





## APROXIMAÇÃO DE FUNÇÕES DE DENSIDADE POR SÉRIES DE DISTRIBUIÇÕES

Ana Carolina Conde Moraes Cosati

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientadores: Paulo Laranjeira da Cunha  
Lage  
Fabio Pereira dos Santos

Rio de Janeiro  
Abril de 2017

APROXIMAÇÃO DE FUNÇÕES DE DENSIDADE POR SÉRIES DE  
DISTRIBUIÇÕES

Ana Carolina Conde Moraes Cosati

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA QUÍMICA.

Examinada por:

---

Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc.

---

Prof. Fabio Pereira dos Santos, D.Sc.

---

Prof. Príamo Albuquerque Melo Junior, D.Sc.

---

Prof. Fabio Antonio Tavares Ramos, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL  
ABRIL DE 2017

Cosati, Ana Carolina Conde Moraes

Aproximação de Funções de Densidade por Séries de Distribuições /Ana Carolina Conde Moraes Cosati. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2017.

XVI, 100 p.: il.; 29,7cm.

Orientadores: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Fabio Pereira dos Santos

Dissertação (mestrado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Química, 2017.

Referências Bibliográficas: p. 96 – 97.

1. Métodos Numéricos. 2. Distribuições. 3. Kernel Density Functions. I. Lage, Paulo Laranjeira da Cunha *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química. III. Título.

*À Lola e Emília*

*"Se for pra morrer, que seja em  
combate."*

*In: CRUZ, Aline*

# Agradecimentos

Acho que a página de agradecimentos é a primeira coisa que eu leio em uma dissertação ou tese que pego para estudar. Acho que ali fica a essência de quem o escreveu. Sei lá, acho poético, bonito. Sendo assim, gostaria de começar a(s) minha(s) página(s) agradecendo aos meus queridos pais, Sérgio e Valéria, por todo o estímulo, todo o colinho nos momentos de dificuldade e por terem se preocupado tanto em nos educar com o que há de mais bonito em termos de empatia, caridade e amor por todos. Por todas as máximas que tanto escutei, como "minha filha, sua felicidade depende disso", do meu pai, e todos os "levanta, filhinha, a vida é luta", da minha mãe, nos dias em que batia aquela preguicinha. A vocês, minha profunda e eterna gratidão. Agradeço também à minha vó e segunda mãe, Lola, essa fortaleza em pessoa! Por todas as marmitas, por todos os "Ana, vai ver se eu tô lá na esquina de guarda-chuva aberto", por toda a paciência e aquele bom e velho "deu pra passar? Então ótimo".

Às minhas irmãzinhas, Maria Clara (Binho), a advogada mais pequenininha, fofinha e competente do país (reclame se quiser, pra mim você vai ter sempre 5 anos) e Letícia (Gody), a historiadora mais sábia e bondosa, diva dos textos complicados e rainha das problematizações chiques. Eu amo muito vocês, suas lindas! Sem vocês eu existiria só pela metade. Ao meu querido Victor, fica aqui também minha gratidão pelo apoio, paciência e ajuda com *bugs* no código.

Ao meu amado companheiro há 8 anos, Guilherme, pela paciência, carinho e amor. Amo você! Que venham muito mais anos juntos! Agradeço também a minha segunda família: Rosa, pelos bate-papos até tarde e por compartilhar tantas experiências de vida maravilhosas, ao Leo, pelos camarões de águas profundas e pelas saladas de fruta, à Erica pelo shitake que só ela sabe fazer e ao Eric pelas risadas e conversas.

Não poderia deixar de agradecer aos meus orientadores, que me ajudaram tanto no desenvolvimento desse trabalho: Paulo Lage, o senhor supremo dos fenômenos de transporte e rei dos escoamentos multifásicos polidispersos e ao Fabio Santos, por toda a ajuda preciosa, todas as mensagens respondidas domingo às 23:30 (quando não mais tarde), pelos M&M's e pelas mariolas. Ao Professor Luíz Fernando Lopes Rodrigues Silva, por todo o carinho, dedicação e orientação. Sem você, eu não teria

chegado até aqui.

Minha profunda gratidão ao pessoal do LTFD. Que pessoal generoso! A Aline, que nos momentos de "vou largar tudo e fazer psicologia", soltava aquela máxima "Ana, se for pra morrer, que seja em combate!". Por todos os cafés, por todos os dias que ficamos até quase a madrugada no laboratório de informática do bloco G e pelas caronas. Ao Gabriel, pelos "Gabriel, que erro é esse aqui no meu código" e por seus cafés capazes de provocar úlceras em qualquer ser humano. Ao Jovani, pelos "Jovani, pelo amor de Deus, a otimização não quer funcionar" e pelos "me ajuda", dramatizações sempre respondidas com a maior paciência e intenção de compartilhar ensinamentos, uma das características mais marcantes de pessoas generosas. Ao André, por não me deixar tomar café quente no verão fora do laboratório, por que eu posso passar mal. A Amanda, pelas palavras de incentivo e por ter implementado de forma brilhante e organizada o EQMOM, trabalho no qual eu me baseei. A Thainá, pelos suquinhos, apoios, desabafos, e por me incentivar a comprar mercadorias no AliExpress. Comprei dois colares banhados a prata por uma bagatela de 0,64 centávos de dólar além de capas para o meu celular. Ao Samel, por sua quase santa paciência e determinação em ficar a manhã inteira ajudando qualquer pessoa que precise, apesar de ter uma vida tão ocupada. Ao Seu Antônio, pelos debates políticos e econômicos interessantíssimos, capazes de tirar qualquer Brasil da crise. Agradeço também por me emprestar seus talheres na hora almoço quando eu esqueço os meus e por ficar ouvindo minhas reclamações sobre "o quanto esse trabalho é difícil", além de fazer aquele café maroto que só quem chegava cedo no laboratório podia tomar.

Ao pessoal da G-130, Camilinha, Guilherme, Thiago Carneiro, Nayher e Daniel, pelo apoio e ajuda nos momentos de crise. Ao Thiago Miceli por ser o único a compartilhar comigo o drama de tentar defender o mestrado aos 45 do segundo tempo.

Ao pessoal do ATOMS, Fernando, Rafael e Iuri, pelas conversas, risadas e amizade!

Por último, mas não menos importantes, agradeço imensamente à banca, o Professor Fabio Ramos, pela disponibilidade e por responder e-mails de forma tão rápida e o Professor Príamo, por todo o conhecimento compartilhado nas aulas e por concordar em fazer parte de minha banca tão prontamente.

Gostaria ainda de agradecer a você, que achou esse trabalho em algum lugar. Este trabalho foi escrito para você, você que está começando, você que está meio perdido, assim como eu já estive um dia (ainda estou, porém menos). Se este trabalho te ajudar de alguma forma, terá cumprido seu propósito, pois acredito que o que há de mais belo no conhecimento é a capacidade humana de compartilhá-lo.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

## APROXIMAÇÃO DE FUNÇÕES DE DENSIDADE POR SÉRIES DE DISTRIBUIÇÕES

Ana Carolina Conde Moraes Cosati

Abril/2017

Orientadores: Paulo Laranjeira da Cunha Lage  
Fabio Pereira dos Santos

Programa: Engenharia Química

Fenômenos físicos que podem ser descritos através de distribuições são comuns em diversos segmentos das ciências. Conhecer estas distribuições e seu comportamento torna-se essencial para que se possa extrair informações relevantes aos sistemas em geral. Situando esta problemática no contexto da Engenharia Química, destaca-se a técnica conhecida como Balanço Populacional (BP), que, por possibilitar a modelagem de fenômenos discretos de interação entre partículas em um escoamento multifásico polidisperso, se destaca como bastante promissora na análise destes. A Equação de Balanço Populacional (EBP) requer o emprego de métodos numéricos em sua resolução devido a sua complexidade. Diversos métodos já foram propostos para resolver esta equação e um método recente e promissor, o EQMOM (*Extended Quadrature Method of Moments*), se destaca por procurar atender uma das características que um método que se propõe a resolver a EBP deve apresentar: gerar uma aproximação funcional para a densidade numérica de partículas. O presente trabalho fora inspirado nesta característica deste método: gerar uma aproximação de uma distribuição da qual se conhece apenas alguns momentos. A partir de uma certa distribuição inicial da qual se conhecem os primeiros  $k$  momentos, tentou-se gerar uma aproximação funcional empregando combinações KDFs (*Kernel Density Functions*) gamma ou beta. O presente trabalho utilizou o cálculo da primeira quadratura do EQMOM para propor uma nova metodologia para aproximar distribuições, empregando otimização. Observou-se que a metodologia proposta foi capaz de gerar boas aproximações para as distribuições testadas, até para situações em que o número de parâmetros era razoavelmente elevado.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

## APPROXIMATION OF DENSITY FUNCTIONS BY SERIES OF DISTRIBUTIONS

Ana Carolina Conde Moraes Cosati

April/2017

Advisors: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Fabio Pereira dos Santos

Department: Chemical Engineering

Physical phenomena which can be described through some distribution are very common in several segments of science. Therefore, knowing these distributions and their behavior becomes essential to the extraction of relevant information to the behavior of the systems in general. In the context of Chemical Engineering, dispersed multiphase flows and, more precisely, the technique known as Population Balance (PB), which, by enabling the modeling of discrete phenomena of interaction between particles. This technique is quite promising in the analysis of such flows. The Population Balance Equation (PBE), due to its complexity, requires the usage of numerical methods in its resolution. Several methods have already been proposed to solve this equation and a recent and promising method, the EQMOM (Extended Quadrature Method of Moments), stands out since it tries to achieve one of the desired characteristics of the solution of the PBE: being able to generate a functional approximation for the numerical density of particles. The present work was inspired by this particular characteristic of this method: to generate an approximation for a certain distribution for which only a few of its moments are known. From a set of the first  $k$  moments of a certain initial and known distribution, the computation of an approximation by using KDFs (Kernel Density Functions). This work uses the computation of the first quadrature of EQMOM to propose a new way to approximate distributions. It was observed that the proposed methodology was able to generate good approximations for the proposed distributions, since the optimization algorithm could improve significantly the main characteristics of the distribution, even when the number of parameters were reasonably large.

