser maior do que a fluência máxima do espectro real. Para simplificar essa escolha, nós modelamos o espectro real com a forma de um triângulo com base $E_{\max} - E_{\min}$ e altura $T_v^{(0)}$, onde $E_{\min}$ e $E_{\max}$ são as energias mínima e máxima presentes no espectro, respectivamente. Por sua vez, a fluência total de um feixe, denominada de *kerma no ar*, K_{ar} , pode ser medida experimentalmente e corresponde à área sob o espectro de fluência. Como em nosso modelo essa área corresponde a um triângulo, definimos a temperatura inicial de visitação como

$$T_v^{(0)} = \frac{2K_{\text{ar}}}{E_{\max} - E_{\min}}. \quad (4.16)$$

Apresentamos a seguir o nosso algoritmo, proposto no Cap. 3, adaptado para o problema do espectro de raios X, onde $t_{\max}$ é o número máximo de iterações e r o número de tentativas de novas soluções a cada iteração:

1. escolha os parâmetros da simulação: $t_{\max}$, r , α , $\tilde{q}_a$, $\tilde{q}_v$ e λ ;
2. defina a temperatura inicial $T_a^{(0)}$, usando a Eq. (4.15);
3. defina a temperatura inicial e $T_v^{(0)}$, usando a Eq. (4.16);
4. gere uma solução inicial aleatória Φ_{old} ;
5. calcule o valor da função objetivo $f(\Phi_{\text{old}})$, usando a Eq. (4.6);
6. para t de 1 até $t_{\max}$, faça:
 - (a) repetir r vezes os seguintes passos:
 - i. gere uma nova solução Φ_{new} , usando a Eq. (4.9);
 - ii. calcule o novo valor da função objetivo $f(\Phi_{\text{new}})$, usando a Eq. (4.6);
 - iii. faça $\Delta f = f(\Phi_{\text{new}}) - f(\Phi_{\text{old}})$;
 - iv. considere o critério dado pela Eq. (4.8):
 - se $f(\Phi_{\text{new}}) \leq f(\Phi_{\text{old}})$, então $\Phi_{\text{old}} = \Phi_{\text{new}}$;
 - senão, se $\exp_{\tilde{q}_a}(-\Delta f/T_a^{(t)}) > X \sim U(0, 1)$, então $\Phi_{\text{old}} = \Phi_{\text{new}}$;
 - (b) diminua as temperaturas $T_a^{(t)}$ e $T_v^{(t)}$ usando as Eqs. (4.11) e (4.12);
7. saída dos resultados

4.4 Experiências numéricas

Apresentaremos agora as experiências numéricas realizadas para avaliar o desempenho do nosso algoritmo de recozimento simulado generalizado, $\tilde{q}$ -SA, e de nossa função de regularização na resolução do problema inverso da reconstrução da distribuição de fluência de um feixe de raios X. As experiências foram planejadas e executadas a fim de comparar nosso algoritmo com a versão clássica do algoritmo de recozimento simulado (SA) e avaliar a importância da função de regularização. Os resultados mostram que nosso algoritmo e nossa função de regularização são bastante eficazes na determinação do espectro de fluência para diferentes feixes de raios X.

Considerando que as principais contribuições do nosso trabalho são a generalização do algoritmo de recozimento simulado e a função de regularização, esse teste buscou avaliar a precisão do nosso algoritmo em função dos parâmetros $\tilde{q}_v$ e λ . Três diferentes espectros experimentais, com picos de tensão de 50 kVp, 60 kVp e 70 kVp, foram selecionados como referência para testar o nosso algoritmo [82]. A escolha evitou espectros com linhas características, visto que o objetivo é avaliar, por enquanto, apenas feixes de raios X para diagnóstico. A energia mínima $E_{\min}$, a energia máxima $E_{\max}$ e o número de faixas de energia k para cada espectro de referência são mostrados na Tab. 4.2.

Tabela 4.2 – Espectros de raios X de referência com seus limites inferior e superior de energia e o número de faixas de energia.

Espectro	$E_{\min}$ (kev)	$E_{\max}$ (kev)	k
1	10	52	211
2	9	62	107
3	9	72	127

As curvas de atenuação relativa para o alumínio, considerando 9 espessuras diferentes, foram geradas numericamente e são mostrados na Fig. (4.4), juntamente com os correspondentes espectros de fluência normalizados.

O programa recebe, como dados de entrada, o *kerma no ar*, K_{ar} , os valores de energia mínimo, $E_{\min}$, e máximo, $E_{\max}$, do espectro de referência e o vetor com a

Figura 4.4 – Distribuição de fluência normalizada $\Phi/\Phi_{\max}$ e a correspondente curva de transmissão relativa S_n para os espectros de referência indicados na Tab. 4.2.

transmissão relativa real, $\mathbf{T}_{\text{actual}} = [T_{\text{actual}}^{(0)}, T_{\text{actual}}^{(2)}, \dots, T_{\text{actual}}^{(m-1)}]$, medida experimentalmente. O algoritmo é executado N vezes, partindo de diferentes soluções iniciais aleatórias, gerando N espectros numéricos $\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_N$. O espectro solução final $\Phi_* = [\phi_*^{(0)}, \phi_*^{(2)}, \dots, \phi_*^{(k-1)}]$ é definido como

$$\phi_*^{(s)} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \phi_i^{(s)}, \quad \text{para } s = 0, 2, \dots, k-1, \quad (4.17)$$

sendo $\phi_i^{(s)}$ a fluência de cada faixa de energia s de cada espectro Φ_i obtido nas N execuções do algoritmo. Para a geração numérica da pdf $\tilde{q}_v$ -Gaussiana, utilizamos o método Box-Müller generalizado proposto por W. Thistleton *et al.* [69] (ver Apêndice 2).

Para comparar a solução numérica Φ_* com o espectro real Φ_{actual} , escolhemos o erro absoluto médio,

$$\varepsilon = \frac{1}{k} \sum_{s=0}^{k-1} \left| \hat{\phi}_{\text{actual}}^{(s)} - \hat{\phi}_*^{(s)} \right|, \quad (4.18)$$

onde $\hat{\phi}_{\text{actual}}^{(s)}$ e $\hat{\phi}_*^{(s)}$ são os componentes s do espectro real e numérico normalizados, respectivamente, dados por

$$\hat{\Phi}_{\text{actual}} = \frac{\Phi_{\text{actual}}}{\max[\Phi_{\text{actual}}]} \quad \text{e} \quad \hat{\Phi}_* = \frac{\Phi_*}{\max[\Phi_*]}. \quad (4.19)$$

A fim de avaliar o desempenho do algoritmo, foram realizadas simulações para calcular o erro ε em função dos parâmetros $\tilde{q}_v$ e λ . Para cada espectro de referência, o programa foi executado considerando $N = 20$, $t_{\text{max}} = 200$, $r = 50$ e $\alpha = p_0 = 0.9$ constantes, mas variando $\tilde{q}_v$ e λ no intervalo $\tilde{q}_v = 0, 0.2, 0.4, \dots, 2.0$ e $\lambda = 10^{-6}, 10^{-5}, \dots, 10^4$. Para cada par $(\tilde{q}_v, \lambda)$, a solução numérica Φ_* obtida foi comparada com o espectro real Φ_{actual} , gerando $11 \times 11 = 121$ valores de erro absoluto médio, calculados pela Eq. (4.18), cujo comportamento em função de λ e $\tilde{q}_v$ é mostrado na Fig. (4.5).

Apresentamos também, na Fig. (4.6), os ajustes das fluência numéricas, obtidas pelo algoritmo proposto, com os espectros de referência. Os gráficos do lado esquerdo da Fig. (4.6) mostram os resultados para o SA ($\tilde{q}_v = 0$) e desconsiderando a função de regularização $\lambda \approx 0$. Já os gráficos à direita da Fig. (4.6) mostram os ajustes obtidos pelo $\tilde{q}$ -SA, especificamente para $\tilde{q}_v = 0.6$, e considerando a função de regularização, com $\lambda = 10^{-1}$. Fica bastante evidente pelos resultados o melhor desempenho do $\tilde{q}$ -SA combinado à nossa função de regularização em relação ao SA sem a regularização.

4.5 Conclusão

Neste capítulo, tratamos do problema inverso da determinação do espectro de um feixe de raios X, a partir de seus dados de atenuação. Iniciamos apresentando a modelagem do problema e, em seguida, propomos nosso algoritmo de recozimento simulado, $\tilde{q}$ -SA, combinado com uma função de regularização, para resolvê-lo. Simulações numéricas, considerando três espectros de referência reais, foram realizadas para avaliar o desempenho do algoritmo, principalmente em função dos parâmetros λ e $\tilde{q}_v$. Os resultados obtidos não permitem determinar um par $(\lambda, \tilde{q}_v)$ ótimo. No entanto, é notável que o erro decresce fortemente para $\lambda > 10^{-2}$ para todos o espectros de referência, corroborando a importância fundamental da função de

regularização. Observamos também uma melhora significativa nos resultados para $\tilde{q}_v > 0.6$, indicando que o algoritmo $\tilde{q}$ -SA é mais eficiente do que sua versão clássica SA e reforçando que o seu melhor desempenho ocorre com a divergência do segundo momento da distribuição $\tilde{q}$ -gaussiana. Nosso algoritmo também mostrou-se bastante confiável, visto que os espectros numéricos obtidos apresentam excelentes ajustes com os espectros de referência. Finalmente, esperamos contribuir com a difícil tarefa de determinar o espectro de um feixe de raios X de forma menos custosa do que as abordagens de medidas diretas atualmente utilizadas.

(a)

(b)

(c)

Figura 4.5 – Superfície (esquerda) e projeção no plano $\lambda \times \tilde{q}_v$ (direita) do erro absoluto médio ε em função de $\tilde{q}_v$ e λ para os espectros de referência (a) 1, (b) 2 e (c) 3. O erro decresce significativamente para $\lambda > 10^{-2}$ e $\tilde{q} > 0.6$.

Figura 4.6 – Distribuição de fluência real (linha sólida) e resultado numérico ($\circ$) para os espectros de referência (a) 1, (b) 2 and (c) 3. Do lado esquerdo, estão os resultados obtidos pelo SAC ($\tilde{q}_v = 0$) e sem regularização ($\lambda \approx 0$). Já do lado direito, os gráficos mostram os ajustes obtidos com o $\tilde{q}$ -SA ($\tilde{q}_v = 0.6$) combinado com nossa função de regularização ($\lambda = 10^{-1}$).

Problema inverso da tomografia de impedância elétrica

Os avanços da medicina, a partir de meados do século 20, produziram um grande aumento na qualidade e na expectativa de vida. Um dos principais propulsores desses avanços foi o desenvolvimento das técnicas de diagnóstico por imagem, tais como a tomografia computadorizada (TC), a ressonância magnética nuclear (RMN) e a ultra-sonografia (US). Uma técnica que tem chamado a atenção da comunidade acadêmica nas últimas décadas é a tomografia de impedância elétrica (TIE)¹. A ideia dessa técnica é mapear a condutividade elétrica dos tecidos internos do corpo do paciente através da aplicação de um estímulo elétrico (tensão/corrente), através de eletrodos, e na medição da resposta.

Neste capítulo, tratamos da resolução numérica do problema inverso da TIE. Inicialmente, fazemos uma revisão bibliográfica sobre o desenvolvimento histórico da técnica e, em seguida, descrevemos sua formulação matemática. Tratando a reconstrução da imagem como um problema de otimização, apresentamos nosso algoritmo para resolvê-lo. Finalmente, mostramos e discutimos os resultados de simulações numéricas que validam o algoritmo e reforçam a tese de que, mesmo para diferentes problemas, existe um regime ótimo de parâmetros que garante um grande ganho de desempenho.

Os trabalhos desenvolvidos neste capítulo foram publicados, na Revista Brasileira de Ensino de Física, [4] e apresentados no XIII *Latin American Workshop on Nonlinear Phenomena*, em 2013, na Argentina [5].

¹ *Electrical impedance tomography* (TIE), em inglês.

5.1 Apresentação da TIE

O trabalho de R. P. Henderson e J. G. Webster, de 1978, é apontado como pioneiro na tentativa de produzir imagens do interior do corpo humano a partir de suas propriedades elétricas [83]. O sistema construído por eles, denominado *câmara de impedância*, baseava-se na aplicação de tensões elétricas através de um grande eletrodo colocado no peito do paciente e na medição da corrente elétrica por uma rede de eletrodos localizada em suas costas. Desde então, surgiram diversas propostas para possíveis aplicações da TIE, tanto na área de medicina diagnóstica, como na área industrial.

Na medicina, estudos da TIE incluem o controle da ventilação artificial, [84], a detecção de embolia pulmonar [85], de câncer de mama [86], avaliação do funcionamento gástrico e do processo de lavagem estomacal [87] e o monitoramento das funções cardíacas [88] e de problemas de apneia [89]. Já em processos industriais, podemos citar o monitoramento de escoamentos multifásicos em tubulações [90], ensaios não destrutivos de controle de qualidade como a detecção de corrosão ou de defeitos, como fissuras ou vazios, em peças metálicas [91, 92], detecção de vazamentos em tanques subterrâneos [93] e imageamento de escoamento em tubulações [94].

A ideia central da TIE é obter as condutividades elétricas das diferentes partes do interior do corpo do paciente (ou do objeto de interesse). Para isso, aplica-se um padrão de potencial elétrico (ou de corrente elétrica) conhecido, através de eletrodos posicionados no contorno da seção de interesse, e mede-se a resposta (corrente ou potencial). A partir das informações obtidas no processo estímulo/resposta, reconstrói-se o mapa da condutividade elétrica no interior da seção que, computacionalmente, pode ser traduzido como a imagem desta seção, como mostra a Fig. (5.1) [95, 96].

As principais características que fazem da TIE uma técnica promissora referem-se à segurança do paciente, custo, portabilidade e facilidade de instalação/manutenção. Na TIE, não utiliza-se radiação ionizante e nem há necessidade de introdução de nenhum objeto estranho no corpo do paciente ou ingestão de contraste e substâncias radioativas. Com isso, a TIE pode ser aplicada por longos interva-

Figura 5.1 – Esquema da tomografia de impedância elétrica (TIE): uma fonte aplica perfil de potencial/corrente (estímulo) no corpo do paciente, através de um cinto de eletrodos posicionados ao se redor. A resposta resultante (corrente/potencial) é medida e enviada a um computador que reconstrói a imagem do interior do corpo.

los de tempo sobre um mesmo paciente, permitindo um monitoramento constante e em tempo real. Além disso, um tomógrafo de impedância elétrica é constituído basicamente por uma fonte de tensão, um cinto de eletrodos e um computador, podendo ser facilmente transportado e instalado, mesmo em locais com pouco espaço. Finalmente, seu custo é estimado em torno de US\$ 10 mil, enquanto que um aparelho de TC pode chegar a US\$ 1 milhão, o que é especialmente importante, pois possibilita que hospitais e clínicas, principalmente aqueles com poucos recursos, possam adquirir aparelhos em quantidade suficiente para atender um grande número de pacientes.

No entanto, ainda existem muitos desafios a serem superados para que a TIE ganhe confiança e seja utilizada em grande escala. As dificuldades aparecem principalmente no que se refere aos algoritmos computacionais empregados para processar os dados e fazer a reconstrução da imagem [96]. Os primeiros algoritmos aplicados à TIE foram baseados na técnica *Backprojection*, usualmente utilizada na TC [97]. Contudo, as imagens obtidas não apresentavam boa resolução, sendo insatisfatórias para aplicações médicas seguras.

O principal motivo para essa baixa resolução está associado ao tipo de campo que se estabelece no interior do corpo a ser imageado. Na TC, o campo estabelecido

é do tipo *hard field* (campo duro ou não deformável), ou seja, os caminhos seguidos pelos raios X não sofrem deformações significativa quando atravessam o corpo. Isso permite prever a trajetória que os raios X irão seguir desde a fonte até o detector, que normalmente pode ser aproximada por um segmento de reta (Fig. 5.2). Com isso, sabendo-se a relação entre as intensidades de radiação incidente (I_0) e transmitida (I), dada pela integral de linha

$$\ln \left(\frac{I}{I_0} \right) = - \int_{\Gamma} \mu(x, y) d\ell, \quad (5.1)$$

pode-se determinar o coeficiente de atenuação $\mu(x, y)$, visto que o caminho Γ é conhecido.

Já no caso da TIE, o campo estabelecido é do tipo *soft field* (campo mole ou deformável), visto que as linhas de campo sofrem forte influência dos materiais internos do corpo sensoreado. Consequentemente, torna-se muito difícil, senão impossível, prever o caminho exato que o fluxo de corrente elétrica irá seguir no interior do domínio. Com isso, mesmo que se tenha as informações sobre a tensão aplicada $V - V_0$ e a densidade de corrente medida J , dada pela integral de linha

$$\frac{V - V_0}{J} = \int_{\Gamma(?)} \rho(x, y) d\ell, \quad (5.2)$$

não é possível determinar a resistividade $\rho(x, y)$, pois não se conhece o caminho Γ .

Essa dificuldade pode ser contornada utilizando-se outros métodos de reconstrução que não dependam do tipo de campo estabelecido. Uma alternativa é tratar a reconstrução da imagem na TIE como um problema de otimização. Nesta abordagem define-se uma função objetivo que confronta dois modelos, um computacional e outro experimental, e busca-se a distribuição de condutividade no interior do domínio que minimize esse funcional.

Figura 5.2 – Diferença entre os campos de sensoriamento da tomografia computadorizada (TC) e da tomografia de impedância elétrica (TIE). No caso da TC (*hard field*), as trajetórias dos raios-X não se deformam significativamente quando atravessam o corpo e na TIE (*soft field*), as linhas de campo elétrico são fortemente influenciadas pelos materiais internos do corpo.

5.2 Formulação do problema inverso da TIE

A modelagem matemática do problema da TIE, proposta por A. Calderón [98, 99]², resume-se num problema de valor de contorno (PVC), composto por uma equação diferencial parcial (EDP), que rege o potencial elétrico no interior do domínio, vinculada às condições de contorno (CC), que simulam os dados de excitação/resposta. Considerando um domínio puramente condutivo Ω , limitado pelo contorno $\partial\Omega$, e desprezando as fontes internas de correntes elétricas, o potencial elétrico ϕ em seu interior é regido por

$$\nabla \cdot (-\sigma \nabla \phi) = 0 \quad \text{em } \Omega, \quad (5.3)$$

onde σ corresponde a condutividade elétrica. O processo de excitação/resposta no contorno é modelado por

$$\phi = \bar{\phi} \quad \text{em } \partial\Omega, \quad (5.4)$$

²O trabalho de Calderón publicado em 2006 (Ref. [99]) é uma reimpressão do trabalho de 1980 (Ref. [98])

$$-\sigma \frac{\partial \phi}{\partial n} = \bar{J} \quad \text{em } \partial\Omega, \quad (5.5)$$

onde $\bar{\phi}$ e $\bar{J}$ representam, respectivamente, o potencial elétrico e a componente normal ao contorno $\partial\Omega$ do fluxo de corrente elétrica.

Na prática, pode-se impor um padrão de potencial elétrico conhecido sobre o contorno (excitação) e medir-se o fluxo de corrente elétrica resultante (resposta). Neste caso, a Eq. (5.4) corresponde à excitação, chamada condição de contorno do tipo Dirichlet (D) e a Eq. (5.5) corresponde à resposta, condição de contorno do tipo Neumann (N), obtendo-se um mapa Dirichlet - Neumann (mapa $D \rightarrow N$), como mostra a Fig. (5.3-a). Também é possível injetar corrente elétrica (excitação) sobre o contorno e medir os potenciais resultantes (resposta). Com isso, a Eq. (5.5) (condição de Neumann) corresponde à excitação e a Eq. (5.4) (condição de Dirichlet) representa a resposta, obtendo-se um mapa Neumann-Dirichlet (mapa $N \rightarrow D$), como mostra a Fig. (5.3-b). Finalmente é possível combinar esses dois tipos de condições de contorno. Em partes do contorno aplica-se potenciais e mede-se as correntes resultantes e nas partes complementares faz-se o oposto, injeta-se correntes e mede-se os potenciais resultantes.

Figura 5.3 – Formas básicas de excitação/resposta na TIE: (a) aplica-se um potencial elétrico $\bar{\phi}$ e mede-se o fluxo de corrente $\bar{J}$ (mapa Dirichlet - Neumann) e (b) aplica-se uma corrente elétrica $\bar{J}$ e mede-se o potencial elétrico $\bar{\phi}$ (mapa Neumann-Dirichlet).

Considerando o mapa $D \rightarrow N$, pode-se definir o *problema direto* da TIE da seguinte forma: conhecendo-se o potencial elétrico $\bar{\phi}$ sobre o contorno e a condutividade σ no interior do domínio, resolve-se o PVC dado pelas Eqs. (5.3) e (5.4) e

obtem-se o fluxo de corrente $\bar{J}$ (Eq. 5.5). Esse processo pode ser representado por

$$\wp(\bar{\phi}, \sigma) = \bar{J}. \quad (5.6)$$

Por sua vez, no problema de reconstrução da imagem da TIE, não se conhece a distribuição de condutividade σ no interior do domínio. As únicas informações acessíveis são os dados de excitação/resposta sobre o contorno. Considerando-se novamente o caso $D \rightarrow N$, o *problema inverso* da TIE consiste na inversão do operador dado pela Eq.(5.6), ou seja,

$$\wp^{-1}(\bar{\phi}, \bar{J}) = \sigma, \quad (5.7)$$

que representa o processo de determinar a distribuição condutividade σ no interior do domínio a partir do potencial $\bar{\phi}$ e do fluxo de corrente $\bar{J}$ conhecidos sobre o contorno.

Pode-se modelar a distribuição de condutividade σ no interior do domínio de duas formas diferentes. Na primeira, considera-se que a condutividade não é constante, ou seja, o valor de σ varia de ponto para ponto do domínio. Neste caso, adota-se como contorno $\partial\Omega$ do domínio apenas o contorno externo $\partial\Omega_{\text{ext}}$, no qual se aplica a excitação e se obtém a resposta. Com isso, a reconstrução da imagem consistirá em determinar os valores das condutividades nos pontos (ou regiões) do domínio, como mostra a Fig. (5.4-a).

Um modelo mais simples assume que o domínio possui condutividade constante ($\sigma = 1$), contendo algumas regiões com condutividade nula ($\sigma = 0$), que se comportam como materiais isolantes no interior de um meio condutor. Neste caso, considera-se como contorno $\partial\Omega$ do problema tanto o contorno externo $\partial\Omega_{\text{ext}}$ como o contorno interno $\partial\Omega_{\text{int}}$, ou seja, $\partial\Omega = \partial\Omega_{\text{ext}} \cup \partial\Omega_{\text{int}}$ ³. Com isso, o problema de reconstrução da imagem se resume na determinação das posições, formas e tamanhos das regiões internas não condutoras, como mostra a Fig. (5.4- b). Nesta segunda abordagem, o PVC dado pelas Eqs. (5.3), (5.4) e (5.5) pode ser reescrito como

$$\nabla^2 \phi = 0 \quad \text{em } \Omega, \quad (5.8)$$

³O contorno $\partial\Omega_{\text{int}}$ corresponde à união de todos os contornos das regiões internas não condutoras.

$$\phi = \bar{\phi} \quad \text{em} \quad \partial\Omega, \quad (5.9)$$

$$-\frac{\partial\phi}{\partial n} = \bar{J} \quad \text{em} \quad \partial\Omega, \quad (5.10)$$

e a distribuição espacial da condutividade σ passa a representar as posições, formas e tamanhos das regiões não condutoras dentro do domínio Ω .

Figura 5.4 – Duas abordagens diferentes para o domínio da TIE: (a) adota-se como contorno $\partial\Omega$ do domínio apenas o contorno externo $\partial\Omega_{\text{ext}}$ e considera-se que a condutividade σ varia de ponto para ponto dentro do domínio; (b) considera-se o domínio com condutividade constante ($\sigma = 1$), mas contendo algumas regiões não condutoras ($\sigma = 0$), e adota-se como contorno $\partial\Omega$ do problema tanto o contorno externo $\partial\Omega_{\text{ext}}$ como o contorno interno $\partial\Omega_{\text{int}}$, ou seja, $\partial\Omega = \partial\Omega_{\text{ext}} \cup \partial\Omega_{\text{int}}$.

No presente trabalho, será adotada a segunda abordagem, por dois motivos. Primeiro, o objetivo principal da tese consiste no desenvolvimento de um algoritmo de otimização eficiente para resolver problemas inversos de diferentes naturezas, e não especificamente da TIE. Segundo, a resolução do problema direto será feita através do Método dos Elementos de Contorno (MEC)⁴, cuja formulação é propícia no tratamento numérico da equação de Laplace (Eq. 5.8). Considerada uma das mais

⁴ *Boundary Element Method*, em inglês.

importantes técnicas de discretização, o MEC se diferencia das demais técnicas, como o Método das Diferenças Finitas e o Método dos Elementos Finitos, por requerer que somente o contorno do domínio seja discretizado [100, 101]. Especificamente no que se refere ao problema da TIE, o MEC apresenta mais uma vantagem, pois permite determinar os valores dos fluxos de corrente elétrica e dos potenciais elétricos sobre o contorno, sem a necessidade de se determinar os potenciais nos pontos internos do domínio [102, 103, 104].

Apresento agora um resumo da formulação do MEC na resolução do problema direto da TIE (Eqs. 5.8 e 5.9). Uma descrição mais detalhada sobre o MEC pode ser vista nas Refs. [105, 1, 2, 3]. Inicialmente, o contorno $\partial\Omega = \partial\Omega_{\text{ext}} \cup \partial\Omega_{\text{int}}$ é discretizado em $N_T = N_{\text{ext}} + N_{\text{int}}$ elementos (segmentos de reta) $\partial\Omega^{(1)}, \partial\Omega^{(2)}, \dots, \partial\Omega^{(N_T)}$, onde N_{ext} é o número de elementos no contorno externo e N_{int} é o número de elementos no contorno interno. Com isso, temos $\partial\Omega \approx \partial\Omega^{(1)} \cup \partial\Omega^{(2)} \cup \dots \cup \partial\Omega^{(N_T)}$. Em seguida, a Eq. (5.8) é transformada em equações integrais sobre o contorno que, na forma discretizada, são escritas como

$$\phi(\xi, \eta) = \sum_{k=1}^{N_T} \left[\bar{\phi}^{(k)} \int_{\partial\Omega^{(k)}} \frac{\partial}{\partial n} [\Phi(x, y; \xi, \eta)] ds(x, y) - \bar{J}^{(k)} \int_{\partial\Omega^{(k)}} \Phi(x, y; \xi, \eta) ds(x, y) \right],$$

para $(\xi, \eta) \in \Omega$, (5.11)

$$\frac{1}{2} \bar{\phi}(\xi, \eta) = \sum_{k=1}^{N_T} \left[\bar{\phi}^{(k)} \int_{\partial\Omega^{(k)}} \frac{\partial}{\partial n} [\Phi(x, y; \xi, \eta)] ds(x, y) - \bar{J}^{(k)} \int_{\partial\Omega^{(k)}} \Phi(x, y; \xi, \eta) ds(x, y) \right],$$

para $(\xi, \eta) \in \partial\Omega$, (5.12)

onde

$$\Phi(x, y; \xi, \eta) = \frac{1}{4\pi} \ln[(x - \xi)^2 + (y - \eta)^2], \quad (5.13)$$

define uma família de soluções para a Eq. (5.8), denominada de *solução fundamental*.

Considerando que, para cada elemento de contorno $\partial\Omega^{(k)}$, conhece-se o potencial $\bar{\phi}^{(k)}$ ou o fluxo de corrente elétrica $\bar{J}^{(k)}$, a Eq. (5.12) produz um sistema linear com N_T equações e N_T incógnitas. A resolução do sistema linear fornece o

par $(\bar{\phi}, \bar{J})$ para todos os elementos de contorno e, com isso, obtém a solução do problema direto da TIE. Além disso, mesmo não sendo necessário na TIE, o potencial elétrico $\phi(\xi, \eta)$ em um ponto $(\xi, \eta) \in \Omega$ pode ser determinado pela Eq. (5.11).