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>xii</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xv</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.0.1 Motivação . . . . .	1
1.0.2 Objetivos . . . . .	2
1.0.3 Organização do Texto . . . . .	3
<b>2 Revisão Bibliográfica</b>	<b>4</b>
2.1 Breve Teoria de Balanço Populacional . . . . .	4
2.1.1 A Equação de Balanço Populacional . . . . .	4
2.2 Problema de Momentos e Aproximação de Funções . . . . .	11
2.2.1 O Problema Clássico dos Momentos . . . . .	12
2.2.2 O Problema dos Momentos de Stieltjes . . . . .	13
2.2.3 O Problema dos Momentos de Hausdorff . . . . .	14
2.2.4 O Problema dos Momentos Truncado . . . . .	15
2.3 Teoria Básica de Polinômios Ortogonais . . . . .	16
2.3.1 Conceitos Básicos . . . . .	17
2.3.2 Relação de Recorrência . . . . .	18
2.4 Métodos Numéricos . . . . .	21
<b>3 Metodologia</b>	<b>29</b>
3.0.1 Teoria de KDFs . . . . .	29
3.0.2 EQMOM . . . . .	30
3.0.3 A Metodologia Proposta . . . . .	34
<b>4 Resultados e Discussões</b>	<b>39</b>
4.1 Aproximando distribuições Betas por séries de distribuições Beta . . . . .	41
4.1.1 Estimativa Inicial: EQMOM . . . . .	42
4.1.2 Estimativa Inicial: Perturbação Randômica . . . . .	48
4.1.3 Perturbação Randômica e Otimização Local . . . . .	54

4.2	Aproximando distribuições Gama por séries de distribuições Gama . . .	59
4.2.1	Estimativa Inicial: EQMOM . . . . .	61
4.2.2	Estimativa Inicial: Perturbação Randomica . . . . .	71
4.2.3	Perturbação Randômica e Otimização Local . . . . .	77
4.3	Aproximação de outras distribuições por KDFs Beta e Gama . . . . .	81
4.3.1	Aproximações em domínio semi-infinito . . . . .	82
4.3.2	Aproximações em domínio finito . . . . .	90
<b>5</b>	<b>Conclusões e Sugestões</b>	<b>94</b>
5.0.3	Sugestões . . . . .	95
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>96</b>
<b>A</b>	<b>Apêndice A</b>	<b>98</b>
A.0.4	Distribuição Chi . . . . .	98
A.0.5	Distribuição Kumaraswamy . . . . .	99
A.0.6	Distribuição Exponencial . . . . .	100

# Lista de Figuras

2.1	Partículas dispersas de forma heterogênea no espaço. Adaptado de YEOH e TU [1] . . . . .	5
2.2	Representação de $f$ multivariada (bivariada). Extraída de FAVERO [4]	6
2.3	Processo de coalescência, adaptado de YEOH e TU [1]. . . . .	8
2.4	Processo de quebra, adaptado de YEOH e TU [1]. . . . .	9
2.5	Partículas dispersas de forma homogênea no espaço. Adaptado de YEOH e TU [1] . . . . .	10
2.6	Distribuições monovariadas apresentam uma única variável interna. <a href="http://www.portalaction.com.br/sites/default/files/EstatisticaBasica/figuras/distribuicaoNormal/normal.PNG">http://www.portalaction.com.br/sites/default/files/EstatisticaBasica/figuras/distribuicaoNormal/normal.PNG</a> acessado em 10/04. . . . .	10
2.7	Caracterização de uma distribuição a partir de seus momentos. . . . .	11
2.8	Thomas Joannes Stieltjes, matemático holandês. . . . .	13
4.1	Função de partida constituída pela soma ponderada de 2 KDFs beta aproximada por 2 KDFs beta respectivamente. . . . .	42
4.2	Comparação entre o presente método e o EQMOM, empregando $2n+1$ momentos. . . . .	43
4.3	Função de partida constituída pela soma ponderada de 3 KDFs beta aproximada por 3 KDFs beta respectivamente. . . . .	44
4.4	Função de partida constituída pela soma ponderada de 4 KDFs beta aproximada por 4 KDFs beta respectivamente. . . . .	45
4.5	Função de partida constituída pela soma ponderada de 5 KDFs beta aproximada por 5 KDFs beta respectivamente. . . . .	47
4.6	Função de partida constituída pela soma ponderada de 2 KDFs beta aproximada por 2 KDFs beta respectivamente. . . . .	48
4.7	Função de partida constituída pela soma ponderada de 3 KDFs beta aproximada por 3 KDFs beta respectivamente. . . . .	50
4.8	Função de partida constituída pela soma ponderada de 4 KDFs beta aproximada por 4 KDFs beta respectivamente. . . . .	52
4.9	Função de partida constituída pela soma ponderada de 5 KDFs beta aproximada por 5 KDFs beta respectivamente. . . . .	53

4.10	Função de partida constituída pela soma ponderada de 2 KDFs beta aproximada por 2 KDFs beta respectivamente. . . . .	54
4.11	Função de partida constituída pela soma ponderada de 3 KDFs beta aproximada por 3 KDFs beta respectivamente. . . . .	56
4.12	Função de partida constituída pela soma ponderada de 4 KDFs beta aproximada por 4 KDFs beta respectivamente. . . . .	57
4.13	Função de partida constituída pela soma ponderada de 5 KDFs beta aproximada por 5 KDFs beta respectivamente. . . . .	58
4.14	Função de partida constituída pela soma ponderada de 4 KDFs beta aproximada por 4 KDFs beta respectivamente. . . . .	61
4.15	Comparação entre o presente método e o EQMOM na geração de uma aproximação empregando os $2n + 1$ primeiros momentos. . . . .	62
4.16	Função de partida constituída pela soma ponderada de 3 KDFs gama aproximada por 3 KDFs gama respectivamente. . . . .	63
4.17	Função de partida constituída pela soma ponderada de 4 KDFs gama aproximada por 4 KDFs gama, respectivamente. . . . .	64
4.18	Falha na reconstrução da distribuição para valores pequenos de $\xi$ . . .	66
4.19	Um dos pontos de colocação é zerada pelo EQMOM. Como o critério de tolerâncias na função objetivo é atingido preferencialmente, a reconstrução se mostra falha. . . . .	67
4.20	Papel desempenhado pelo vetor de ponderação $\mathbf{p}$ no caso G3G3EqmCRS. . . . .	68
4.21	Função de partida constituída pela soma ponderada de 5 KDFs gama aproximada por 5 KDFs gama respectivamente. . . . .	69
4.22	Função de partida constituída pela soma ponderada de 2 KDFs gama aproximada por 2 KDFs gama respectivamente. . . . .	71
4.23	Função de partida constituída pela soma ponderada de 3 KDFs gama aproximada por 3 KDFs gama respectivamente. . . . .	72
4.24	Função de partida constituída pela soma ponderada de 4 KDFs gama aproximada por 4 KDFs gama respectivamente. . . . .	73
4.25	Função de partida constituída pela soma ponderada de 5 KDFs gama aproximada por 5 KDFs gama respectivamente. . . . .	75
4.26	Função de partida constituída pela soma ponderada de 2 KDFs gama aproximada por 2 KDFs gama respectivamente. . . . .	77
4.27	Função de partida constituída pela soma ponderada de 3 KDFs gama aproximada por 3 KDFs gama respectivamente. . . . .	78
4.28	Função de partida constituída pela soma ponderada de 4 KDFs gama aproximada por 4 KDFs gama respectivamente. . . . .	79

4.29	Função de partida constituída pela soma ponderada de 5 KDFs gama aproximada por 5 KDFs gama respectivamente. . . . .	80
4.30	Função de partida constituída pela soma ponderada de 2 distribuições Chi aproximada por 2 KDFs gama, respectivamente. . . . .	82
4.31	Função de partida constituída pela soma ponderada de 3 distribuições Chi aproximada por 3 KDFs gama, respectivamente. . . . .	83
4.32	Cálculo da métrica $\ell^2$ quando se altera o número de KDFs combinadas para gerar a aproximação. Caso C3G3EqmCRS. . . . .	85
4.33	Função de partida constituída pela soma ponderada de 2 distribuições exponenciais aproximada por 2 KDFs gama, respectivamente. . . . .	86
4.34	Função de partida constituída pela soma ponderada de 3 distribuições exponenciais aproximada por 3 KDFs gama, respectivamente. . . . .	87
4.35	Cálculo da métrica $\ell^2$ quando se altera o número de KDFs combinadas para gerar a aproximação. Caso E3G3EqmCRS. . . . .	88
4.36	Função de partida constituída pela soma ponderada de 2 distribuições Kumaraswamy aproximada por 2 KDFs beta, respectivamente. . . . .	90
4.37	Função de partida constituída pela soma ponderada de 3 distribuições Kumaraswamy aproximada por 3 KDFs beta, respectivamente. . . . .	91
4.38	Cálculo da métrica $\ell^2$ quando se altera o número de KDFs combinadas para gerar a aproximação. Caso K4B4qmCRS. . . . .	92
A.1	Distribuição Chi. . . . .	98
A.2	Distribuição Kumaraswamy. . . . .	99
A.3	Distribuição Exponencial. . . . .	100

# Lista de Tabelas

2.1	Principais famílias de polinômios ortogonais. . . . .	21
3.1	Valores de entrada de acordo com a distribuição de partida. . . . .	36
4.1	Sufixo 1 - Inicial correspondendo à distribuição de partida . . . . .	39
4.2	Sufixos associados a estimativa inicial. . . . .	39
4.3	Casos propostos. . . . .	40
4.4	Tabela de Parâmetros: Caso B2B2EqmCRS . . . . .	42
4.5	Informações adicionais: Caso B2B2EqmCRS . . . . .	43
4.6	Tabela de parâmetros: Caso B3B3EqmCRSD . . . . .	45
4.7	Informações adicionais: Caso B3B3EqmCRSD . . . . .	45
4.8	Tabela de Parâmetros: Caso B4B4EqmCRS . . . . .	46
4.9	Informações adicionais: Caso B4B4EqmCRS . . . . .	46
4.10	Tabela de parâmetros: Caso B5B5EqmCRS . . . . .	47
4.11	Informações adicionais: Caso B5B5EqmCRS . . . . .	47
4.12	Tabela de parâmetros: Caso B2B2PerCRS . . . . .	49
4.13	Informações adicionais: Caso B2B2PerCRS . . . . .	50
4.14	Tabela de parâmetros: Caso B3B3PerCRS . . . . .	51
4.15	Informações adicionais: Caso B3B3PerCRS . . . . .	51
4.16	Tabela de parâmetros: Caso B4B4PerCRS . . . . .	52
4.17	Informações adicionais: Caso B4B4PerCRS . . . . .	52
4.18	Tabela de parâmetros: Caso B5B5PerCRS . . . . .	53
4.19	Informações adicionais: Caso B5B5PerCRS . . . . .	54
4.20	Tabela de parâmetros: Caso B2B2PerL . . . . .	55
4.21	Informações adicionais: Caso B2B2PerL . . . . .	55
4.22	Tabela de parâmetros: Caso B3B3PerL . . . . .	56
4.23	Informações adicionais: Caso B3B3PerL . . . . .	56
4.24	Tabela de parâmetros: Caso B4B4PerL . . . . .	57
4.25	Informações adicionais: Caso B4B4PerL . . . . .	57
4.26	Tabela de parâmetros: Caso B5B5PerL . . . . .	59
4.27	Informações adicionais: Caso B5B5PerL . . . . .	59

4.28	Tabela de Parâmetros: Caso G2G2EqmCRS . . . . .	61
4.29	Informações adicionais caso G2G2EqmCRS . . . . .	61
4.30	Tabela de Parâmetros: Caso G3G3EqmCRS . . . . .	63
4.31	Informações adicionais: Caso G3G3EqmCRS . . . . .	63
4.32	Tabela de Parâmetros: Caso G4G4EqmCRS . . . . .	64
4.33	Informações adicionais: Caso G4G4EqmCRS . . . . .	64
4.34	Momentos da KDF gama . . . . .	65
4.35	Tabela de parâmetros: Caso G5G5EqmCRS . . . . .	69
4.36	Informações adicionais: Caso G5G5EqmCRS . . . . .	69
4.37	Tabela de parâmetros: Caso G2G2PerCRS . . . . .	71
4.38	Informações adicionais: Caso G2G2PerCRS . . . . .	72
4.39	Tabela de parâmetros: Caso G3G3PerCRS . . . . .	72
4.40	Informações adicionais: Caso G3G3PerCRS . . . . .	73
4.41	Tabela de parâmetros: Caso G4G4PerCRS . . . . .	74
4.42	Informações adicionais: Caso G4G4PerCRS . . . . .	74
4.43	Tabela de parâmetros: Caso G5G5PerCRS . . . . .	75
4.44	Informações adicionais: Caso G5G5PerCRS . . . . .	75
4.45	Tabela de parâmetros: Caso G2G2PerL . . . . .	77
4.46	Informações adicionais: Caso G2G2PerL . . . . .	78
4.47	Tabela de parâmetros: Caso G3G3PerL . . . . .	79
4.48	Informações adicionais: Caso G3G3PerL . . . . .	79
4.49	Tabela de parâmetros: Caso G4G4PerL . . . . .	80
4.50	Informações adicionais: Caso G4G4PerL . . . . .	80
4.51	Tabela de parâmetros: Caso G5G5PerL . . . . .	81
4.52	Informações adicionais: Caso G5G5PerL . . . . .	81
4.53	Tabela de parâmetros: Caso C2G2EqmCRS . . . . .	82
4.54	Informações adicionais caso C2G2EqmCRS . . . . .	83
4.55	Tabela de parâmetros: Caso C3G3EqmCRS . . . . .	84
4.56	Informações adicionais caso C3G3EqmCRS . . . . .	84
4.57	Tabela de parâmetros: Caso E2G2EqmCRS . . . . .	86
4.58	Informações adicionais: Caso E2G2EqmCRS . . . . .	86
4.59	Tabela de parâmetros: Caso E3G3EqmCRS . . . . .	88
4.60	Informações adicionais: Caso E3G3EqmCRS . . . . .	88
4.61	Tabela de parâmetros: Caso K2B2qmCRS . . . . .	90
4.62	Informações adicionais: Caso K2B2qmCRS . . . . .	91
4.63	Tabela de parâmetros: Caso K3B3qmCRS . . . . .	91
4.64	Informações adicionais: Caso K3B3qmCRS . . . . .	92

# Capítulo 1

## Introdução

Diversos são os segmentos das ciências que fazem uso de distribuições de densidade de probabilidade. Dentre estes, podemos destacar, por exemplo, engenharia química e de processos, engenharia eletrônica, biotecnologia e física nuclear. Em determinados tipos de problemas, deseja-se determinar o perfil da distribuição e, para isso, faz-se uso de propriedades integrais das mesmas, usualmente denominadas momentos. Reconstruir uma distribuição através de seus momentos é um exemplo de problema de inversão, no qual se quer determinar uma causa através da observação de seus efeitos. Situando este assunto no contexto da engenharia química, mais precisamente em escoamentos multifásicos, se destaca a técnica de Balanço Populacional. Esta técnica permite analisar e conhecer o comportamento de uma fase dispersa em um escoamento de um determinado fluido, através de uma equação que rege a evolução de uma distribuição que caracteriza a fase dispersa, a Equação de Balanço Populacional (EBP).

A EBP apresenta como solução uma distribuição específica. Alguns métodos propostos na literatura buscam formas de gerar uma aproximação para essa distribuição a partir dos momentos desta, devido à necessidade de se conhecer valores pontuais da distribuição. O processo de caracterização e identificação de uma distribuição através de seus momentos é determinado Problema de Inversão de Momentos. Neste contexto, este trabalho busca propor uma forma de reconstruir uma distribuição a partir de um conjunto finito de seus momentos, fazendo uso de distribuições especiais, denominadas KDFs, do inglês *Kernel Density Functions*. Não será resolvida a equação de Balanço Populacional, contudo, este assunto será brevemente discutido, pois a metodologia proposta no presente trabalho faz uso do EQMOM, um método que se propõe a resolver a EBP.

### 1.0.1 Motivação

Conhecer o perfil e o comportamento de uma distribuição é de extremo interesse em diferentes áreas das ciências, portanto, métodos que permitam essa caracteriza-

ção apresentam grande importância. O LTFD - Laboratório de Termofluidodinâmica da COPPE, possui em seu histórico um amplo acervo de trabalhos nos quais os momentos de uma distribuição são aplicados na solução de problemas, tanto voltados para a solução da EBP quanto em aplicação de problemas relacionados a Termodinâmica do Contínuo.

## Histórico de Pesquisas do LTFD

O trabalho de SILVA [2] buscou desenvolver metodologias para a simulação de escoamentos polidispersos. Além disso, buscando comparar os métodos existentes na literatura que se propõem a resolver a Equação de Balanço Populacional, o trabalho mostrou que o DQMOM (*Direct Quadrature Method of Moments*) era o mais acurado dentre os demais.

Em seguida, a dissertação de mestrado de SANTOS [3] busca gerar uma forma do DQMOM empregando momentos generalizados, na tentativa de tornar o método mais robusto e acurado para a aplicação na solução da EBP. Mais sobre este assunto será visto posteriormente. Em seu trabalho, os momentos generalizados usam como funções teste bases de polinômios ortogonais, como os de Laguerre e Legendre.

A tese de doutorado de FAVERO [4] visou o desenvolvimento e implementação de métodos numéricos para a solução da EBP multivariada, além de acoplar estes com um código de CFD (*Computational Fluid Dynamics*). FAVERO [4] concluiu que o método mais adequado para o acoplamento entre Balanço Populacional e CFD foi o DQMOM-FC. Em seu trabalho, o autor propôs também um método de inversão de problemas de momentos multivariados.