5.3 Algoritmo de recozimento simulado para a TIE

Considere o problema de reconstruir a imagem de uma seção transversal de um objeto de interesse e admita que esta seção tenha distribuição espacial de condutividade elétrica σ_{actual} ⁵. Através de n_e eletrodos, colocados no contorno desta seção, aplica-se um padrão de potencial $\Phi_{\text{app}} = [\phi^{(1)}, \phi^{(2)}, \dots, \phi^{(n_e)}]$ e mede-se, como resposta, um padrão de corrente elétrica $\mathbf{J}_{\text{actual}} = [J_{\text{actual}}^{(1)}, J_{\text{actual}}^{(2)}, \dots, J_{\text{actual}}^{(n_e)}]$. Tratado como um problema de otimização, a reconstrução da imagem dessa seção é realizada iterativamente. A cada iteração, gera-se uma solução candidata σ_{trial} e resolve-se o *problema direto* (Eqs. 5.8 e 5.9) através do BEM, obtendo-se um vetor de corrente elétrica numérico $\mathbf{J}_{\text{num}} = [J_{\text{num}}^{(1)}, J_{\text{num}}^{(2)}, \dots, J_{\text{num}}^{(n_e)}]$. A confrontação do domínio real com o modelo numérico é realizada por meio da função objetivo

$$f(\sigma_{\text{trial}}) = \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \left| J_{\text{actual}}^{(i)} - J_{\text{num}}^{(i)} \right|^2 + \lambda R(\sigma_{\text{trial}}), \quad (5.14)$$

onde $R(\sigma_{\text{trial}})$ é uma função de regularização e λ é um parâmetro de regularização. A solução numérica σ_{trial} que produzir o mínimo global da função objetivo corresponderá à aproximação para a distribuição de condutividade real σ_{actual} e será interpretada como a imagem da seção do corpo, como mostra a Fig. (5.5).

Como apresentado no Cap. 3, propomos uma nova formulação para generalizar o algoritmo de recozimento simulado, $\tilde{q}$ -SA, baseada nas funções $\tilde{q}$ -logaritmo e

⁵Para a abordagem de domínio adotada no presente trabalho, σ_{actual} representa as posições, formas e tamanhos das regiões internas não condutoras.

Figura 5.5 – Esquema do processo iterativo de reconstrução da imagem da TIE: a cada iteração, gera-se uma solução candidata σ_{trial} e resolve-se o *problema direto* (Eqs. 5.3 e 5.4), obtendo-se um fluxo corrente elétrica numérico $\mathbf{J}_{\text{num}}$. Este é confrontado com os dados experimentais $\mathbf{J}_{\text{actual}}$ através da função objetivo (Eq. 5.14). A distribuição de condutividade numérica σ_{trial} que produzir o mínimo global da função objetivo é interpretada como a imagem procurada.

$\tilde{q}$ -exponencial generalizadas

$$\begin{aligned}
 \ln_{\tilde{q}}(x) &= \begin{cases} \frac{x^{\tilde{q}} - 1}{\tilde{q}}, & \text{se } \tilde{q} \neq 0, \\ \ln(x), & \text{se } \tilde{q} = 0, \end{cases} \\
 \exp_{\tilde{q}}(x) &= \begin{cases} 0, & \text{se } \tilde{q}x < -1, \\ \lim_{\tilde{q}' \rightarrow \tilde{q}} (1 + \tilde{q}'x)^{1/\tilde{q}'}, & \text{se } \tilde{q}x \geq -1, \end{cases}
 \end{aligned} \tag{5.15}$$

onde $\tilde{q} \in \mathbb{R}$ [39, 38].

No algoritmo proposto, a geração de cada nova solução σ_{new} , a partir da solução atual σ_{old} , é feita através da distribuição de visitação

$$\sigma_{\text{new}} = \sigma_{\text{old}} + T_v G_{\tilde{q}_v}(\sigma), \quad (5.16)$$

onde T_v é a temperatura de visitação e

$$G_{\tilde{q}_v}(\sigma) = \sqrt{\frac{\tilde{q}_v}{2\pi}} \frac{\Gamma(1/\tilde{q}_v)}{\Gamma(1/\tilde{q}_v - 1/2)} \exp_{-\tilde{q}_v} \left(-\frac{\sigma^2}{2} \right), \quad (5.17)$$

é a função densidade de probabilidade (pdf) gaussiana generalizada padrão e $\tilde{q}_v \in \mathbb{R}$ é o parâmetro de generalização da visitação.

A temperatura inicial de visitação $T_v^{(0)}$ é definida de forma que, no início do processo, o algoritmo consiga explorar amplamente o espaço de soluções. Considerando que cada solução candidata σ_{trial} contenha informações sobre posição, tamanho e forma das regiões internas não condutoras do modelo numérico, a escolha de $T_v^{(0)}$ dependerá de como essas informações são definidas na geração desta solução.

Na nossa generalização do critério de Metropolis, a nova solução σ_{new} é comparada com a solução atual σ_{old} e aceita com probabilidade

$$p(\sigma_{\text{old}} \leftarrow \sigma_{\text{new}}) = \begin{cases} 1, & \text{se } \Delta f \leq 0, \\ \exp_{\tilde{q}_a}(-\Delta f/T_a), & \text{se } \Delta f > 0, \end{cases} \quad (5.18)$$

onde $\Delta f = f(\sigma_{\text{new}}) - f(\sigma_{\text{old}})$ é a variação da função objetivo, T_a é a temperatura de visitação e $\tilde{q}_a$ é o parâmetro de generalização da aceitação.

Para estimar temperatura inicial de aceitação $T_a^{(0)}$, o algoritmo gera μ soluções aleatórios $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_\mu$ e calcula suas correspondentes funções objetivos $f(\sigma_1), f(\sigma_2), \dots, f(\sigma_\mu)$. A partir da maior diferença encontrada para a função objetivo, $\Delta f_\mu = \max[f(\sigma_i)] - \min[f(\sigma_i)]$, para $i = 1, 2, \dots, \mu$, definimos

$$T_a^{(0)} = -\frac{\Delta f_\mu}{\ln_{\tilde{q}_a}(p_0)}, \quad (5.19)$$

onde $p_0 \in (0, 1)$ é a probabilidade inicial de aceitação de soluções que aumentam a função objetivo.

Para controlar a estocasticidade do processo, as temperaturas de aceitação T_a e de visitação T_v são resfriadas, a cada iteração t , de acordo com os cronogramas

$$T_a^{(t)} = \alpha^t T_a^{(0)}, \quad (5.20)$$

onde $\alpha \in (0, 1)$ é a taxa de resfriamento, e

$$T_v^{(t)} = T_v^{(0)} \frac{\ln_{\tilde{q}_v}(2)}{\ln_{\tilde{q}_v}(t+1)}. \quad (5.21)$$

Como discutido no Cap. 3, destacamos novamente que nossa formulação para a distribuição de visitação (Eqs. 5.16 e 5.17), critério de aceitação (Eq. 5.18) e cronograma de resfriamento (Eqs. 5.20 e 5.21) unificam as diferentes generalizações do algoritmo de recozimento simulado propostas na literatura.

Apresentamos a seguir o nosso algoritmo, proposto no Cap. 3, adaptado para o problema inverso da TIE, onde $t_{\max}$ é o número máximo de iterações e r o número de tentativas de novas soluções a cada iteração:

1. escolha os parâmetros da simulação: $t_{\max}$, r , α , $\tilde{q}_a$, $\tilde{q}_v$ e λ ;
2. defina a temperatura inicial $T_a^{(0)}$, usando a Eq. (5.19);
3. defina a temperatura inicial $T_v^{(0)}$, a partir das dimensões do domínio Ω ;
4. gere uma solução inicial aleatória σ_{old} ;
5. calcule o valor da função objetivo $f(\sigma_{\text{old}})$, usando a Eq. (5.14);
6. para t de 1 até $t_{\max}$, faça:
 - (a) repetir r vezes os seguintes passos:
 - i. gere uma nova solução σ_{new} , usando a Eq. (5.16);
 - ii. calcule o novo valor da função objetivo $f(\sigma_{\text{new}})$, usando a Eq. (5.14);
 - iii. faça $\Delta f = f(\sigma_{\text{new}}) - f(\sigma_{\text{old}})$;
 - iv. considere o critério dado pela Eq. (5.18):
 - se $f(\sigma_{\text{new}}) \leq f(\sigma_{\text{old}})$, então $\sigma_{\text{old}} = \sigma_{\text{new}}$;
 - senão, se $\exp_{\tilde{q}_a}(-\Delta f/T_a^{(t)}) > X \sim U(0, 1)$, então $\sigma_{\text{old}} = \sigma_{\text{new}}$;
 - (b) diminua as temperaturas $T_a^{(t)}$ e $T_v^{(t)}$ usando as Eqs. (5.20) e (5.21);
7. saída dos resultados

Nas próximas seções, apresentamos as simulações numéricas realizadas para avaliar o algoritmo e discutimos os resultados obtidos.

5.4 Experiências numéricas

Nesta seção, apresentamos as experiências numéricas e os resultados obtidos para avaliar o nosso algoritmo na resolução do problema inverso da tomografia de impedância elétrica. Em um primeiro momento, as experiências foram planejadas e executadas focando o método de otimização em si, sem considerar a regularização da solução. Em seguida, novas experiências foram realizadas para avaliar a influência da função de regularização.

5.4.1 Detecção de defeito em um fio condutor unidimensional

Nesta experiência, nosso objetivo foi avaliar o desempenho do algoritmo SA clássico combinado com o BEM na resolução de um exemplo simples, mas com relativa importância prática: a determinação da posição e tamanho de uma região não condutora no interior de um fio condutor. Em engenharia, esta região não condutora pode representar, por exemplo, um defeito de fabricação ou um desgaste normal pelo uso do fio, prejudicando seu uso. Já na medicina, ela pode modelar uma bolha de ar em uma artéria, dificultando o fluxo sanguíneo.

Nosso exemplo considera um fio cilíndrico condutor de comprimento 10.0 e diâmetro 1.0 (unidades arbitrárias), contendo uma região não condutora esférica de raio 0.3 com centro a 7.0 unidades de uma das extremidades. Para simular o processo de estímulo/resposta, aplicamos uma tensão elétrica, $V_{ab} = 12\text{ V}$, entre as extremidades a e b do fio ($V_a = 12\text{ V}$ e $V_b = 0\text{ V}$), e medimos o fluxo de corrente resultante, como mostra a Fig. (5.6). A partir da relação entre o potencial aplicado e o fluxo de corrente obtido, o problema consiste em determinar a posição e o raio da região não condutora.

Considerando a simetria do problema, modelamos o domínio, através do MEC, considerando-o como uma seção longitudinal do fio, com a quina inferior esquerda localizada na origem de um sistema cartesiano $x \times y$. O contorno externo foi discretizado em 220 elementos, sendo 100 elementos para cada lateral, superior e inferior, nos quais foi imposto $\bar{J}(x, 0) = \bar{J}(x, 1) = 0$, e 10 elementos para cada lado, direito e esquerdo, onde foi imposto $\bar{\phi}(0, y) = 12\text{ V}$ e $\bar{\phi}(10, y) = 0\text{ V}$.

Figura 5.6 – Esquema do exemplo numérico: fio condutor cilíndrico de comprimento 10.0 e diâmetro 1.0 (unidades arbitrárias) com uma região não condutora esférica de raio 0.3 localizada a 7.0 unidades da extremidade *a*.

Para construir a função objetivo, considerou-se dois modelos, o *modelo real*, cuja inclusão não condutora (inclusão real) foi definida com raio e coordenada do centro fixos, $R_{\text{actual}} = 0.3$ e $x_{\text{actual}} = 0.7$, respectivamente, e o *modelo numérico*, cuja inclusão não condutora (inclusão prospectiva) tem raio R_p e centro x_p variáveis. Para cada solução candidata, $\sigma_{\text{prosp}} = (R_p, x_p)$, a função objetivo foi definida como o erro quadrático médio entre os fluxos de corrente real $\mathbf{J}_{\text{actual}}$ e numérico $\mathbf{J}_{\text{num}}$,

$$f(\sigma_{\text{prosp}}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |J_{\text{actual}}^{(i)} - J_{\text{num}}^{(i)}|^2, \quad (5.22)$$

onde $J_{\text{actual}}^{(i)}$ e $J_{\text{num}}^{(i)}$ são, respectivamente, os fluxos real e numéricos no eletrodo i e n é o número de eletrodos.

Cada nova solução $\sigma_{\text{new}} = (R_p, x_p)_{\text{new}}$ foi gerada, a partir da solução atual $\sigma_{\text{old}} = (R_p, x_p)_{\text{old}}$, alterando-se os valores de R_p e x_p através de uma distribuição gaussiana

$$(R_p, x_p)_{\text{new}} = (R_p, x_p)_{\text{old}} + \left(1 + \frac{T_t}{T_0}\right) \delta \mathbf{N}(0, 1), \quad (5.23)$$

onde T_0 é a temperatura inicial, T_t é a temperatura na iteração t , e δ é um parâmetro que depende da amplitude do espaço de busca. A probabilidade de aceitar a nova solução seguiu o critério de Metropolis clássico,

$$p(\sigma_{\text{old}} \leftarrow \sigma_{\text{new}}) = \min[1, \exp(-\Delta f/T)], \quad (5.24)$$

onde $\Delta f = f(\sigma_{\text{new}}) - f(\sigma_{\text{old}})$ e T é a temperatura, que foi resfriada a cada iteração

t de acordo com um cronograma geométrico

$$T_t = \alpha^t T_0, \quad (5.25)$$

onde $\alpha \in (0, 1)$ é a taxa de resfriamento.

Teste 1 - Comportamento da função objetivo

Neste teste, procuramos explorar o comportamento da função objetivo dentro espaço de soluções, representando-a em gráfico de superfície em função das variáveis x_p e R_p . Para construir o gráfico, os valores de x_p e R_p variaram dentro do espaço de busca, $[2.0, 8.0] \times [0.1, 0.4]$, em uma rede regular de $61 \times 61 = 3721$ pontos. A função objetivo foi calculada para cada par (x_p, R_p) , e os resultados foram plotados, produzindo os gráficos mostrados na Fig. (5.7).

Pode-se notar que a superfície (Fig. 5.7) apresenta regiões praticamente planas e um estreito canal contendo um proeminente mínimo global. Essas patologias da função objetivo dificultam consideravelmente a resolução do problema, principalmente quando se utilizam métodos de otimização determinísticos. No entanto, mostraremos no próximo teste que o algoritmo SA, mesmo em sua versão clássica, é capaz de encontrar o mínimo global do problema.

Teste 2 - Aplicando o algoritmo *Simulated annealing*

Avaliaremos, agora, o desempenho do algoritmo SA na resolução do problema de encontrar a posição e o raio da região não condutora no interior do fio. Para realizar uma análise mais criteriosa, dividimos esse teste em três partes, Teste 2.a, Teste 2.b e Teste 2.c.