### 1.0.2 Objetivos

O principal objetivo deste trabalho é propor uma metodologia que seja capaz de reproduzir de forma adequada uma distribuição conhecida, a partir de um conjunto finito de seus momentos. O método aqui proposto faz uso de otimização não-linear multiparamétrica para atingir este objetivo. Dentre os objetivos específicos, pode-se citar:

- Comparar a distribuição gerada pelo método com a do EQMOM.
- Avaliar o custo computacional.
- Avaliar a robustez do método proposto.
- Avaliar o comportamento do método frente ao chute inicial gerado pelo EQMOM e outros propostos.
- Avaliar a acurácia e a taxa de convergência do método.

### **1.0.3 Organização do Texto**

No capítulo 2 é apresentada a revisão bibliográfica necessária para a devida compreensão dos fundamentos teóricos que servem de embasamento para o trabalho. O capítulo 3 trata da metodologia proposta para gerar a aproximação mediante o emprego das distribuições. O capítulo 4 se destina a apresentação dos principais resultados obtidos com a metodologia proposta neste trabalho, bem como sua discussão. O capítulo 5 mostra as principais conclusões obtidas do entendimento e interpretação dos resultados.

# Capítulo 2

## Revisão Bibliográfica

Este capítulo procura abordar toda a fundamentação teórica que serviu de base para o desenvolvimento deste trabalho. Foi feita uma breve e rápida revisão da literatura sobre a teoria básica de Balanço Populacional, além de um estudo sobre o problema clássico dos momentos e polinômios ortogonais. Posteriormente, foram estudados os principais métodos numéricos para resolver a EBP com enfoque na capacidade destes de aproximar a distribuição, além de métodos que buscam apenas gerar uma aproximação para distribuições.

### 2.1 Breve Teoria de Balanço Populacional

Apesar do objetivo deste trabalho não envolver por enquanto a resolução da Equação de Balanço Populacional (EBP), cabe uma breve explanação sobre o assunto, uma vez que este tem como base um método numérico que fora desenvolvido com a finalidade de resolver tal Equação. Sendo assim, torna-se necessário conhecer minimamente a EBP, para que se possa ter um melhor entendimento do funcionamento das metodologias empregadas em sua solução. Para mais detalhes, basta a leitura das referências recomendadas.

#### 2.1.1 A Equação de Balanço Populacional

A EBP é uma Equação de transporte na qual a variável transportada é a **distribuição de densidade numérica** de partículas, distribuída em uma ou mais propriedades (ex.: tamanho, composição) (RAMKRISHNA [5]).

Porque é interessante conhecer o comportamento desta distribuição, ou seja, como esta evolui no tempo e no espaço? Para responder esta pergunta, basta observar o quanto os escoamentos multifásicos dispersos estão presentes na indústrias químicas. Estes escoamentos são caracterizados pela presença de uma fase contínua e outra dispersa, na forma de bolhas, gotas ou partículas. Constatado isso, fica claro quanto a caracterização desta distribuição auxilia em cálculos de performance

de equipamentos ou na obtenção de produtos finais que obedecem a um conjunto de especificações (SILVA [2]).

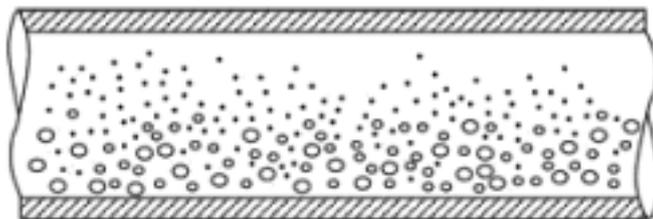
O emprego da técnica de Balanço Populacional é bastante abrangente e uma breve revisão da literatura mostra sua aplicação na modelagem e resolução de problemas envolvendo cristalização, aerossóis, *sprays*, polimerização e precipitação, dentre outros. Isto ocorre porque a esta permite a devida modelagem de fenômenos comuns nestes tipos de sistemas, tais como quebra, agregação, nucleação e crescimento de partículas, fornecendo ferramentas necessárias a análise do comportamento destes sistemas (SILVA [2]).

A distribuição numérica de partículas,  $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ , quantidade transportada na EBP, representa a quantidade média de partículas em um determinado tempo  $t$  por unidade volume do espaço de estados, na qual:

- $\mathbf{x} \in \Omega_{\mathbf{x}}$  é o vetor de variáveis externas e
- $\mathbf{v} \in \Omega_{\mathbf{v}}$  é o vetor de variáveis internas.

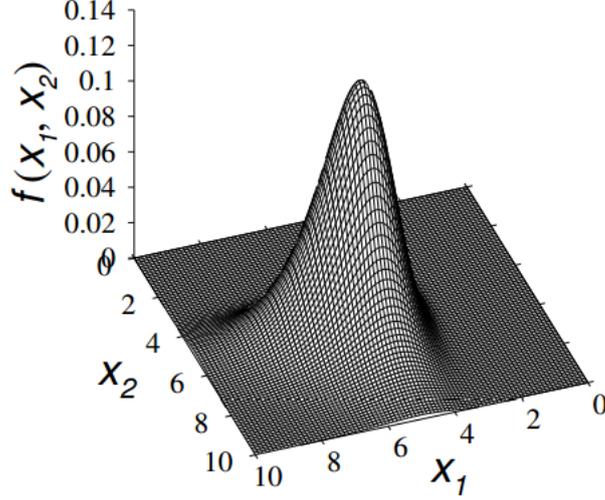
O domínio gerado pelo produto cartesiano entre  $\Omega_{\mathbf{x}}$  e  $\Omega_{\mathbf{v}}$  é denominado **espaço de estados** das partículas. As variáveis externas consistem no espaço físico, isto é, o vetor posição da partícula ( $\mathbb{R}^3$ ), enquanto as variáveis internas são as propriedades das partículas do sistema em questão, como por exemplo tamanho e área superficial. Sistemas cujas partículas não se encontram igualmente distribuídas no espaço apresentam dependência espacial do vetor de variáveis externas e por isso empregam a EBP em sua forma **heterogênea**.

Além disso, em situações reais da indústria, quando se observa um escoamento disperso, raramente as partículas são iguais, diferindo em apenas uma propriedade, e por isso se fala em **polidispersão**. Isto mostra que a real modelagem de sistemas particulados, nestes casos, pode empregar uma forma **multivariada** da  $f$ , sendo que a dimensão do espaço de variáveis internas equivale ao número de propriedades diferentes apresentadas pelas partículas população. A Figura 2.1 ilustra sistemas regidos pela forma heterogênea, isto é, considerando a variação espacial da EBP.



**Figura 2.1:** Partículas dispersas de forma heterogênea no espaço. Adaptado de YEOH e TU [1]

A Figura 2.2 busca ilustrar uma distribuição em mais de uma propriedade. É importante ressaltar que, como a representação de uma distribuição com espaço de variáveis internas de dimensão maior que dois é difícil, a representação demonstra esta para um caso bivariado, ou seja, cuja dimensão do espaço  $\Omega_{\mathbf{v}}$  é 2.



**Figura 2.2:** Representação de  $f$  multivariada (bivariada). Extraída de FAVERO [4]

Através da  $f$  pode-se conhecer algumas propriedades interessantes do sistema particulado. Por exemplo, ao integrar esta quantidade no espaço de estados, obtém-se o número total de partículas em função do tempo. A Equação de balanço populacional, em sua forma heterogênea e multivariada, está descrita na Equação 2.1 (SILVA [2]):

$$\frac{\partial f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} = -\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\dot{\mathbf{X}} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot [\mathbf{D}_x \cdot (\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{D}_x^T f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t))] + H(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) \quad (2.1)$$

O primeiro termo do lado direito da Equação 2.1 representa o transporte convectivo, sendo  $\dot{\mathbf{X}}$  a taxa com que as variáveis externas ( $\mathbf{x}$ ) variam no tempo e o segundo termo representa a parcela de partículas transportada via difusão, onde  $\mathbf{D}_x$  é o coeficiente de difusão anisotrópico. Ainda, na Equação 2.1,  $H(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$  é o termo fonte da EBP, que envolve os termos de nucleação, crescimento, quebra e agregação. Este termo é muito importante e será esmiuçado em seções posteriores. O termo fonte possui também dependência de  $\mathbf{y}$ , que é o vetor de variáveis da fase contínua que influenciam diretamente os processos entre as partículas e a evolução da fase dispersa como um todo.

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) = B_c(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) - D_c(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) + B_b(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) - D_b(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) + J(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) + G(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) \quad (2.2)$$

As iniciais buscam descrever o fenômeno envolvido, segundo

- B - "*B*irth"
- D - "*D*eath"
- b - "*b*reakage"
- c - "*c*oalescence"

O termo  $G(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$  expressa a variações no estado das propriedades das partículas e assume a forma dada na Equação 2.3.

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) = -\nabla_{\mathbf{v}} \cdot (\dot{\mathbf{V}} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)) + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot [\mathbf{D}_v \cdot (\nabla_{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{D}_v^T f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t))] \quad (2.3)$$

Na Equação acima,  $\dot{\mathbf{V}}$  é a taxa temporal de variação das variáveis internas. O segundo termo do lado direito da Equação 2.3 representa a contribuição estocástica da variação. O termo  $J(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$  é o termo de nucleação.

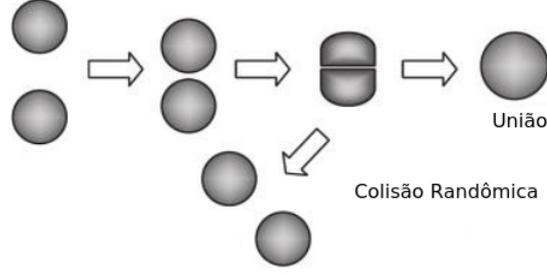
Mais detalhes sobre a EBP podem ser encontrados em RAMKRISHNA [5] e em YEOH e TU [1].

## Fenômenos de Agregação

Em escoamentos, devido à dinâmica da fase contínua, as partículas se movimentam no domínio e podem colidir umas com as outras. Essa colisão é responsável por fenômenos importantes, como o caso do fenômeno de agregação. Tal fenômeno pode ocorrer com diversas partículas se juntando e formando um aglomerado ou ainda quando duas bolhas ou gotas se associam formando uma terceira entidade. A este último caso se dá o nome de **coalescência**.

O fenômeno de coalescência depende da drenagem da camada de fluido que separa duas partículas dispostas em uma certa região do domínio, até a espessura de fluido que as separa seja a de um filme. Em situações em que se observa a ruptura deste filme, ocorre a coalescência entre essas partículas. Este fenômeno é ilustrado na Figura 2.3.

A análise da Figura 2.3 chama atenção para casos em que a ruptura do filme de fluido presente entre as partículas não ocorre. Com isto, observa-se que nem toda a colisão leva, de fato, ao processo de coalescência. Por isso, é importante definir uma **frequência de agregação**,  $a$ , que é um produto entre a frequência de colisões



**Figura 2.3:** Processo de coalescência, adaptado de YEOH e TU [1].

entre partículas de estados diferentes e a eficiência de agregação. Mais informações sobre esta variável pode ser encontrado em RAMKRISHNA [5].

O termo de agregação, com suas parcelas de nascimento e morte de uma partícula de estado  $(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ , são mostrados nas Equações 2.4 e 2.5, sendo ambas encontradas em [5].

$$B_c(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) = \frac{1}{\delta} \int_{\Omega_{\mathbf{x}'}} \int_{\Omega_{\mathbf{v}'}} a(\mathbf{x}', \mathbf{v}'; \mathbf{x}'', \mathbf{v}''; \mathbf{y}, t) f(\mathbf{x}', \mathbf{v}', t) f(\mathbf{x}'', \mathbf{v}'', t) \frac{\partial(\mathbf{x}', \mathbf{v}')}{\partial(\mathbf{x}, \mathbf{v})} dV_{\mathbf{v}'} dV_{\mathbf{x}'} \quad (2.4)$$

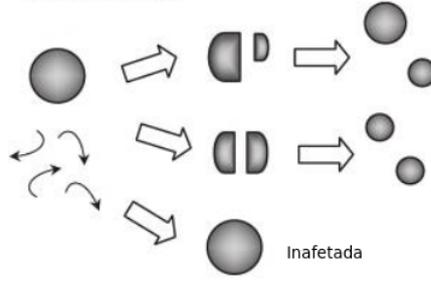
$$D_c(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) = \int_{\Omega_{\mathbf{x}'}} \int_{\Omega_{\mathbf{v}'}} a(\mathbf{x}, \mathbf{v}; \mathbf{x}', \mathbf{v}'; \mathbf{y}, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) f(\mathbf{x}', \mathbf{v}', t) dV_{\mathbf{v}'} dV_{\mathbf{x}'} \quad (2.5)$$

Na Equação 2.4 referente ao nascimento de partículas por coalescência, o termo  $\partial(\mathbf{x}', \mathbf{v}')/\partial(\mathbf{x}, \mathbf{v})$  corresponde ao jacobiano que realiza a transformação de coordenadas para que estas fiquem em termos do estado  $(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ . Este termo está devidamente ilustrado em RAMKRISHNA [5]. Na mesma Equação, o termo  $1/\delta$  evita redundância na contagem de pares idênticos.

### Fenômenos de Quebra

Os fenômenos de quebra de partículas em um escoamento podem ocorrer por diferentes motivos como a colisão com uma outra partícula ou ainda devido à dinâmica da fase contínua, como é o caso de escoamentos turbulentos, nos quais a quebra é induzida pela ação de vórtices que causam deformações nas partículas (fluidas), podendo então causar a ruptura das mesmas. A Figura 2.4 ilustra o mecanismo de um processo de quebra.

Os termos de nascimento e morte por quebra de uma partícula de estado  $(\mathbf{x}, \mathbf{v})$  são mostrados nas Equações 2.6 e 2.7, respectivamente.



**Figura 2.4:** Processo de quebra, adaptado de YEOH e TU [1].

$$B_b(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) = \int_{\Omega_{\mathbf{x}'}} \int_{\Omega_{\mathbf{v}'}} \vartheta(\mathbf{x}', \mathbf{v}'; \mathbf{y}, t) b(\mathbf{x}', \mathbf{v}'; \mathbf{y}, t) P(\mathbf{x}, \mathbf{v} | \mathbf{x}', \mathbf{v}'; \mathbf{y}, t) f(\mathbf{x}', \mathbf{v}', t) dV_{\mathbf{v}'} dV_{\mathbf{x}'}$$
(2.6)

$$D_b(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) = b(\mathbf{x}', \mathbf{v}'; \mathbf{y}, t) f(\mathbf{x}', \mathbf{v}', t)$$
(2.7)

Nestas Equações,  $b$  é a denominada frequência de quebra, que busca quantificar a fração de partículas de estado  $(\mathbf{x}, \mathbf{v})$  submetidas a processos de quebra por unidade de tempo. O termo  $P(\mathbf{x}, \mathbf{v} | \mathbf{x}', \mathbf{v}'; \mathbf{y}, t)$  representa a probabilidade condicional de uma partícula de estado  $(\mathbf{x}', \mathbf{v}')$ , submetidos a  $\mathbf{y}$  em um tempo  $t$ , dar origem a uma partícula filha de estado  $(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ .

Ainda,  $\vartheta(\mathbf{x}', \mathbf{v}'; \mathbf{y}, t)$  representa o número médio de partículas que surgem no domínio oriundos da quebra de uma partícula de estado  $(\mathbf{x}', \mathbf{v}')$ . Apesar de ser intuitivo, cabe ressaltar que  $\vartheta(\mathbf{x}', \mathbf{v}'; \mathbf{y}, t) \geq 2$ .

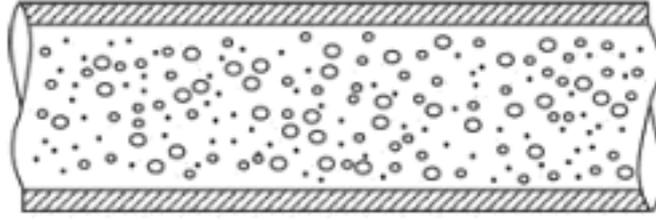
### Hipóteses Simplificadoras

Algumas simplificações que podem ser feitas visando reduzir a complexidade da Equação de Balanço Populacional. Os métodos disponíveis na literatura propõem metodologias numéricas para tentar resolver a forma mais simplificada desta Equação e mesmo assim, esbarram por vezes em uma série de problemas.

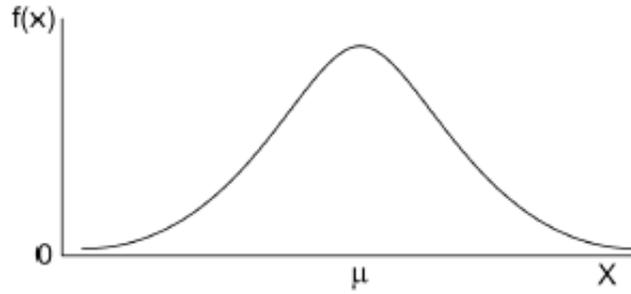
A primeira simplificação a ser feita diz respeito a resolver o problema de balanço populacional desprezando sua variação espacial. A isto corresponde a EBP espacialmente homogênea, empregada em sistemas representados através da Figura 2.5.

Esta simplificação reduz bastante a complexidade da Equação. Contudo mais hipóteses simplificadoras podem ser admitidas, como assumir a distribuição monovariada, conforme ilustrado na Figura 2.6. Além disso, busca-se trabalhar com propriedades extensivas.

No equacionamento mostrado a partir deste ponto, a dependência dos componentes do termo fonte com o vetor de variáveis da fase contínua,  $\mathbf{y}$ , será implícita,



**Figura 2.5:** Partículas dispersas de forma homogênea no espaço. Adaptado de YEOH e TU [1]



**Figura 2.6:** Distribuições monovariadas apresentam uma única variável interna. <http://www.portalaction.com.br/sites/default/files/EstatisticaBasica/figuras/distribuicaoNormal/normal.PNG> acessado em 10/04.

e não será mais mostrada. A variável interna de trabalho será extensiva e denotada por  $v$ . É interessante propor que a variável interna seja extensiva porque isto leva o jacobiano da transformação de coordenadas presente no termo de nascimento por coalescência (mostrado na Equação 2.4) a assumir valor unitário.