Nas duas primeiras partes, tratamos o problema considerando apenas uma variável, x_p e R_p , de cada vez. Na primeira, **Teste 2.a**, avaliamos a capacidade do algoritmo de encontrar apenas a posição da região não condutora. Para isso, fixamos o raio da inclusão prospectiva igual ao da inclusão real ($R_p = 0.3$) e variamos apenas a coordenada x_p no intervalo $[1.0, 9.0]$. Para gerar cada nova solução através da Eq. (5.23), foi escolhido $\delta = 0.8$. Na parte seguinte, **Teste 2.b**, o programa procurou apenas o raio da inclusão não condutora. Neste caso, fixamos $x_p = 0.7$ (igual da inclusão real) e escolhemos $\delta = 0.04$ na Eq. (5.23) para gerar cada raio R_p da inclusão prospectiva dentro do intervalo $[0.05, 0.45]$. Tanto para o Teste 2.a

(a)

(b)

Figura 5.7 – Superfície da função objetivo $f(x_p, R_p)$, em função das variáveis x_p e R_p , em escala (a) linear e (b) logarítmica. Nota-se que a superfície apresenta regiões planas e um estreito canal contendo o mínimo global.

como para o Teste 2.b, o programa foi executado 50 vezes, considerando o número máximo de iterações $t_{\max} = 1000$, *restart* $r = 1$, taxa de resfriamento $\alpha = 0.95$ e temperatura inicial $T_o = 1000$.

Finalmente, na última parte, **Teste 2.c**, consideramos a busca tanto pela posição como pelo raio da inclusão não condutora. Para isso, combinamos os dois códigos usados nas partes anteriores (Teste 2.a e Teste 2.b) em um único programa.

Com isso, a cada iteração, o programa per fez duas buscas separadas, uma variando a posição x_p e outra variando o raio R_p da inclusão prospectiva. Como nas duas partes anteriores, o programa foi executado 50 vezes, adotando-se $r = 1$, $T_0 = 1000$, $\delta = 0.8$, para gerar cada nova posição x_p , e $\delta = 0.04$, na geração de cada novo raio R_p . No entanto, considerando que neste teste temos um problema de otimização com duas variáveis, escolhemos $t_{\max} = 2000$ e $\alpha = 0.97$.

As soluções finais x_p e/ou R_p encontradas em cada uma das 50 execuções das três partes, Teste 2.a, Teste 2.b e Teste 2.c, foram armazenadas e seus valores mínimo, máximo e médio, bem com os desvios padrões, foram determinados. Os resultados são mostrados na Tab. 5.1. Especificamente no Teste 2.c, a execução que gerou o menor valor para a função objetivo (melhor execução) encontrou $x_p = 7.0005$ e $R_p = 0.3000$. Para essa execução, as evoluções dos valores da função objetivo, da posição e do raio da inclusão prospectiva durante o processo de otimização são mostrados nos gráficos da Fig. (5.8).

Tabela 5.1 – Valores mínimo, máximo, médio e desvio padrão da coordenada x_p do centro e do raio R_p da inclusão prospectiva para as três partes do Teste 2, considerando 50 execuções.

	Teste 2.a	Teste 2.b	Teste 2.c	
	x_p	R_p	x_p	R_p
min	6.9925	0.2995	6.8388	0.2445
max	7.0081	0.3005	7.5467	0.3163
média	7.0000	0.3001	7.1203	0.2876
dp	0.0032	0.0002	0.2053	0.0214

Concluindo, nessa experiência numérica, avaliamos o desempenho do algoritmo SA clássico na determinação da posição e do tamanho de uma inclusão não condutora no interior de um fio condutor. Apesar de que a superfície da função objetivo apresentar patologias que dificultam sua otimização, o algoritmo implementado baseado no SA foi capaz de encontrar uma solução bastante satisfatória para o problema.

Figura 5.8 – Evolução dos valores (a) do raio R_p , (b) da coordenada x_p e (c) da função objetivo, durante a melhor execução do Teste 2.c. Os valores da função objetivo $f(x)$, da coordenada x_p e do raio R_p oscilam bastante no início do processo, mas convergem para $f(x) \approx 10^{-17}$, $x_p \approx 0.7$ e $R_p \approx 0.3$ quando $t > 1400$.

5.4.2 Desempenho do algoritmo em função do parâmetro $\tilde{q}_v$

Vamos estender o caso tratado na experiência anterior, considerando um domínio bidimensional. Numa primeira experiência, consideremos o *domínio real* como um círculo de raio unitário, com centro na origem do sistema cartesiano $x \times y$, contendo uma única inclusão interna não condutora circular, de raio $R_{\text{actual}} = 0.2$ e centrada no ponto de coordenadas $x_{\text{actual}} = 0.2$ e $y_{\text{actual}} = 0.3$, como mostra a Fig. (5.9-a). Com isso, o problema de reconstrução da imagem se resume em

determinar a solução $\sigma_{\text{actual}} = [x_{\text{actual}}, y_{\text{actual}}, R_{\text{actual}}]$.

Para resolver o problema direto (Eqs. 5.8–5.10) através do MEC, os contornos externo e interno foram discretizados em 64 e 30 elementos, respectivamente. A modelagem da quantidade e tamanho finitos dos eletrodos foi feita impondo-se condição de contorno de Dirichlet em 32 elementos do contorno externo, com perfil de excitação senoidal, como mostra a Fig. (5.9-b). Alternadamente a esses elementos, nos outros 32 foi imposto fluxo de corrente nulo, simulando a ausência de eletrodo. Finalmente, também consideramos fluxo de corrente nulo nos 30 elementos do contorno da inclusão interna. A escolha do perfil de excitação senoidal justifica-se pela sua maior sensibilidade, como pode ser visto no Apêndice C. Ainda na Fig. (5.9-b), mostramos os fluxos de corrente elétrica medidos nos 32 elementos que simulam os eletrodos.

Figura 5.9 – (a) Domínio condutor circular, de raio unitário, centrado na origem do sistema cartesiano $x \times y$, contendo uma inclusão não condutora circular, de raio 0.2 e centro na posição (0.2, 0.3). (b) Potencial elétrico aplicado e fluxo de corrente medidos em 32 elementos do contorno externo, considerando perfil de excitação senoidal.

O objetivo dessa experiência numérica é avaliar o desempenho do nosso algoritmo em relação aos parâmetros $\tilde{q}_a$ e $\tilde{q}_v$, considerando os valores $\tilde{q}_a = 0, 0.8$ e 1.8 e $\tilde{q}_v = 0, 0.1, \dots, 1.2$, e adotando resfriamento geométrico da temperatura de aceitação (Eq. 5.20). Para cada combinação $(\tilde{q}_a, \tilde{q}_v)$, o código foi executado 50 vezes, partindo de soluções candidatas iniciais diferentes e consideramos $t_{\text{max}} = 200$, $r = 1$

e $\alpha = p_0 = 0.9$, obtendo-se 50 soluções numéricas $\sigma_{\text{num}}^{(i)} = [x_{\text{num}}^{(i)}, y_{\text{num}}^{(i)}, R_{\text{num}}^{(i)}]$, para $i = 1, 2, \dots, 50$. Para medir a precisão das soluções numéricas obtidas, definimos o erro médio

$$\langle E \rangle = \frac{1}{50} \sum_{i=1}^{50} [(x_{\text{actual}} - x_{\text{num}})^2 + (y_{\text{actual}} - y_{\text{num}})^2 + (R_{\text{actual}} - R_{\text{num}})^2], \quad (5.26)$$

cujos valores obtidos são mostrados no gráfico da Fig. (5.10).

Figura 5.10 – (a) Valores de $\langle E \rangle$, dado pela Eq. (5.26) e (b) taxa de sucesso, considerando diferentes valores de $\tilde{q}_a$ e $\tilde{q}_v$. Para os três valores de $\tilde{q}_a$, o valor de $\langle E \rangle$ diminui e a taxa de sucesso aumenta consideravelmente para $\tilde{q}_v > 0.8$.

Fica evidente que o desempenho do algoritmo melhora consideravelmente

para $\tilde{q}_v > 0.8$, atingindo um valor ótimo com $\tilde{q}_v \approx 1.0$. Esse resultado corrobora aqueles obtidos na Seção 3.8, na qual o algoritmo foi testado com funções objetivos analíticas, e na Seção 4.4, quando tratamos do problema inverso de determinar o espectro de raios X. Portanto, temos evidências fortes para reforçar a tese de que nosso algoritmo, mesmo considerando problemas bastante diferentes, apresenta um regime ótimo, que é quando $\tilde{q}_v$ assumem valores nos quais o segundo momento da distribuição $\tilde{q}$ -gaussiana (Eq. 5.17) diverge.

5.4.3 Ajuste da solução numérica com o domínio real

Aqui, o objetivo é avaliar qualitativamente o ajuste da solução numérica, obtida pelo nosso algoritmo, com o *domínio real*. Como na experiência anterior, consideramos o *domínio real* como um círculo de raio unitário, com centro na origem do sistema cartesiano $x \times y$, cujo contorno externo é discretizado em 64 elementos. Destes, 32 elementos simulam os eletrodos, nos quais são aplicados os potenciais de excitação, e nos outros 32, intercalados com os anteriores, é imposto fluxo de corrente nulo. Em todos os experimentos desta seção, o código foi executado considerando $t_{\max} = 200$, $r = 10$, $\tilde{q}_a = 0$ e $\alpha = p_0 = 0.9$, com resfriamento geométrico da temperatura de aceitação (Eq. 5.20). No entanto, consideramos apenas três valores para o parâmetro $\tilde{q}_v$, a saber: $\tilde{q}_v = 0$ (distribuição gaussiana clássica), $\tilde{q}_v = 0.7$ (divergência do segundo momento da distribuição $\tilde{q}$ -gaussiana) e $\tilde{q}_v = 1.0$ (distribuição de Cauchy).

Consideramos dois domínios reais diferentes: a) um que contém três inclusões circulares não condutoras e b) outro que contém uma inclusão não condutora com a forma de um “feijão”, como mostrado à esquerda da Fig. (5.11). Como na experiência anterior, aplicamos o perfil de excitação senoidal, mas considerando duas fases opostas do perfil de excitação, no caso do domínio a), e três fases, no caso do domínio b), como mostram os gráficos à esquerda da Figs. (5.11), juntamente com fluxos medidos nos elementos que simulam os eletrodos.

A evolução da função objetivo $f(\sigma_{\text{trial}})$ com a iteração t e os domínios contendo as inclusões reais e as soluções obtidas pelo algoritmo estão mostrados nas Figs. (5.9) e (5.13). Os resultados mostram que o algoritmo proposto é eficiente na determinação da posição, tamanho e forma das regiões internas não condutoras.

Figura 5.11 – Domínios condutores circulares, de raios unitários, centrados na origem do sistema cartesiano $x \times y$ (esquerda), e os perfis excitação/resposta nos 32 elementos do contorno externo (direita), considerando (a) três inclusões internas circulares e (b) uma inclusão interna com a forma de “feijão”.

Reforçando nossa proposta de que o regime ótimo do algoritmo ocorre com a divergência do segundo momento da distribuição $\tilde{q}$ -gaussiana, nota-se um melhor ajuste das inclusões numéricas às respectivas inclusões reais para $\tilde{q}_v = 0.7$ e $\tilde{q}_v = 1.0$ do que para $\tilde{q}_v = 0$.

5.5 Conclusão

Neste capítulo, tratamos de um importante problema inverso na área de Física Médica: a reconstrução da imagem na tomografia de impedância elétrica (TIE). Após uma breve revisão bibliográfica sobre a TIE, apresentamos a formulação matemática do problema, dividindo em duas partes: i) o problema direto, que corresponde à determinação do fluxo de corrente no contorno do domínio, sabendo-se o potencial aplicado neste mesmo contorno e distribuição de condutividade interna, e ii) o problema inverso, que é a determinação da distribuição de condutividade no interior do domínio, conhecendo-se os potenciais e os fluxos de corrente no contorno. Para resolver o problema direto, desenvolvemos um algoritmo baseado no método dos elementos de contorno. Já para resolver o problema inverso, aplicamos o nosso algoritmo de recozimento simulado $\tilde{q}$ -SA. Para avaliar o algoritmo proposto, foram realizadas experiências numéricas, especificamente focando em domínios condutores, contendo regiões internas não condutoras. Os resultados obtidos mostram que nosso algoritmo é eficiente e preciso na determinação da posição, tamanho e forma das regiões não condutoras e reforçam a tese de que seu desempenho ótimo ocorre quando o segundo momento da distribuição de visitação diverge.

Figura 5.12 – Comportamento da função objetivo $f(\sigma_{\text{trial}})$ com a iteração t e o domínio com três inclusões circulares não condutoras reais (espaços vazios) e as soluções obtidas pelo algoritmo (linha tracejada), considerando $\tilde{q}_a = 0$, com resfriamento geométrico da temperatura de aceitação e (a) $\tilde{q}_v = 0$, (b) $\tilde{q}_v = 0.7$ e (c) $\tilde{q}_v = 1.0$.

Figura 5.13 – Comportamento da função objetivo $f(\sigma_{\text{trial}})$ com a iteração t e o domínio com a inclusão não condutora real (espaço vazio) e as soluções obtidas pelo algoritmo (linha tracejada), considerando $\tilde{q}_a = 0$, com resfriamento geométrico da temperatura de aceitação e (a) $\tilde{q}_v = 0$, (b) $\tilde{q}_v = 0.7$ e (c) $\tilde{q}_v = 1.0$.

Conclusões

Problemas inversos são de grande importância prática na modelagem de processos em física e engenharia. Ao mesmo tempo, apresentam, em geral, difícil resolução, visto que são classificados como mal-postos. Quando tratados como um problema de otimização, eles requerem a minimização de uma função objetivo, que mede o ajuste do modelo teórico aos dados experimentais. Considerando que, normalmente, essa função é não-convexa, é interessante o uso de métodos de otimização estocásticos. Além disso, a não unicidade da solução e sua instabilidade em relação aos dados de entrada clamam por uma boa função de regularização.

Aqui, apresentamos uma nova generalização do algoritmo de recozimento simulado e propomos uma função de regularização generalizada, por meio das funções $\tilde{q}$ -logaritmo e $\tilde{q}$ -exponencial. Introduzindo um parâmetro $\tilde{q}_a \in \mathbb{R}$, generalizamos o critério de Métropolis e propomos um resfriamento generalizado da temperatura de aceitação, $\tilde{q}_a$ -logarítmico. Com um segundo parâmetro, $\tilde{q}_v \in \mathbb{R}$, propomos uma distribuição de visitação $\tilde{q}_v$ -gaussiana e um cronograma de resfriamento da temperatura de visitação generalizado, $\tilde{q}_v$ -logarítmico. Finalmente, formulamos uma função de regularização generalizada que, por meio de um parâmetro $\tilde{q}_r \in \mathbb{R}$, transita continuamente entre as regularizações entrópica e de Tikhonov, e contém estas como casos particulares para $\tilde{q}_r = 0$ e $\tilde{q}_r \rightarrow \infty$, respectivamente.