A Equação 2.8 mostra cada componente do termo de coalescência, englobando a morte e o nascimento de partículas dadas por esse fenômeno, com todas as devidas hipóteses de simplificação assumidas e com  $\delta = 2$ .

$$\begin{aligned}
 B_c(v) &= \frac{1}{2} \int_0^v f(v-v')f(v)a(v-v',v')dv' \\
 D_c(v) &= \int_0^\infty f(v)f(v')a(v,v')dv'
 \end{aligned}
 \tag{2.8}$$

Similarmente, os termos de quebra com as simplificações assumidas nesta seção assume forma descrita através da Equação 2.9, assumindo quebra binária, conforme já citado.

$$\begin{aligned}
 B_b(v) &= 2 \int_{v'}^\infty P(v|v')b(v')f(v')dv' \\
 D_b(v) &= b(v)f(v)
 \end{aligned}
 \tag{2.9}$$

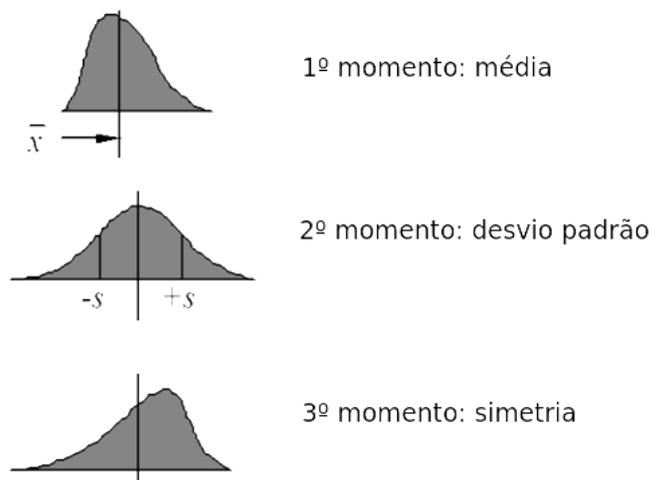
Cabe ressaltar que, apesar das simplificações feitas, a EBP ainda apresenta elevado grau de complexidade, o que torna sua solução analítica complexa e, comumente, impraticável. Surge então a necessidade do desenvolvimento de metodologias numéricas que possam ser aplicadas na obtenção de uma solução para esta importante Equação.

## 2.2 Problema de Momentos e Aproximação de Funções

Esta seção se destina tratar brevemente do denominado Problema dos Momentos. Conforme SHOHAT e TAMARKIN [6], esta questão é bastante antiga em origem e já recebeu atenção de cientistas e matemáticos renomados como Stieltjes, Hamburger e Hausdorff, entre outros tantos. Antes de dar início ao estudo do Problema dos Momentos, torna-se necessária uma breve explanação sobre o operador de momentos e sua importância na caracterização de distribuições.

### O Operador de Momentos:

O operador integral de momentos, quando aplicado a uma distribuição, fornece quantidades que auxiliam na caracterização desta. Um exemplo disto será dado quando for abordada a questão do método dos momentos, na seção de métodos numéricos. Nesta, será visto que os valores dos momentos são associados a informações sobre a população de um sistema, e serão dados alguns exemplos, como o dos momentos de ordem zero, um e de momentos fracionários. Apesar deste ser um bom exemplo, é interessante conhecer como se dá essa caracterização de uma distribuição sob um ponto de vista mais matemático. A Figura 2.7 mostra como os momentos se relacionam como uma distribuição qualquer.



**Figura 2.7:** Caracterização de uma distribuição a partir de seus momentos.

Desta forma, conhecendo um conjunto suficientemente grande de momentos, é possível caracterizar uma distribuição e isso será comentado posteriormente. O operador de momentos tem sua fórmula descrita segundo a Equação 2.10:

$$\langle x^k, \cdot \rangle = \int_0^{x_{max}} x^k \cdot dx \quad (2.10)$$

Desta forma, para uma distribuição  $f(x)$  qualquer, os momentos serão dados segundo a Equação 2.11 abaixo:

$$\langle x^k, f(x) \rangle = \mu_k(x) = \int_0^{x_{max}} x^k f(x) dx \quad (2.11)$$

### 2.2.1 O Problema Clássico dos Momentos

Para que se possa enunciar o problema dos momentos, (CHRISTIANSEN [7]) deve-se considerar um intervalo  $I$ ,  $I \subseteq \mathbb{R}$  e  $\psi$  uma medida definida em  $I$ . O momento de ordem  $n$ ,  $\mu_n$ , é definido pela integral definida na Equação 2.12, uma vez que esta exista. Na Equação 2.12,  $d\psi = f(x)dx$

$$\mu_n = \int_I x^n d\psi(x) = \int_I x^n f(x) dx \quad (2.12)$$

Deve-se considerar também um conjunto (seqüência) de números reais  $a_n, n > 0$ . O problema dos momentos pode ser então enunciado, pois este consiste em buscar uma solução para as questões descritas abaixo:

- I - Existe uma medida  $f(x) \geq 0$ , com suporte em  $I$ , cujos momentos  $n = 0, 1, 2, \dots$  sejam representados pela seqüência de números reais  $a_n$ ?
- II - Se sim, essa medida é a única que pode ser determinada pelos momentos  $a_n$ ?
- III - Se não, como se pode conhecer todas as medidas positivas  $f(x) \geq 0$  definidas em  $I$  que apresentem como momentos o conjunto  $a_n$ ?

Quando se consegue obter uma medida  $f(x) \geq 0$  que tenha como momentos o conjunto de números reais  $a_n$ , diz-se que  $f(x)$  é uma *solução* para o problema de momentos.

Quando a medida  $f(x) \geq 0$ , solução do problema, é única o problema de momentos é dito **determinado**. Quando existe mais de uma medida para qual  $f(x) \geq 0$ , ou seja, quando existe mais de uma solução para o problema de momentos, este é dito **indeterminado**.

Quanto ao intervalo da reta real  $I$  considerado, surgem outras caracterizações do problema de momentos. Em suma, existem três tipos de intervalos  $I$  a serem considerados, sendo estes o semi-infinito  $[0, \infty)$ , o finito  $[0, 1]$  e o infinito  $(-\infty, \infty)$ . Quando se trabalha com o problema dos momentos definido em intervalo semi-infinito, este recebe o nome de problema dos momentos de Stieltjes, nome do matemático holandês que formulou e que propôs sua solução. Em domínio finito, se refere ao mesmo problema com o nome de problema dos momentos de Hausdorff. Finalmente, no caso do domínio de estudo do problema ser  $\mathbb{R}$ , fala-se em problema de momentos de Hamburger, em referência ao matemático alemão Hans Ludwig Hamburger, [7].



**Figura 2.8:** Thomas Joannes Stieltjes, matemático holandês.

Como este trabalho buscou aproximar distribuições tanto em domínio semi-infinito quanto finito, apenas os problemas de momentos relativos a estes domínios serão considerados. Uma restrição importante decorrente de trabalhar com uma distribuição é que a distribuição reconstruída deve ser não-negativa. Apesar desta ser uma restrição teoricamente simples e ser obedecida por qualquer distribuição real, é responsável pelas grandes dificuldades que se encontra quando se propõe metodologias para a solução deste tipo de problemas. Como retificam em seu artigo ATHANASSOULIS e GAVRILIADIS [8], a busca para uma solução para o problema de momentos reside basicamente na obtenção de condições específicas que a sequência de momentos dada por  $\mu_k$  deve apresentar para que possa equivaler a uma distribuição, quando reconstruída.

## 2.2.2 O Problema dos Momentos de Stieltjes

Conforme citado anteriormente, o problema dos momentos de Stieltjes pode ser descrito de maneira simples como:

$$\text{"Recupere uma função } f(x) \text{ dados os seus momentos}$$

$$\mu_k = \int_0^\infty x^k f(x) dx, k = 0, 1, 2, \dots \text{"}$$

Em seu famoso artigo "*Recherches sur les fractions continues*", de 1894, Stieltjes tanto formula a questão acima quanto propõe solução para esta. Seu trabalho aborda essa questão mediante análise das denominadas frações continuadas, que apresentam a forma demonstrada em 2.13.

$$\frac{1}{m_1 z + \frac{1}{l_1 + \frac{1}{m_2 z + \frac{1}{l_2 + \dots}}}} \quad (2.13)$$

Stieltjes mostra que a solução para o problema de momentos por ele proposto depende da natureza da fração contínua associada a integral. Como pode ser visto em

SHOHAT e TAMARKIN [6], frações continuadas associadas a esta integral exibem forma mostrada na Equação 2.14:

$$\int_0^{\infty} \frac{d\psi(y)}{z+y} \sim \frac{\mu_0}{z} - \frac{\mu_1}{z^2} + \frac{\mu_2}{z^3} - \frac{\mu_4}{z^4} + \dots \quad (2.14)$$

onde  $z \in \mathbb{C}$ . Neste trabalho, Stieljes mostra que, para a solução do problema de momentos existir, o seguinte teorema deve ser satisfeito.

**Teorema 2.2.1** *Para o problema de momentos em domínio semi-infinito apresentar solução, os determinantes das matrizes*

$$\Delta_k = \begin{pmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \dots & \mu_k \\ \mu_1 & \mu_2 & \dots & \mu_{k+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mu_k & \mu_{k+1} & \dots & \mu_{2k} \end{pmatrix}, \quad \Delta_k^{(1)} = \begin{pmatrix} \mu_1 & \mu_2 & \dots & \mu_{k+1} \\ \mu_2 & \mu_3 & \dots & \mu_{k+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mu_{k+1} & \mu_{k+2} & \dots & \mu_{2k+1} \end{pmatrix}$$

*devem ser positivos, ou seja:*

$$|\Delta_k| > 0 \quad (2.15)$$

e

$$|\Delta_k^{(1)}| > 0 \quad (2.16)$$

para  $k = 0, 1, 2, \dots$

### 2.2.3 O Problema dos Momentos de Hausdorff

Como visto, o problema dos momentos, quando abordado em domínio finito  $[0,1]$  tem seu nome atribuído ao matemático alemão Felix Hausdorff. Sendo assim, este pode ser enunciado segundo:

"Recupere uma função  $f(x)$  dados os seus momentos  
 $\mu_k = \int_0^1 x^k f(x) dx, k = 0, 1, 2, \dots$ "

ATHANASSOULIS e GAVRILIADIS [8] enunciam o teorema baseado no estudo de Hausdorff e em seu trabalho *Momentenprobleme für ein endliches intervall* que versa sobre as condições necessárias que um conjunto de momentos deve apresentar para que este subcaso do Problema de Momentos tenha solução. O teorema em questão é enunciado a seguir:

**Teorema 2.2.2** *A condição necessária e suficiente para que o Problema dos Momentos de Hausdorff apresente solução é que a sequência de momentos  $\mu_k, k = 0, 1, 2, \dots$  satisfaçam as seguintes desigualdades:*

$$\Delta^k \mu_n = \sum_{i=0}^k (-1)^i \binom{k}{i} \mu_{i+n} \geq 0, \quad k, n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.17)$$

*Se a solução existir, então ela é única.*

No teorema acima, tem-se também a Equação 2.18:

$$\binom{k}{i} = \frac{k!}{i!(k-i)!} \quad (2.18)$$

## 2.2.4 O Problema dos Momentos Truncado

Em situações reais, quando se deseja aplicar a teoria acima a sistemas físicos, obviamente não irá se dispor de infinitos momentos para que se possa caracterizar perfeitamente as distribuições. Sendo assim, faz-se uso de um conjunto **finito** de momentos e, por isso, se fala em **problema de momentos truncado**.

Para entender melhor as consequências de se trabalhar apenas com um conjunto finito de momentos, é necessário uma melhor contextualização do assunto, que será feita a seguir.

### Espaço de Momentos: Caracterização e Definição

A questão do conjunto de momentos selecionados para que se possa caracterizar uma certa distribuição remete a teoria que envolve o chamado de espaço de momentos. Sendo assim, para que se possa definir de forma apropriada o espaço de momentos, deve-se considerar uma determinada sequência de momentos,  $\boldsymbol{\mu}_k = \mu_0, \mu_1, \mu_2, \dots, \mu_k \in \mathbb{R}$ . Esta sequência de momentos pode caracterizar ou não uma distribuição, dado que não se pode afirmar que uma sequência qualquer de  $k$  números corresponda aos primeiros  $k$  momentos de uma distribuição. O conjunto de todos  $\boldsymbol{\mu}_k$  para os quais existe pelo menos uma distribuição que tenha a sequência de momentos  $\mu_0, \mu_1, \mu_2, \dots, \mu_k$  como seu primeiro, segundo, ...,  $n$ -ésimo momento é chamado **espaço de momentos** de ordem  $k$ , aqui sendo denotado por  $\mathbf{M}^k$ . O espaço de momentos possui características complexas e que são melhor discutidas e aprofundadas em KARLIN e SHAPLEY [9].

A definição de espaço de momentos é extremamente importante para que se possa compreender no que implica truncar um conjunto de momentos. Se a cada ponto  $\boldsymbol{\mu}_k$  que pertence a  $\mathbf{M}^k$  corresponde pelo menos uma distribuição, a seleção de um conjunto finito implica na perda da capacidade de se caracterizar integralmente a distribuição em questão. Logo, o problema de momentos pode retornar infinitas distribuições como solução. Isto ocorre porque esse conjunto de momentos pertence ao **interior do espaço de momentos**, denotado por  $\text{Int}\mathbf{M}^k$  e implica na indeterminação da solução do problema, uma vez que uma grande quantidade de distribuições podem ser solução deste.

Alguns métodos que visam a solução do problema de momentos truncados buscam outros critérios para a seleção da distribuição solução, já que apenas uma distribuição é selecionada dentre infinitas possibilidades. Quando, contudo, se trabalha

na **fronteira ou bordo**  $\partial M^K$  do espaço de momentos, a caracterização da distribuição se dá de forma integral, ou seja, é completamente conhecida, e a solução para o problema de momentos é única.

Uma medida que auxilia na caracterização adequada do espaço de momentos são os denominados determinantes de Hankel cujas fórmulas são mostradas a seguir.

$$\underline{H}_{2k} = \begin{vmatrix} \mu_0 & \dots & \mu_k \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mu_k & \dots & \mu_{2k} \end{vmatrix} \quad \overline{H}_{2k} = \begin{vmatrix} \mu_1 - \mu_2 & \dots & \mu_k - \mu_{k+1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mu_k - \mu_{k+1} & \dots & \mu_{2k} - \mu_{2k+1} \end{vmatrix}$$

$$\underline{H}_{2k+1} = \begin{vmatrix} \mu_1 & \dots & \mu_{k+1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mu_{k+1} & \dots & \mu_{2k+1} \end{vmatrix} \quad \overline{H}_{2k+1} = \begin{vmatrix} \mu_0 - \mu_1 & \dots & \mu_k - \mu_{k+1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mu_k - \mu_{k+1} & \dots & \mu_{2k} - \mu_{2k+1} \end{vmatrix}$$

O seguinte teorema relaciona os valores obtidos com o cálculo dos determinantes de Hankel obtidos através de um ponto  $\boldsymbol{\mu}_k \in \mathbb{R}^K$  com o espaço de momentos.

**Teorema 2.2.3** *Um ponto  $\boldsymbol{\mu}_k \in \mathbb{R}^K$  pertence ao espaço de momentos  $M^K$  se, e somente se, os determinantes de Hankel dados segundo  $\underline{H}_{2k}$ ,  $\overline{H}_{2k}$ ,  $\underline{H}_{2k+1}$  e  $\overline{H}_{2k+1}$  forem todos não-negativos.*

**Teorema 2.2.4** *Um ponto  $\boldsymbol{\mu}_k \in \mathbb{R}^K$  pertence ao interior do espaço de momentos  $\text{Int}M^K$  apenas se os determinantes de Hankel dados segundo  $\underline{H}_{2k}$ ,  $\overline{H}_{2k}$ ,  $\underline{H}_{2k+1}$  e  $\overline{H}_{2k+1}$  forem todos positivos.*

**Teorema 2.2.5** *Um ponto  $\boldsymbol{\mu}_k \in \mathbb{R}^K$  pertence ao bordo espaço de momentos  $\partial M^K$  se, e somente se, para um certo momento de ordem  $c$ ,  $1 < c < K$ ,  $\underline{H}_z > 0$   $\overline{H}_z > 0$ , para todo  $z = 1, \dots, c-1$  e  $\underline{H}_c = 0$  ou  $\overline{H}_c = 0$ . Neste caso, todos os determinantes de Hankel de ordem superior a  $c$  serão nulos e a distribuição será então caracterizada inteiramente em termos dos primeiros  $c$  momentos.*

Mais sobre o que fora exposto nesta seção pode ser obtido em ATHANASSOULIS e GAVRILIADIS [8].

## 2.3 Teoria Básica de Polinômios Ortogonais

Com base no que será visto posteriormente em termos de métodos numéricos empregados na solução da EBP, torna-se necessária uma breve discussão sobre o emprego e a importância dos polinômios ortogonais, uma vez que alguns métodos fazem uso destas funções tanto na aproximação de distribuições quanto no cálculo das integrais do termo fonte da EBP. Sendo assim, esta seção se destina a apresentação da teoria básica desta importante classe de polinômios, bem como destacar

as propriedades que tornam sua aplicação em problemas da ciência tão vantajosas. O leitor interessado em demonstrações, maior aprofundamento e maior rigor matemático neste contexto poderá consultar o livro de GAUTSCHI [10].

### 2.3.1 Conceitos Básicos

Seja  $\lambda(v)$  uma função não decrescente em  $\mathbb{R}$ , apresentando limites finitos quando  $v \rightarrow \infty$  e  $v \rightarrow -\infty$ . Considere também que a medida  $d\lambda$  tenha momentos finitos de todas as ordens, calculados segundo a Equação 2.19.

$$\mu_k = \mu_k(d\lambda) = \int_{\mathbb{R}} v^k d\lambda(v) = \int_{\mathbb{R}} v^k f(v) dv, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.19)$$

onde

$$\mu_0 > 0 \quad (2.20)$$

Considere também um espaço  $\mathbb{P}$  de polinômios reais. Para qualquer par de vetores  $u(v)$  e  $p(v)$  pertencentes ao espaço  $\mathbb{P}$ , pode-se definir os conceitos de produto interno e norma em relação a medida  $d\lambda(v)$ , segundo as Equações 2.21 e 2.22.

$$(u, p)_{d\lambda} = \int_{\mathbb{R}} u(v)p(v)d\lambda(v) \quad (2.21)$$

$$\|u\|_{d\lambda} = \left( \int_{\mathbb{R}} u^2(v)d\lambda(v) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.22)$$

O conceito de produto interno é muito importante, pois este, associado com a noção de norma, auxiliam na caracterização de espaços vetoriais. Sempre que o produto interno da Equação 2.21 for zero, os polinômios empregados em seu cálculo, isto é  $u(v)$  e  $p(v)$  são ditos **ortogonais**. A noção de produto interno tem relação com uma função peso, nome dado a distribuição aproximada em teoria de quadratura gaussiana, conforme indicado na Equação 2.21.