Inicialmente, avaliamos o algoritmo proposto por meio de experiências numéricas para minimizar três funções objetivos analíticas. Especificamente, procuramos explorar a eficiência do algoritmo em função dos parâmetros $\tilde{q}_a$ e $\tilde{q}_v$ e comparar os cronogramas de resfriamento da temperatura de aceitação $\tilde{q}_a$ -logarítmico e geométrico. Os resultados permitiram concluir, primeiramente, que o parâmetro $\tilde{q}_a$

exerce forte influência no desempenho do algoritmo, quando adota-se o resfriamento $\tilde{q}_a$ -logarítmico, enquanto que o parâmetro $\tilde{q}_v$ pouco influencia. Já com o resfriamento geométrico, ocorre o oposto, ou seja, o parâmetro $\tilde{q}_a$ têm pouca influência e o parâmetro $\tilde{q}_v$ atua fortemente na eficiência do algoritmo.

Os resultados sugerem ainda que o algoritmo apresenta um regime ótimo de desempenho, quando consideramos o resfriamento da temperatura de visitação geométrico, distribuição de visitação $\tilde{q}_v$ -gaussiana e resfriamento de temperatura de visitação $\tilde{q}_v$ -logarítmica, com $\tilde{q}_v > 0.8$. Esses resultados mostram que a divergência do segundo momento da distribuição $\tilde{q}_v$ -gaussiana permite uma busca mais eficiente no espaço de soluções, contribuindo para uma melhora significativa do algoritmo.

Para reforçar a avaliação da eficiência e robustez do algoritmo, realizamos experiências numéricas para resolver dois importantes e difíceis problemas inversos na área de Física Médica: a determinação da distribuição de fluência de um feixe de raios X, a partir de sua curva de atenuação, e a reconstrução da imagem na tomografia de impedância elétrica. Os resultados mostram que o algoritmo é bastante preciso e reforçam a tese de que o regime ótimo ocorre quando $\tilde{q}_v > 0.8$, mesmo considerando dois problemas com formulações bastante diferentes. Além disso, ficou evidente o papel crucial da nossa função de regularização na obtenção de soluções estáveis e coerentes com a realidade física.

Esperamos, portanto, ajudar na difícil tarefa de lidar com problemas inversos, visto seu papel relevante nas áreas de física e engenharia. Especificamente, nossa contribuição inclui o desenvolvimento de um algoritmo de otimização e de uma função de regularização eficientes, além de sugerir fortemente um regime ótimo de parâmetros que garante a melhor desempenho do algoritmo.

Funções logaritmo e exponencial generalizadas

Neste apêndice, apresentamos um resumo dos trabalhos desenvolvidos por A. S. Martinez, R. S. González, T. J. Arruda e C. A. S. Terçariol sobre a generalização das funções logaritmo e exponencial [38, 39, 106]. Diferentemente da proposta de C. Tsallis [32, 33], que é baseada na termodinâmica não-extensiva, as funções generalizadas apresentadas aqui são baseadas em argumentos puramente geométricos.

A.1 Função logaritmo generalizada

A função logaritmo natural, $\ln(x) : \mathbb{R}_+^* \rightarrow \mathbb{R}$, pode ser definida como sendo a área sob a curva $f(t) = 1/t$, entre $t = 1$ e $t = x$,

$$\ln(x) = \int_1^x \frac{1}{t} dt, \quad (\text{A.1})$$

como mostra a Fig. (A.1-a). A partir dessa definição, pode-se mostrar que $\ln(xy) = \ln(x) + \ln(y)$ e que a função $\ln(x)$ cresce monotonicamente com x , como mostra a Fig. (A.1-b).

A proposta de generalização das funções logaritmo e exponencial, através de um parâmetro $\tilde{q} \in \mathbb{R}$, considera a família de funções $f_{\tilde{q}}(t) : \mathbb{R}_+^* \rightarrow \mathbb{R}$,

$$f_{\tilde{q}}(t) = \frac{1}{t^{1-\tilde{q}}}, \quad (\text{A.2})$$

que corresponde a família de hipérboles, para $\tilde{q} < 1$, e representa leis de potência para $\tilde{q} > 1$. O comportamento da função $f_{\tilde{q}}(t) = 1/t^{1-\tilde{q}}$, para alguns valores do

Figura A.1 – (a) Definição da função $\ln(x)$ como sendo a área sob a curva $f(t) = 1/t$, entre $t = 1$ e $t = x$ e (b) o comportamento da função $\ln(x)$ crescendo monotonicamente com x .

parâmetro $\tilde{q}$, é mostra na Fig. (A.2). Para $\tilde{q} = 0$ e $\tilde{q} = 1/2$, por exemplo, a Eq. (A.2) fornece, respectivamente, a hipérbole equilátera $f_0 = 1/t$ e a hipérbole assimétrica $f_{1/2} = 1/\sqrt{t}$. Já para $\tilde{q} = 1$, temos a função $f_1(t) = 1$ e, para $\tilde{q} = 3/2$, obtemos a função $f_{3/2} = \sqrt{t}$. A mudança de concavidade das leis de potência ocorre para $\tilde{q} = 2$, quando obtemos a função linear $f_2 = t$.

Com isso, analogamente à definição clássica da função logaritmo natural, define-se a função $\tilde{q}$ -logaritmo generalizada, $\ln_{\tilde{q}}(x)$, como a área sob a curva $f_{\tilde{q}}(t) = 1/t^{1-\tilde{q}}$, compreendida no intervalo $[1, x]$,

$$\ln_{\tilde{q}}(x) = \int_1^x \frac{dt}{t^{1-\tilde{q}}} = \lim_{\tilde{q}' \rightarrow \tilde{q}} \frac{x^{\tilde{q}'} - 1}{\tilde{q}'} = \begin{cases} \frac{x^{\tilde{q}} - 1}{\tilde{q}}, & \text{se } \tilde{q} \neq 0, \\ \ln x, & \text{se } \tilde{q} = 0, \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

cujo comportamento, para alguns valores de $\tilde{q}$ são mostrados na Fig. (A.3). Uma importante consequência dessa definição é que, diferentemente da função logaritmo natural clássica ($\tilde{q} = 0$), a função $\ln_{\tilde{q}}(x)$ não diverge, simultaneamente, nos limites $x \rightarrow 0^+$ e $x \rightarrow +\infty$, quando $\tilde{q} \neq 0$. De fato, pode-se verificar que a imagem da função $\tilde{q}$ -logaritmo é

Figura A.2 – Comportamento da função $f_{\tilde{q}}(t) = 1/t^{1-\tilde{q}}$. Para $\tilde{q} = 0$ e $\tilde{q} = 1/2$ temos, respectivamente, a hipérbole equilátera $f_0 = 1/t$ e a hipérbole assimétrica $f_{1/2} = 1/\sqrt{t}$. Com $\tilde{q} = 1$ e $\tilde{q} = 3/2$, obtemos as funções $f_1(t) = 1$ e $f_{3/2} = \sqrt{t}$. Já $\tilde{q} = 2$ fornece a função linear $f_2 = t$, que corresponde à mudança de concavidade das leis de potência.

$$\text{Im}[\ln_{\tilde{q}}(x)] = \begin{cases} (-\infty, -1/\tilde{q}), & \text{se } \tilde{q} < 0, \\ \mathbb{R}, & \text{se } \tilde{q} = 0, \\ (-1/\tilde{q}, +\infty), & \text{se } \tilde{q} > 0. \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

A seguir, apresentamos algumas propriedades que podem ser obtidas a partir da definição dada pela Eq. (A.3). Primeiramente, pelo Teorema Fundamental do Cálculo, pode-se obter a derivada primeira e a derivada de ordem n da função $\ln_{\tilde{q}}(x)$, respectivamente, como

$$\frac{d \ln_{\tilde{q}}(x)}{dx} = \frac{1}{x^{1-\tilde{q}}} = x^{\tilde{q}-1} \quad \text{e} \quad \frac{d^n \ln_{\tilde{q}}(x)}{dx^n} = x^{\tilde{q}-n} \prod_{k=1}^{n-1} (\tilde{q} - k). \quad (\text{A.5})$$

Figura A.3 – Comportamento da função $\ln_{\tilde{q}}(x)$, definida na Eq. (A.3), para $\tilde{q} = 0$, $\tilde{q} = 1/2$, $\tilde{q} = 1$, $\tilde{q} = 3/2$ e $\tilde{q} = 2$.

Já com relação à integral, pode-se mostrar que

$$\int \ln_{\tilde{q}}(x) dx = \frac{x}{1 + \tilde{q}} [\ln_{\tilde{q}}(x) - 1] + c, \quad (\text{A.6})$$

onde c é uma constante. Finalmente, sendo $\alpha \neq 0$ um escalar, temos que

$$\ln_{\tilde{q}}(x^\alpha) = \frac{(x^\alpha)^{\tilde{q}} - 1}{\tilde{q}} = \alpha \left[\frac{x^{\alpha\tilde{q}} - 1}{\alpha\tilde{q}} \right] = \alpha \ln_{\alpha\tilde{q}}(x), \quad (\text{A.7})$$

sendo que, para o caso particular $\alpha = -1$, obtêm-se

$$\ln_{\tilde{q}}\left(\frac{1}{x}\right) = -\ln_{-\tilde{q}}(x). \quad (\text{A.8})$$

A.2 Função exponencial generalizada

Considerando que a função $\tilde{q}$ -logaritmo, definida pela Eq. (A.3), é bijetora, define-se sua inversa como sendo a função $\tilde{q}$ -exponencial generalizada, $\exp_{\tilde{q}}(x)$. Geo-

metricamente, a função $\exp_{\tilde{q}}(x)$ pode ser interpretada como sendo o valor de y para o qual a área sob a curva $f(t) = 1/t^{1-\tilde{q}}$, entre $t = 0$ e $t = y$, é igual a x , ou seja, $\ln_{\tilde{q}}(y) = x$. Portanto, temos

$$\exp_{\tilde{q}}(x) = \begin{cases} \lim_{\tilde{q}' \rightarrow \tilde{q}} [1 + \tilde{q}' x]^{1/\tilde{q}'}, & \text{se } \tilde{q}x \geq -1, \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

sendo $\exp_{\tilde{q}}(x) \geq 0$ e $\exp_{\tilde{q}}(0) = 1$, para qualquer valor de $\tilde{q}$. A Fig. (A.3) ilustra o comportamento da função $\tilde{q}$ -exp(x) para alguns valores de $\tilde{q}$.

Figura A.4 – Comportamento da função $\exp_{\tilde{q}}(x)$, definida na Eq. (A.9), para $\tilde{q} = 0$, $\tilde{q} = 1/2$, $\tilde{q} = 1$, $\tilde{q} = 3/2$ e $\tilde{q} = 2$.

Da mesma forma como fizemos para a função $\tilde{q}$ -logaritmo, apresentamos algumas propriedades da função $\tilde{q}$ -exponencial. Da definição dada pela Eq. (A.9), obtemos as derivadas de primeira ordem e de ordem n da função $\tilde{q}$ -exponencial

como

$$\frac{d \exp_{\tilde{q}}(x)}{dx} = [\exp_{\tilde{q}}(x)]^{1-\tilde{q}} \quad \text{e} \quad \frac{d^n \exp_{\tilde{q}}(x)}{dx^n} = [\exp_{\tilde{q}}(x)]^{1-n\tilde{q}} \prod_{k=0}^{n-1} (1 - k\tilde{q}), \quad (\text{A.10})$$

bem como a integral

$$\int \exp_{\tilde{q}}(x) dx = \frac{[\exp_{\tilde{q}}(x)]^{1+\tilde{q}}}{1+\tilde{q}} + c, \quad (\text{A.11})$$

onde c é uma constante. Finalmente, dado um escalar $\alpha \neq 0$, pode-se mostrar que

$$[\exp_{\tilde{q}}(x)]^\alpha = (1 + \tilde{q}x)^{\alpha/\tilde{q}} = \left[1 + \left(\frac{\tilde{q}}{\alpha}\right) \alpha x\right]^{\alpha/\tilde{q}} = \exp_{\tilde{q}/\alpha}(\alpha x), \quad (\text{A.12})$$

que, especificamente para $\alpha = -1$, resulta em

$$\frac{1}{\exp_{\tilde{q}}(x)} = \exp_{-\tilde{q}}(-x). \quad (\text{A.13})$$

Uma propriedade bem conhecida das funções logaritmo é sua aditividade em função do produto dos argumentos: $\log_a(xy) = \log_a x + \log_a y$. Uma situação similar ocorre com a função exponencial: $a^x a^y = a^{x+y}$. Essas propriedades não ocorrem para as funções $\tilde{q}$ -logaritmo e $\tilde{q}$ -exponencial, exceto para $\tilde{q} = 0$. No entanto, como veremos a seguir, a aditividade pode ser recuperada redefinindo os operadores aritméticos soma e produto e, consequentemente, seus opostos: subtração e divisão, respectivamente.

A.3 Generalização dos operadores algébricos

Como se sabe, as funções logaritmo e exponencial tradicionais possuem as importantes propriedades

$$\ln(ab) = \ln(a) + \ln(b), \quad (\text{A.14})$$

$$\exp(a) \exp(b) = \exp(a + b), \quad (\text{A.15})$$

que não são válidas para as funções $\tilde{q}$ -logaritmo (Eq. A.3) e $\tilde{q}$ -exponencial (Eq. A.9), exceto para o caso particular $\tilde{q} = 0$. Para estender as propriedades dadas pelas Eqs. (A.14) e (A.15) às funções $\ln_{\tilde{q}}(x)$ e $\exp_{\tilde{q}}(x)$, para qualquer valor de $\tilde{q}$, deve-se redefinir os operadores algébricos *soma/subtração* e *produto/divisão*.

Considere, por exemplo, o produto duas funções $\tilde{q}$ -exponenciais. Através da definição dada pela Eq. (A.9), pode-se mostrar que $\exp_{\tilde{q}}(a) \exp_{\tilde{q}}(b) = \exp_{\tilde{q}}(a + b + \tilde{q}ab)$. Com isso, para recuperarmos a propriedade expressa pela Eq. (A.15), define-se a operação $\tilde{q}$ -soma como

$$a \oplus_{\tilde{q}} b = a + b + \tilde{q}ab, \quad (\text{A.16})$$

obtendo-se $\exp_{\tilde{q}}(a) \exp_{\tilde{q}}(b) = \exp_{\tilde{q}}(a \oplus_{\tilde{q}} b)$. Além disso, a Eq. (A.16) reassume a forma da soma algébrica tradicional quando $\tilde{q} = 0$.

Analogamente, podemos definir as operações $\tilde{q}$ -subtração, $\tilde{q}$ -produto e $\tilde{q}$ -divisão, respectivamente, como

$$a \ominus_{\tilde{q}} b = \frac{a - b}{1 + \tilde{q}b}, \quad (\text{A.17})$$

$$a \otimes_{\tilde{q}} b = [a^{\tilde{q}} + b^{\tilde{q}} - 1]_+^{1/\tilde{q}}, \quad (\text{A.18})$$

$$a \oslash_{\tilde{q}} b = [a^{\tilde{q}} - b^{\tilde{q}} + 1]^{1/\tilde{q}}. \quad (\text{A.19})$$

A generalização das operações algébricos mostradas nas Eqs. (A.16-A.19) possuem as seguintes propriedades:

$$\ln_{\tilde{q}}(ab) = \ln_{\tilde{q}}(a) \oplus_{\tilde{q}} \ln_{\tilde{q}}(b), \quad (\text{A.20})$$

$$\exp_{\tilde{q}}(a) \exp_{\tilde{q}}(b) = \exp_{\tilde{q}}(a \oplus_{\tilde{q}} b), \quad (\text{A.21})$$

$$\ln_{\tilde{q}}(a \otimes_{\tilde{q}} b) = \ln_{\tilde{q}}(a) + \ln_{\tilde{q}}(b), \quad (\text{A.22})$$

$$\exp_{\tilde{q}}(a) \otimes_{\tilde{q}} \exp_{\tilde{q}}(b) = \exp_{\tilde{q}}(a + b), \quad (\text{A.23})$$

$$\ln_{\tilde{q}}\left(\frac{a}{b}\right) = \ln_{\tilde{q}}(a) \ominus_{\tilde{q}} \ln_{\tilde{q}}(b), \quad (\text{A.24})$$

$$\frac{\exp_{\tilde{q}}(a)}{\exp_{\tilde{q}}(b)} = \exp_{\tilde{q}}(a \ominus_{\tilde{q}} b), \quad (\text{A.25})$$

$$\ln_{\tilde{q}}(a \oslash_{\tilde{q}} b) = \ln_{\tilde{q}}(a) - \ln_{\tilde{q}}(b), \quad (\text{A.26})$$

$$\exp_{\tilde{q}}(a) \oslash_{\tilde{q}} \exp_{\tilde{q}}(b) = \exp_{\tilde{q}}(a - b). \quad (\text{A.27})$$

Além disso, pode-se generalizar os operadores somatório e produtório redefinindo-os, respectivamente como,

$$\sum_{i=1}^n \oplus_{\tilde{q}} x_i = x_1 \oplus_{\tilde{q}} x_2 \oplus_{\tilde{q}} \cdots \oplus_{\tilde{q}} x_n = \frac{1}{\tilde{q}} \left[\prod_{i=1}^n (1 + \tilde{q} x_i) - 1 \right], \quad (\text{A.28})$$

$$\prod_{i=1}^n \otimes_{\tilde{q}} x_i = x_1 \otimes_{\tilde{q}} x_2 \otimes_{\tilde{q}} \cdots \otimes_{\tilde{q}} x_n = \left[\sum_{i=1}^n x_i^{\tilde{q}} - (n-1) \right]^{1/\tilde{q}}. \quad (\text{A.29})$$

Acreditando que o essencial sobre as funções $\tilde{q}$ -logaritmo, $\tilde{q}$ -exponencial e operadores algébricos generalizados foram abordados neste Apêndice, ficam indicadas as Refs. [38, 39, 106] para os leitores interessados em conhecer o assunto com mais profundidade.

Método Box-Müller generalizado

Neste apêndice, apresentamos o método Box-Müller generalizado para gerar números aleatórios com distribuição $\tilde{q}$ -gaussiana. Iniciamos apresentando a proposta original de G. E. P. Box e M. E. Müller, publicada em 1958, para geração de distribuições gaussianas tradicionais [107]. Em seguida, fazemos um resumo do trabalho de W. Thistleton *et al.* [69], que generaliza a proposta de Box & Müller para distribuições gaussianas generalizadas.

B.1 Geração da distribuição gaussiana clássica

Em uma nota publicada em 1958, no *The Annals of Mathematical Statistics*, G. E. P. Box e M. E. Muller propõem uma técnica simples e precisa para gerar números aleatórios com distribuição normal padrão [107]. Na época, a proposta dos autores foi disponibilizar uma alternativa às tradicionais tabelas de números aleatórios, o que ajudou no desenvolvimento da então incipiente ciência da computação. Em essência, o método Box-Müller, como ficou conhecido, baseia-se na transformação de dois números aleatórios, extraídos de uma distribuição uniforme, em dois números com distribuições normais e não correlacionados.

Para descrever os fundamentos do método, considere o processo de forma inversa: sejam Z_1 e Z_2 números aleatórios não correlacionados com distribuição normal padrão $N(0, 1)$. Sendo independentes, a função densidade de probabilidade (pdf) conjunta $f(z_1, z_2)$ é dada por

$$f(z_1, z_2) = f(z_1)f(z_2) = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z_1^2}{2}\right) \right] \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z_2^2}{2}\right) \right] = \frac{1}{2\pi} \exp\left[-\frac{(z_1^2 + z_2^2)}{2}\right] \quad (\text{B.30})$$

cuja superfície é mostrada na Fig. (B.30-a).

As curvas de nível da pdf dada pela Eq. (B.30), por sua vez, são circunferências concêntricas, como mostra as Figs. (B.30-b) e (B.30-c). Portanto, a variável $\theta = \arctan(z_1/z_2)$ está distribuída uniformemente no intervalo $[0, 2\pi]$ e, consequentemente, a variável aleatória

$$u_1 = \frac{1}{2\pi} \arctan\left(\frac{z_1}{z_2}\right) \quad (\text{B.31})$$

apresenta densidade de probabilidade uniforme no intervalo $[0, 1]$.

Como Z_1 e Z_2 apresentam distribuição normal padrão, as variáveis Z_1^2 e Z_2^2 apresentam distribuição qui-quadrado com um grau de liberdade. Com isso, a soma dessas variáveis, $R^2 = Z_1^2 + Z_2^2$, também apresenta distribuição chi-quadrado, mas com dois graus de liberdade. Lembrando que a distribuição qui-quadrado de uma variável x , com ν graus de liberdade, é dada por

$$f(x) = \frac{x^{(\nu/2)+1}}{2^{\nu/2}\Gamma(\nu/2)} \exp(-x/2), \quad (\text{B.32})$$

para o caso $\nu = 2$, temos $f(x) = (1/2) \exp(-x/2)$. Portanto, a variável aleatória

$$u_2 = \exp\left[-\frac{1}{2}(z_1^2 + z_2^2)\right], \quad (\text{B.33})$$

também densidade de probabilidade uniforme no intervalo $[0, 1]$.

Com isso, conseguimos duas variáveis aleatórias com distribuição uniforme, u_1 e u_2 , a partir de duas variáveis com distribuição normal padrão, Z_1 e Z_2 . Podemos inverter o processo reescrevendo as Eqs. (B.31) e (B.33) como

$$z_1 = \sqrt{-2 \ln(u_1)} \cos(2\pi u_2), \quad (\text{B.34})$$

$$z_2 = \sqrt{-2 \ln(u_1)} \sin(2\pi u_2), \quad (\text{B.35})$$

que nos fornece os números Z_1 e Z_2 com distribuição normal padrão, a partir de dois números U_1 e U_2 extraídos de uma distribuição uniforme no intervalo $(0, 1)$.

Figura B.5 – (a) Função densidade de probabilidade (pdf) conjunta de duas variáveis Z_1 e Z_2 aleatórias independentes com distribuição normal padrão e as curvas de nível desta pdf com vista (b) tridimensional e (c) no plano $Z_1 \times Z_2$.

B.2 Generalização do método Box-Müller

Em 2007, W. Thistleton *et al.* [69] propõem uma reformulação do método de Box-Müller, adaptando-o para gerar números aleatório com distribuição Gaussiana generalizada. Para isso, os autores resgatam as funções logaritmo e exponencial

generalizadas,

$$\ln_{1-q}(x) = \begin{cases} \ln(x), & \text{se } q = 1, \\ \frac{x^{1-q} - 1}{1 - q}, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (\text{B.36})$$

$$\exp_{1-q}(x) = \begin{cases} [1 + (1 - q)x]^{1/(1-q)}, & \text{se } 1 + (1 - q)x \geq 0, \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (\text{B.37})$$

onde $q \in \mathbb{R}$ é um parâmetros de generalização [35],¹ e definem a definem a q -média e a q -variância, respectivamente, como

$$\bar{\mu}_q = \frac{\int x[p(x)]^q dx}{\int [p(x)]^q dx} \quad \text{e} \quad \bar{\sigma}_q^2 = \frac{\int (x - \bar{\mu}_q)^2 [p(x)]^q dx}{\int [p(x)]^q dx}, \quad (\text{B.38})$$

que, para $q = 1$, reassume as formas da média e variâncias tradicionais. Em seguida, os autores apresentam a função densidade de probabilidade q -gaussiana padrão, com média $\bar{\mu}_q = 0$ e variância $\bar{\sigma}_q^2 = 1$,

$$p_q(x) = \frac{A_q}{\sqrt{3-q}} \exp_q \left[\frac{-x^2}{3-q} \right] = \frac{A_q}{\sqrt{3-q}} \left[1 + \frac{q-1}{3-q} x^2 \right]^{1/(1-q)}, \quad (\text{B.39})$$

onde

$$A_q = \begin{cases} \frac{\Gamma \left[\frac{5-3q}{2(1-q)} \right]}{\Gamma \left[\frac{2-q}{1-q} \right]} \sqrt{\frac{1-q}{\pi}} & \text{para } q < 1, \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}} & \text{para } q = 1, \\ \frac{\Gamma \left[\frac{1}{q-1} \right]}{\Gamma \left[\frac{3-q}{2(q-1)} \right]} \sqrt{\frac{q-1}{\pi}} & \text{para } 1 < q < 3. \end{cases}$$

¹Mantivemos as definições das funções generalizadas presentes no artigo original de Thistleton *et al.* [69]. No entanto, deve-se notar que substituindo-se q por $\tilde{q} = 1 - q$ nas Eqs. (B.36) e (B.37), obtemos as funções $\ln_{\tilde{q}}(x)$ e $\exp_{\tilde{q}}(x)$ apresentadas no Apêndice 1.

A pdf q -gaussiana definida pela Eq. (B.39) contém a distribuição gaussiana tradicional, como caso particular, para $q = 1$ ($\tilde{q} = 0$). Além disso, o segundo momento da Eq. (B.39) é dado por $\sigma^2 = (3 - q)/(5 - 3q)$ e é finito apenas para $q < 5/3$.

Os autores propõem, então, a generalização do método Box-Müller como uma extensão direta de sua versão tradicional, considerando a função logaritmo generalizada, definida na Eq. (B.36), nas Eqs. (B.34) e (B.35). Sendo u_1 e u_2 números aleatórios extraídos de uma distribuição uniforme no intervalo $[0, 1]$, as variáveis

$$z_1 = \sqrt{-2 \ln_{q'}(u_1)} \cos(2\pi u_2), \quad (\text{B.40})$$

$$z_2 = \sqrt{-2 \ln_{q'}(u_1)} \sin(2\pi u_2), \quad (\text{B.41})$$

seguem uma distribuição q -gaussiana (Eq. B.39), com parâmetro $q = (3q' - 1)/(q' + 1)$, sendo q' o parâmetro da função logaritmo generalizada.

Finalizando a breve apresentação do trabalho de Thistleton *et al.*, deve-se destacar que as Eqs. (B.40) e (B.41) comportam valores de q' no intervalo $(-1, \infty)$ e, portanto, o método Box-Müller generalizado pode ser usado para gerar distribuições q -gaussianas com $q \in (-\infty, 3)$.

B.3 Implementação e avaliação do método Box-Müller

Apresentamos agora a implementação do método Box-Müller generalizado. Considerando nossa proposta de generalização do algoritmo de recozimento simulado ($\tilde{q}$ -SA), apresentada no Cap. 3, implementamos uma sub-rotina para gerar pdf $\tilde{q}_v$ -gaussiana, fazendo a substituição de variável $\tilde{q}_v = q - 1$, onde $\tilde{q}_v$ o parâmetro para generalizar a distribuição de visitação do nosso algoritmo. Considerando a restrição $q \in (-\infty, 3)$ do método de Thistleton *et al.*, nossa sub-rotina comporta parâmetros na faixa $-\infty < \tilde{q}_v < 2$. Mais especificamente, para $\tilde{q}_v \rightarrow -\infty$, obtemos uma distribuição uniforme, para $\tilde{q}_v = 0$, uma distribuição normal e, para $\tilde{q}_v = 1$, a distribuição de Cauchy-Lorentz.

Nossa sub-rotina, a qual denominamos de `qgasdev.c`, recebe dois argumentos, `q` e `iseed`, correspondentes, respectivamente, ao parâmetro $\tilde{q}_v$ e à semente que irá alimentar a sub-rotina `ran2`. Essa, por sua vez, gera dois números aleatórios `u1` e `u2` com distribuição uniforme que serão utilizados para gerar um número aleatório `z` com distribuição $\tilde{q}_v$ -gaussiana. Segue o código, em linguagem *C*, da nossa sub-rotina.


```

/*
qgasdev.c
sub-rotina que gera numeros aleatorios com distribuicao q-gaussiana padrao
argumentos de entrada:
    q --> parametro que generaliza a distribuicao gaussiana
    iseed --> semente para alimentar a sub-rotina ran2
variaval de saida:
    z --> numero aleatorio com distribuicao q-gaussina padrao
*/

#include <math.h>
#include "ran2.c"

double qgasdev(double q, long *iseed)
{
    //declaracao de variaveis
    double z, qaux, qlog, u1, u2;

    // calculo do qaux pra a geracao da distribuicao q-Gaussiana
    qaux = (1+(q+1))/(3-(q+1));

    // geracao de numeros u1 e u2 com distribuicao uniforme no intervalo (0,1)
    u1 = ran2(iseed);
    u2 = ran2(iseed);

    // calculo do q-log(u1)
    if (qaux == 1)
        {qlog = log(u1);}
    else{qlog = (pow(u1,1-qaux) - 1)/(1-qaux);}

    // calculo do numero z com distribuicao q-Gaussiana
    z = sqrt(-2*qlog)*sin(2*3.141592654*u2);

    // retorno do numero z
    return z;
} // fim da funcao qgasdev

```

Para avaliar a performance do código, realizamos testes numéricos considerando seis valores diferentes de $\tilde{q}_v$. Para cada um, geramos 10^6 números aleatórios usando a sub-rotina `qgasdev.c` e construímos o histograma da distribuição obtida, comparando-o com a curva analítica dada pela Eq. (B.39). Os resultados são mostrados nos gráficos da Fig. (B.6), destacando que, para $\tilde{q}_v \rightarrow -\infty$ ², temos uma distribuição uniforme no intervalo $[-1, 1]$, com $\tilde{q}_v = 0$, recuperamos a distribuição gaussiana clássica e, em $\tilde{q}_v = 2/3$, o segundo momento da pdf $\tilde{q}_v$ -gaussiana diverge.

²Para este caso, adotou-se $\tilde{q}_v = -1\,000$.

Figura B.6 – Histogramas de distribuições $\tilde{q}_v$ -gaussiana, geradas pela sub-rotina `qgasdev.c`, e a curva analítica (linha sólida) da pdf expressa na Eq. (B.39) para (a) $\tilde{q}_v \rightarrow -\infty$, (b) $\tilde{q}_v = -1$, (c) $\tilde{q}_v = 0$, (d) $\tilde{q}_v = 1/3$, (e) $\tilde{q}_v = 2/3$ e $\tilde{q}_v = 5/6$.

Padrões de excitação na tomografia de impedância elétrica

Neste apêndice, apresentamos simulações computacionais, realizadas para avaliar a sensibilidade dos principais padrões de excitação/resposta utilizados na tomografia de impedância elétrica (TIE). Essa avaliação é importante na resolução do problema inverso da TIE, pois a escolha de um padrão de excitação/resposta mais sensível permite uma melhor distinção entre os dados experimentais e o modelo teórico, que é caracterização por um funcional de erro. Os estudos apresentados neste apêndice foram publicados no *International Journal of Modern Physics C* [3].

C.1 Os principais padrões de excitação

Uma questão fundamental no processo de geração de imagem através da TIE refere-se aos diferentes padrões possíveis de se aplicar o potencial elétrico ou de se injetar a corrente elétrica sobre o contorno do domínio. Na prática, o contorno da seção do corpo será envolvido por um número limitado de eletrodos, escolhido arbitrariamente, a fim de que se obtenha uma quantidade suficiente de informação para a reconstrução da imagem. Normalmente, esses eletrodos são distribuídos uniformemente através da seção por meio de uma cinta que envolve o corpo. Os padrões de excitação são definidos a partir dos valores de potencial/corrente que são aplicados/injetados em cada eletrodo.

Na reconstrução de uma imagem através da TIE, tratada como um problema de otimização, deve-se contrastar os dados obtidos experimentalmente com aqueles

fornecidos pelo modelo teórico. Para isso, constrói-se um funcional de erro que mede essa discrepância e que deve ser minimizado através de um método de otimização adequado. Desta forma, é fundamental que o padrão de excitação/resposta tenha grande sensibilidade aos diferentes modelos teóricos, a fim de conseguir identificar aquele que mais se ajusta aos dados experimentais.

Os padrões mais comuns de carregamento (excitação/resposta) são o *Dirac*, o *triangular* e o *senoidal*. Considerando condição de contorno do tipo Dirichlet, no perfil *Dirac*, aplica-se um potencial elétrico (10 V, por exemplo) em um único eletrodo aterrando-se os demais (0 V). Já no perfil *triangular*, aplica-se um potencial elétrico em um eletrodo (10 V), aterra-se o eletrodo diametralmente oposto (0 V) e, nos demais, são aplicados potenciais que variam linearmente entre 0 V e 10 V. Finalmente, o *perfil senoidal* é uma variação do perfil triangular no qual aplica-se potenciais elétricos que variam segundo uma função seno ao longo dos eletrodos.

Esta simulação numérica foi realizada para avaliar a sensibilidade destes três padrões de excitação. A ideia é construir e comparar as superfícies do funcional de erro, dentro do espaço de soluções, para cada perfil de excitação. Na próxima seção, apresentamos como essas superfícies foram gerados e os resultados obtidos.

C.2 Geração das superfícies de erro e resultados

Para gerar as superfícies do funcional de erro, criamos dois modelos, um *real* e outro *numérico*, ambos quadrados de lado unitário, com a quina inferior esquerda localizada na origem (0,0) de um sistema cartesiano $x0y$ e contendo uma inclusão não condutora de lado 0.1. No *modelo real*, o centro da inclusão é fixada no ponto (0.7, 0.3), como mostra a Fig. (C.7-a), enquanto que no *modelo numérico*, a posição (x_p, y_p) do centro da inclusão varia dentro do domínio, ocupando 6 561 posições de uma rede quadrada 81×81 definida entre (0.1, 0.1) e (0.9, 0.9), como mostra a Fig (C.7-b).

Em ambos os modelos, utilizamos o método dos elementos de contorno (MEC) para resolver o problema direto da TIE, dado pelas Eqs. (5.8), (5.9) e (5.10), apresentadas no Cap. 5. O contorno externo foi discretizado em 80 elementos, nos quais foram aplicados potenciais elétricos (condição de Dirichlet), de acordo com os pa-

Figura C.7 – Representação dos modelos (a) real e (b) numérico. Em ambos, tem-se um domínio condutor quadrado de lado unitário com a quina inferior esquerda localizadas na origem de um sistema cartesiano $x0y$. No modelo real, considera-se uma inclusão não condutora de lado 0.1 centrada no ponto (0.7, 0.3). No modelo numérico, considerou-se uma inclusão prospectiva de lado 0.1, cujo centro ocupou 6561 posições de uma rede regular entre (0.1, 0.1) e (0.9, 0.9).

drões de excitação Dirac, triangular e senoidal. Considerando que a inclusão interna representa uma região não condutora, seu contorno foi discretizado em 40 elementos, nos quais foi imposto fluxo de corrente nulo (condição de Neumann).

A superfície de erro de cada padrão de excitação foi gerada da seguinte forma: para cada uma das 6 561 posições da inclusão prospectiva, o padrão de excitação foi aplicado em quatro posições diferentes (fase 1, fase 2, fase 3 e fase 4), como mostra os gráficos à esquerda da Fig. (C.8). Como isso, para cada posição, obtém-se 4 valores de erros E_1 , E_2 , E_3 e E_4 , definidos como

$$E_k = \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \left| J_{\text{actual}}^{(i)} - J_{\text{num}}^{(i)} \right|^2, \quad \text{para } k = 1, 2, 3 \text{ e } 4, \quad (\text{C.42})$$

onde $J_{\text{real}}^{(i)}$ e $J_{\text{num}}^{(i)}$ são, respectivamente, os valores do fluxo de corrente real e numérico no eletrodo i e n_e é o número de eletrodos. O erro final para cada posição da inclusão prospectiva, considerando as quatro fases do perfil de excitação, é definido como

$$\langle E \rangle = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^4 E_k, \quad (\text{C.43})$$

fornecendo as superfícies de erro mostradas à direita da Fig. (C.8).

Figura C.8 – Potenciais elétricos aplicados no contorno externo (esquerda) e superfície de erro (direita) dos padrões de excitação (a) Dirac, (b) triangular e (c) senoidal.

A partir dos resultados mostrados na Fig. (C.8), nota-se que o perfil *Dirac* é pouco sensível, visto que sua superfície de erro é praticamente plana, dificultando a identificação da posição da inclusão. Já nos perfis *triangular* e *senoidal*, as superfícies de erro possuem uma bacia de atração para o mínimo global bastante proeminente, mostrando boa sensibilidade para o uso de métodos de otimização.

É evidente que os padrões de excitação *triangular* e *senoidal* apresentam-se bastante similares, tanto na forma do potencial aplicado, quanto nas superfícies de erro geradas. No estudo do problema inverso da TIE, apresentando no Cap. 5, optamos pelo perfil *senoidal*, por dois motivos principais: primeiro, trata-se de uma função contínua e diferenciável e segundo pela facilidade de implementação computacional.

Referências³

- [1] O. H. Menin, “Método dos elementos de contorno para tomografia de impedância elétrica”, Dissertação de Mestrado, Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo, 2009. 3, 89
- [2] V. Rolnik, O. H. Menin, G. L. C. Carosio e P. J. Seleglim, “Study of the boundary element method for the direct problem of electrical impedance tomography”, in *ABCM Symposium Series in Mechatronics*, vol. 4, pp. 835–843, 2010. 3, 89
- [3] O. H. Menin e V. Rolnik, “Quadrant-searching: a new technique to reduce the search space of the inverse problem of the eit using bem to the direct problem”, *International Journal of Modern Physics C*, vol. 22, no. 8, pp. 825–839, 2011. 4, 89, 125
- [4] O. H. Menin, V. Rolnik e A. S. Martinez, “Boundary element method and simulated annealing algorithm applied to electrical impedance tomography image reconstruction”, *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. 35, pp. 2304–1–2304–7, 2013. 4, 43, 81
- [5] O. H. Menin, V. Rolnik e A. S. Martinez, “Solving the electrical impedance tomography inverse problem by generalized simulated annealing”, in *Book of Abstracts of the XIII Latin American Workshop on Nonlinear Phenomena*, 2013. 4, 81
- [6] O. H. Menin, A. S. Martinez e A. M. Costa, “Reconstruction of bremsstrahlung spectra from attenuation data using generalised simulated annealing”, in *Book*

³De acordo com o estilo LMSC (baseado no estilo IEEE Transactions - Electrical and Electronics Engineers).

- of Abstracts of the 9th International Topical Meeting on Industrial Radiation and Radioisotope Measurement Applications IRRMA-9*, 2014. 4, 65
- [7] H. F. C. Velho, E. H. Shiguemori, F. M. Ramos e J. C. Carvalho, “A unified regularization theory: the maximum non-extensive entropy principle”, *Comp. Appl. Math.*, vol. 25, pp. 307–330, 2006. 5, 20
- [8] Platão, *A república (Trad. de Enrico Corvisieri)*. Nova Cultural, São Paulo, 1997. 6
- [9] C. W. Groetsch, *Inverse Problems in the Mathematical Sciences*. Vieweg Publishing, 1993. 6, 11, 15
- [10] W. C. Röntgen, “Ueber eine neue art von strahlen. (vorläufige mittheilung.)”, *Sitzungsberichte der Physik.-med. Gesellschaft zu Würzburg*, no. 9, pp. 132–141, 1895. 6
- [11] A. M. Cormack, “Reconstruction of densities from their projections, with applications in radiological physics”, *Phys. Med. Biol*, vol. 18, no. 2, pp. 195–207, 1973. 8
- [12] G. N. Hounsfield, “Computerized transverse axial scanning (tomography): Part 1. description of system”, *British Journal of Radiology*, vol. 46, pp. 1016–1022, 1973. 8
- [13] C. W. Groetsch, *Inverse Problem - Activities for Undergraduates*. Washington, DC: The Mathematical Association of America, 1999. 8
- [14] J. B. Keller, “Inverse problems”, *Am. Math. Monthly*, vol. 83, pp. 107–118, 1976. 9, 10
- [15] S. Singh, *O livro dos códigos*. Rio de Janeiro, RJ: Record, 2008. 11
- [16] G. E. Backus e J. F. Gilbert, “Numerical applications of a formalism for geophysical inverse problems”, *Geophysical Journal of the Royal Astronomical Society*, vol. 13, pp. 247–276, 1967. 12, 14

-
- [17] G. E. Backus e J. F. Gilbert, “The resolving power of gross earth data”, *Geophysical Journal of the Royal Astronomical Society*, vol. 16, pp. 169–205, 1968. 12, 14
- [18] G. E. Backus e J. F. Gilbert, “Uniqueness in the inversion of inaccurate gross earth data”, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, vol. 266, pp. 123–192, 1970. 12, 14
- [19] O. Alifanov, *Inverse Heat Transfer Problems*. International series in heat and mass transfer, Springer-Verlag, 1994. 12
- [20] M. Bertero e P. Boccacci, *Introduction to inverse problem in imaging*. Bristol, UK, Philadelphia, USA: Institute of Physics Publishing, 1998. 13
- [21] A. Tarantola, *Inverse Problem Theory*. Elsevier Science Publishers, 1987. 13, 14
- [22] J. Hadamard, “Sur les problèmes aux dérivés partielles et leur signification physique”, *Princeton University Bulletin*, vol. 13, pp. 49–52, 1902. 13
- [23] J. M. Pujol, “The Backus-Gilbert method and their minimum-norm solution”, *Geophysics*, vol. 78, pp. W9–W30, 2013. 14
- [24] V. K. Ivanov, “On linear problems which are not well-posed”, *Sov. Math. Dokl.*, vol. 145, pp. 270–272, 1962. 15
- [25] V. K. Ivanov, “The approximate solution of operator equations of the first kind”, *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, vol. 6, pp. 197–205, 1966. 15
- [26] D. L. Phillips, “A technique for the numerical solution of certain integral equations of the first kind”, *Journal of the Association for Computing Machinery*, vol. 9, pp. 84–97, 1962. 15, 16
- [27] S. Twomey, “On the numerical solution of fredholm integral equations of the first kind by inversion of the linear system produced by quadrature”, *J. Assoc. Comput. Mach.*, vol. 19, pp. 97–101, 1963. 15

- [28] A. N. Tikhonov, “Solution of incorrectly formulated problem and the regularization method”, *Soviet. Math Dokl.*, vol. 4, pp. 1035–1038, 1963. English translation of *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, 151 (1963), pp. 501–504. 16
- [29] J. N. Franklin, “On Tikhonov’s method for ill-posed problems”, *Mathematics of computation*, vol. 28, pp. 889–907, 1974. 16
- [30] C. E. Shannon, “A mathematical theory of communication”, *The Bell System Technical Journal*, vol. 27, pp. 379–426, 1948. 19
- [31] H. F. C. Velho e F. M. Ramos, “Numerical inversion of two-dimensional geoelectric conductivity distributions from magnetotelluric data”, *Revista Brasileira de Geofísica*, vol. 15, 1997. 20
- [32] C. Tsallis, “Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics”, *Journal of Statistical Physics*, vol. 52, no. 1-2, pp. 479–487, 1988. 20, 21, 45, 109
- [33] C. Tsallis, *Introduction to nonextensive statistical mechanics*. Springer Science+Business Media, 2009. 21, 109
- [34] P. Tempesta, “Group entropies, correlation laws, and zeta functions”, *Physical Review E*, vol. 84, pp. 021121–1/021121–10, 2011. 21
- [35] C. Tsallis, “What are the numbers that experiments provide?”, *Química Nova*, vol. 17(6), pp. 468–471, 1994. 22, 120
- [36] L. Nivonen, A. L. Méhauté e Q. A. Wang, “Generalized algebra within a nonextensive statistics”, *Rep. Math. Phys.*, vol. 52, pp. 437–444, 2003. 22
- [37] E. P. Borges, “A possible deformed algebra and calculus inspired in nonextensive thermostatistics”, *Physica A*, vol. 340, pp. 95–101, 2004. 22
- [38] T. J. Arruda, R. S. Gonzalez, C. S. A. Terçariol e A. S. Martinez, “Arithmetical and geometrical means of generalized logarithmic and exponential functions: generalized sum and product operators”, *Physics Letters A*, vol. 372, pp. 2578–2582, 2008. 22, 48, 72, 91, 109, 116

-
- [39] A. S. Martinez, R. S. González e C. A. S. Terçariol, “Generalized probability functions”, *Advances in Mathematical Physics*, vol. 2009, pp. 1–13, 2009. 22, 48, 51, 72, 91, 109, 116
- [40] L. Assirati, A. S. Martinez e O. M. Bruno, “Satellite classification and segmentation using non-additive entropy”, in *Journal of Physics: Conference Series - 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences*, 2014. 23
- [41] A. Cherman, *Sobre os ombros de gigantes – uma história da física*. Rio de Janeiro: Jorge Zahar, 2004. 29
- [42] J. Nocedal e S. J. Wright, *Numerical optimization*. Springer, 1999. 29
- [43] J. C. Spall, *Introduction to Stochastic Search and Optimization*. New Jersey, USA: Wiley-Interscience, 2003. 33, 35
- [44] S. J. Diehl e J. C. Moltz, *Nuclear weapons and nonproliferation: a reference handbook*. 130 Cremona Drive, P.O. Santa Barbara, California: ABC-CLIO, Inc., 2nd ed., 2008. 36
- [45] C. C. Kelly, ed., *The Manhattan Project: the Birth of the Atomic Bomb in the Words of Its Creators, Eyewitnesses, and Historians*. 151, West 19 Street, New York, NY.: Black Dog & Leventhal Publishers, Inc., 2007. 36
- [46] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller e E. Teller, “Equation of state calculation by fast computing machines”, *J. Chem. Phys.*, vol. 21, pp. 1087–1091, 1953. 36, 37, 42
- [47] R. Friedberg e J. E. Cameron, “Test of the Monte Carlo method: fast simulation of a small Ising lattice”, *J. Chem. Phys.*, vol. 52, pp. 6049–6058, 1970. 38
- [48] A. B. Bortz, M. H. Kalos e J. L. Lebowitz, “A new algorithm for Monte Carlo simulation of king spin systems”, *Journal of Computational Physics*, vol. 17, pp. 10–18, 1975. 38

- [49] S. Geman e D. Geman, “Stochastic relaxation, Gibbs distributions, and the bayesian restoration of images”, *IEEE Transaction on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, vol. PMA1-6, no. 6, pp. 721–741, 1984. 38, 43
- [50] V. Cerny, “Thermodynamical approach to the traveling salesman problem: an efficient simulation algorithm”, *Journal of Optimization Theory and Application*, vol. 45, pp. 41–51, 1985. 38
- [51] K. Menger, “Eine neue definition der bogenlänge”, in *Ergebnisse eines Kolloquiums*, 1930. 38, 39
- [52] W. Cook, *In Pursuit of the Traveling Salesman: Mathematics at the Limits of Computation*. Princeton University Press, 2011. 39
- [53] S. Kirkpatrick, C. Gellat e M. Vecchi, “Optimization by simulated annealing”, *Science*, vol. 220, pp. 671–680, 1983. 39, 43
- [54] H. Nishimori e J. Inoue, “Convergence of simulated annealing using generalized transition probability”, *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 31, pp. 5661–5672, 1998. 43
- [55] J. J. Schneider e M. Puchta, “Investigation of acceptance simulated annealing - a simplified approach to adaptive cooling schedules”, *Physica A*, vol. 389, pp. 5822–5831, 2010. 43, 45
- [56] H. Kim, C. Boo e Y. Lee, “Image reconstruction using simulated annealing algorithm in eit”, *International Journal of Control, Automation and System*, vol. 2, pp. 211–216, 2005. 43
- [57] C. N. L. Herrera, “Algoritmo de tomografia por impedância elétrica baseado em simulated annealing”, Dissertação de Mestrado, Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2007. 43
- [58] B. Hajek, “Cooling schedules for optimal annealing”, *Mathematics of Operations Research*, vol. 13, pp. 311–329, 1988. 44
- [59] H. Szu e R. Hartley, “Fast simulated annealing”, *Physics Letters A*, vol. 122, pp. 157–162, 1987. 44, 55

-
- [60] C. Tsallis e D. A. Stariolo, “Generalized simulated annealing”, *Physica A*, vol. 233, pp. 395–406, 1996. 45, 55
- [61] T. J. P. Penna, “Traveling salesman problem and Tsallis statistics”, *Physical Review E*, vol. 51, pp. R1–R3, 1995. 47
- [62] D. A. Stariolo e C. Tsallis, *Annual Review of Computational Physics II*. World Scientific, Singapore, 1994. 47
- [63] I. Andricioaei e J. E. Straub, “Generalized simulated annealing algorithms using Tsallis statistics: application to conformational optimization of a tetrapeptide”, *Physical Review E*, vol. 53, pp. R3055–R3058, 1996. 47
- [64] Y. Xiang, D. Y. Sun, W. Fan e X. G. Gong, “Generalized simulated annealing algorithm and its application to the Thomson model”, *Physics Letters A*, vol. 233, pp. 216–220, 1997. 47
- [65] U. H. E. Hansmann, “Simulated annealing with Tsallis weights. a numerical comparison”, *Physica A*, vol. 242, pp. 250–257, 1997. 47
- [66] N. Crokidakis, D. Soares-Pinto, M. Reis, A. Souza, R. Sarthour e I. Oliveira, “Finite-size analysis of a two-dimensional ising model within a nonextensive approach”, *Physical Review E*, vol. 80, pp. 051101–1–051101–8, 2009. 48
- [67] R. Silva, J. R. D. de Felício e A. S. Martinez, “Generalized metropolis dynamics with a generalized master equation: an approach for time-independent and time-dependent monte carlo simulations of generalized spin systems”, *Physical Review E*, vol. 85, pp. 066707–1–066707–9, 2012. 48
- [68] R. Tinós e S. Yang, “Use of the q-Gaussian mutation in evolutionary algorithms”, *Soft. Comput.*, vol. 15, pp. 1523–1549, 2011. 51
- [69] W. Thistleton, J. A. Marsh, K. Nelson e C. Tsallis, “Generalized Box-Müller method for generating q -gaussian random deviates”, *IEEE Transaction on Information Theory*, vol. 53, pp. 4805–4810, 2007. 54, 76, 117, 119, 120

-
- [70] A. M. R. Pereira, “Estudo do impacto da descoberta dos raios-X e das suas aplicações médicas em Portugal”, Dissertação de Mestrado, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, 2012. 66
- [71] L. Silberstein, “Spectral composition of an X-ray radiation determined from its filtration curve”, *Philosophical Magazine Series 7*, vol. 15:98, pp. 375–394, 1933. 67
- [72] G. E. Bell, “Spectral distribution in the continuous X-ray spectrum and the specification of X-ray quality”, *Brit. J. Radiol.*, vol. 9, pp. 680–688, 1936. 67
- [73] J. W. Twidell, “The determination of X-ray spectra using attenuation measurements and a computer program”, *Phys. Med. Biol.*, vol. 15, pp. 529–539, 1970. 67
- [74] H. Kramer e H. V. Seggern, “The determination of X-ray spectra from attenuation data. Part I: the potentials of various methods.”, *Nucl. Instrum. Meth. Phys.*, vol. 213, pp. 373–380, 1983. 67
- [75] H. M. Kramer, “The determination of X-ray spectra from attenuation data. Part II: Experimental results.”, *Nucl. Instrum. Meth. Phys.*, vol. 214, pp. 445–450, 1983. 67
- [76] M. Rubio e R. T. Mainardi, “Determination of X-ray spectra including characteristic line intensities from attenuation data”, *Phys. Med. Biol.*, vol. 29, pp. 1371–1376, 1984. 67
- [77] E. S. M. Ali e D. W. Rogers, “An improved physics-based approach for unfolding megavoltage bremsstrahlung spectra using transmission analysis”, *Medical Physics*, vol. 39, pp. 1633–1675, 2012. 67
- [78] E. S. M. Ali, M. R. McEwen e D. W. O. Rogers, “Unfolding linac photon spectra and incident electron energies from experimental transmission data, with direct independent validation”, *Medical Physics*, vol. 39, pp. 6585–6595, 2012. 67

-
- [79] V. Raspa e C. Moreno, “Radiographic method for measuring the continuum hard X-ray output spectrum of a plasma focus device”, *Physics Letters A*, vol. 373, pp. 3659–3662, 2009. 67
- [80] A. Nisbet, Weatherburn, J. D. Fenwick e G. McVey, “Spectral reconstruction of clinical megavoltage photon beams and the implications of spectral determination on the dosimetry of such beams”, *Phys. Med. Biol*, vol. 43, pp. 1507–1521, 1998. 68
- [81] D. C. Barber, B. H. Brown e I. L. Freeston, “Imaging spatial distributions of resistivity using applied potential tomography”, *Electronics Letters*, vol. 19, pp. 933–935, 1983. 69
- [82] U. Ankerhold, “Catalogue of X-ray spectrum and their characteristic data-iso and din radiation qualities, therapy and diagnostic radiation qualities, unfiltered X-ray spectra”, tech. rep., PTB - Report DOS-34, 2000. 75
- [83] R. P. Henderson e J. G. Webster, “An impedance camera for spatially specific measurements of the thorax”, *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, vol. 25, no. 3, pp. 250–254, 1978. 82
- [84] C. R. Lima, *Estudo da obtenção de imagens de tomografia de impedância elétrica do pulmão pelo método de otimização topológica*. Tese de Doutorado, Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, 2006. 82
- [85] N. Harris, A. J. Suggett, D. C. Barber e B. H. Brown, “Applied potencial tomography: a new technique for monitoring pulmonary function”, *Clin. Phys. Physiol. Meas.*, vol. 9, pp. 79–85, 1988. 82
- [86] Y. Zou e Z. Guo, “A review of electrical impedance techniques for breast cancer detection”, *Medical Engineering and Physics*, vol. 25, no. 2, pp. 79–90, 2003. 82
- [87] Y. Mangnall, J. A. Baxter, R. Avill, N. C. Bird, B. H. Brown, D. C. Barder, A. D. Seagar, A. G. Johnson e N. Read, “Applied potential tomography: a new non-invasive technique for assessing gastric function”, *Clin. Phys. Physiol. Meas.*, vol. 8, pp. 119–129, 1987. 82

-
- [88] B. M. Eyuboglu, B. H. Brown, D. C. Barber e A. D. Seager, “Localisation of cardiac related impedance changes in the thorax”, *Clin. Phys. Physiol. Meas.*, vol. 8, pp. 167–173, 1987. 82
- [89] E. J. Woo, P. Hua, J. G. Webster e W. J. Tompkins, “A robust image reconstruction algorithm and its parallel implementation in electrical impedance tomography”, *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, vol. 12, no. 2, pp. 137–146, 1993. 82
- [90] V. P. Rolnik e P. J. Seleglim, “A specialized genetic algorithm for the electrical impedance tomography of two phase flows”, *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, vol. 28, no. 4, pp. 378–390, 2006. 82
- [91] P. G. Kaup, F. Santosa e M. Vogelius, “Method for imaging corrosion damage in thin plates from electrostatic data”, *Inverse Problems*, vol. 12, pp. 279–293, 1996. 82
- [92] F. Santosa e M. Vogelius, “A computational algorithm for determining cracks from electrostatic boundary measurements”, *International Journal of Engineering Science*, vol. 29, no. 8, pp. 917–937, 1991. 82
- [93] A. Ramirez, W. Daily, D. Labreque, E. Owen e D. Chesnut, “Monitoring an underground steam injection process using electrical resistance tomography”, *Water Resources Research*, vol. 29, no. 1, pp. 73–88, 1993. 82
- [94] P. J. Seleglim e E. Hervieu, “Direct imaging of two-phase flows by electrical impedance measurements”, *Measurement Science and Technology*, vol. 9, pp. 1492–1500, 1998. 82
- [95] M. Cheney, D. Isaacson e J. C. Newell, “Electrical impedance tomography”, *Society for Industrial and Applied Mathematics*, vol. 41, no. 1, pp. 85–101, 1999. 82
- [96] L. Borcea, “Electrical impedance tomography”, *Inverse Problems*, vol. 18, no. 6, p. R99, 2002. 82, 83

-
- [97] D. C. Barber e B. H. Brown, “Applied potential tomography”, *Journal of Physics E: Scientific Instruments*, vol. 17, pp. 723–733, 1984. 83
- [98] A. Calderón, “On an inverse boundary value problem”, in *Seminar on Numerical Analysis and its Applications to Continuum Physics* (W. Meyer e M. Raupp, eds.), vol. 18, (Rio de Janeiro), pp. 65–73, Sociedade Brasileira de Matematica, 1980. 85
- [99] A. Calderón, “On an inverse boundary value problem”, *Comp. Appl. Math.*, vol. 25, pp. 133–138, 2006. 85
- [100] C. A. Brebbia, *The Boundary Element Method for Engineers*. London: Pentech Press, 1978. 89
- [101] C. A. Brebbia e J. Dominguez, *Boundary Elements Methods An Introductory Course*. Computational Mechanics Publications Southampton Boston, 2 ed., 1992. 89
- [102] H. Eckel e R. Kress, “Nonlinear integral equations for the inverse electrical impedance problem”, *Inverse Problems*, vol. 23, pp. 475–491, 2007. 89
- [103] M. Clerc, J. Badier, G. Adde, J. Kybic e T. Papadopoulos, “Boundary element formulation for electrical impedance tomography”, *ESAIM: Proceedings*, vol. 14, pp. 63–71, 2005. 89
- [104] S. Babaeizadeh e D. H. Brooks, “Electrical impedance tomography for piecewise constant domains using boundary element shape-based inverse solutions”, *IEEE Transactions on Medical Imaging*, vol. 26, no. 5, pp. 637–647, 2007. 89
- [105] W. T. Ang, *A Beginner’s Course in Boundary Element Methods*. Boca Raton, Florida: Universal Publishers, 2007. 89
- [106] R. S. González, *Funções generalizadas, modelos de crescimento contínuos e discretos e caminhadas estocásticas em meios desordenados*. Tese de Doutorado, Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, 2011. 109, 116

- [107] G. E. P. Box e M. E. Muller, “A note on the generation of random normal deviates”, *Annals Math. Stat.*, vol. 29, pp. 610–611, 1958. 117