Quando se tem polinômios aonde o coeficiente do termo de maior ordem é unitário, isto é,  $\pi_m(v) = v^m + \dots$ , aonde  $m = 0, 1, \dots$ , e estes apresentam produto interno  $(\pi_m, \pi_l)_{d\lambda} = 0$ , para  $m \neq l, k, l = 0, 1, \dots$ , recebem a denominação **polinômios ortogonais mônicos**. Assim, considerando  $\mathbb{P}_n$  um subespaço de  $\mathbb{P}$  ( $\mathbb{P}_n \subset \mathbb{P}$ ) contendo todos os polinômios de grau menor ou igual a  $n$  e  $\pi_0(v), \pi_1(v), \dots, \pi_n(v)$  polinômios ortogonais mônicos, qualquer  $p \in \mathbb{P}_n$  pode ser escrito segundo a Equação 2.23 abaixo:

$$p = \sum_{i=0}^n c_i \pi_i \quad (2.23)$$

onde  $c_i$  são constantes reais. Isto significa dizer que qualquer vetor pertencente ao subespaço  $\mathbb{P}_n$  pode ser escrito como uma soma de múltiplos de polinômios orto-





$$\beta_0 = 1, \quad \beta_m = \frac{\Delta_{m+1}\Delta_{m-1}}{\Delta_m^2} \quad m = 1, 2, \dots \quad (2.29)$$

O que se pode constatar através dessa forma de cálculo dos coeficientes de recursão é que são necessários o cálculo de muitos determinantes. Além disso, quando se trabalha com polinômios de alta ordem, o custo computacional cresce muito, tornando esta forma de cálculos muito custosa.

Outra forma de calcular os coeficientes de recursão é através do Algoritmo Produto-Diferença (PDA) de GORDON [11]. Este tem como objetivo o computo de pesos e abscissas da quadratura gaussiana de  $N$  pontos empregada no cálculo de integrais. Este algoritmo emprega os  $2N$  primeiros momentos da função peso. A primeira etapa desta metodologia numérica consiste na montagem da matriz  $\mathbf{P}$ , cujas colunas são compostas dos momentos da e obedecem as seguintes regras (GAUTSCHI [10]):

- $P_{a,1} = \delta_{a1}, \quad a = 1, \dots, 2N + 1$
- $P_{a,2} = (-1)^{\alpha-1} \mu_{a-1}, \quad a = 1, \dots, 2N$
- $P_{a,b} = P_{1,b-1}P_{a+1,b-2} - P_{1,b-2}P_{a+1,b-1}, \quad a = 1, \dots, 2N + 2 - b \quad b = 3, \dots, 2N + 1$

De posse desses valores, os coeficientes  $\zeta_a$ , mostrados na Equação 2.30, necessários para o cálculo dos coeficientes de recursão, podem ser obtidos.

$$\zeta_a = \frac{P_{1,a+1}}{P_{1,a}P_{1,a-1}} \quad a = 2, \dots, 2N \quad (2.30)$$

Os coeficientes da matriz tridiagonal de Jacobi podem então ser obtidos através das relações  $\alpha_a = \zeta_{2a} + \zeta_{2a-1}$  para  $a = 1, \dots, N$  e  $\beta_a = -\sqrt{\zeta_{2a+1}\zeta_{2a}}$ , para  $a = 1, \dots, N - 1$ .

O PDA pode ser bastante eficiente, mas se torna bastante inaccurado quando  $N$  aumenta e isto depende dos valores dos momentos. O método também é falho quando  $\mu_1 = 0$ , como é o caso de distribuições com média 0.

Conforme visto, o cálculo dos coeficientes de recursão pode ser computacionalmente elevado, dependendo da situação. Quando, contudo, se trabalha com uma família de polinômios ortogonais associada a uma função peso conhecida, os coeficientes de recursão já são conhecidos. A Tabela 2.1 mostra as fórmulas para o computo dos coeficiente de recursão para algumas famílias de polinômios ortogonais conhecidas.

**Tabela 2.1:** Principais famílias de polinômios ortogonais.

$w(t)$	Domínio	Nome	$\alpha_k$	$\beta_0$	$\beta_k, k > 1$
1	$[-1,1]$	Legendre	0	2	$1/(4 - k^{-2})$
1	$[0,1]$	Legendre Modificado	0.5	1	$1/(4(4 - k^{-2}))$
$e^{-t^2}$	$(-\infty, \infty)$	Hermite	0	$\sqrt{\pi}$	$1/2k$
$e^{-t}$	$[0, \infty)$	Laguerre	$2k+1$	1	$k^2$
$t^\alpha e^{-t}, \alpha > -1$	$[0, \infty)$	Laguerre Generalizado	$2k + \alpha + 1$	$\Gamma(1 + \alpha)$	$k(k + \alpha)$

## 2.4 Métodos Numéricos

Na seção anterior foi exposta a formulação da EBP e ressaltada sua natureza integro-diferencial, além de sua dependência temporal e espacial. Devido a sua complexidade, esta só apresenta solução analítica para casos muito simples, muitas vezes não condizentes com os processos físicos reais presentes no escopo das engenharias em geral. Sendo assim, surge a necessidade de elaborar métodos numéricos que possibilitem obter a solução desta importante Equação. Abaixo, estão listadas algumas das características que estes métodos que pretendem resolver a EBP devem apresentar.

- Acurácia
- Robustez
- Resolver problemas multivariados (situações físicas presentes no cotidiano da engenharia)
- Gerar uma boa representação para a distribuição

Dentre as características citadas acima, destaca-se sobretudo a importância do desenvolvimento de um método que seja capaz de gerar uma boa representação da distribuição. Contudo, esta característica nem sempre foi um dos principais objetivos na resolução da EBP. Sendo assim, esta seção abordará os primeiros métodos desenvolvidos, mostrando como estes foram se aprimorando e dando origem aos métodos mais recentes.

A primeira classe de métodos a ser apresentada é caracterizada por empregar um conjunto finito de momentos de baixa ordem na solução da Equação de Balanço Populacional. Este método, que é pontapé inicial no desenvolvimento de métodos QBMM é o denominado Método dos Momentos (MOM), e, apesar de ser relativamente simples, foi considerado bastante promissor em sua época. Introduzido por HULBURT e KATZ [12] em 1964 este método consiste na resolução da formulação fraca da EBP, obtida através do operador de momentos, conforme mostra a Equação 2.31, onde  $R(f)$  representa a EBP:

$$\mu_k = \langle R(f), v^k \rangle = \int_0^{v_{max}} v^k R(f) dv, \quad k = 0, 1, 2 \dots N - 1 \quad (2.31)$$

sendo  $k$  truncado em um número  $N$  de momentos, que são valores que auxiliam no detalhamento de propriedades importantes da distribuição em questão. Um exemplo pode ser dado para uma distribuição monovariada, cuja variável interna é a massa das partículas: o momento zero ( $\mu_0$ ) fornece a densidade numérica da população (isto é, o número de partículas por unidade de volume), o primeiro momento ( $\mu_1$ ) representa a densidade mássica da população e, momentos fracionários como  $\mu_{1/3}$  e  $\mu_{2/3}$  fornecem, respectivamente, informações sobre diâmetro médio e área superficial média das partículas da população.

A base de toda a formulação do Método dos Momentos consiste em escrever cada uma das parcelas que compõem o termo fonte da EBP, isto é, as Equações 2.32 a 2.34 em função dos momentos da variável interna em questão,  $v$ . Nas Equações abaixo, não há variação espacial (parâmetros concentrados) e  $v$  é uma propriedade interna extensiva.

$$A_g(v, t) = \int_0^{v_{max}} a(v, v', t) f(v, t) f(v', t) dv' - \frac{1}{2} \int_0^v a(v - v', v', t) f(v - v', t) f(v', t) dv' \quad (2.32)$$

$$B_r(v, t) = b(v, t) f(v, t) - \int_v^{v_{max}} \vartheta(v', t) b(v', t) P(v|v') f(v', t) dv' \quad (2.33)$$

$$S(v, t) = \frac{\partial [g(v, t) f(v, t)]}{\partial v} \quad (2.34)$$

Essa formulação da origem a um conjunto de Equações diferenciais que descrevem a dinâmica desse conjunto de momentos, conforme mostra, para um momento genérico  $k$ , a Equação 2.35.

$$\frac{d\mu_k}{dt} = \langle v^k, S \rangle - \langle v^k, A_g \rangle - \langle v^k, B_r \rangle - \langle v^k, G \rangle \quad (2.35)$$

Apesar de parecer simples, esta abordagem de escrever o termo fonte da EBP em função de seus momentos gera um dos grandes problemas do método, decorrente da forma funcional que as frequências específicas de quebra e agregação,  $a$  e  $b$  assumem. Dependendo das variáveis citadas, o sistema de Equações para os momentos  $\mu_k$  pode vir a apresentar dependência de momentos de ordem superior, isto é,  $\mu_{k+1}$ . Tal questão é denominada **problema de fechamento** e é o grande ponto fraco do MOM. Algumas formas de fechamento podem ser empregadas na solução deste tipo de problema que impõe tão severa restrição ao emprego deste método, como é o

caso do uso do fechamento por interpolação (*Method of Moments with Interpolative Closure* - MoMIC), proposto por FRENKLACH e HARRIS [13]. Contudo, dentre as principais saídas para contornar o problema de fechamento, a mais promissora é a aproximação das integrais do termo fonte por quadraturas, que será visto adiante.

Dentre as principais vantagens do MOM, destaca-se a sua simplicidade e baixo custo computacional. Como ao invés de trabalhar com a distribuição em si o método emprega apenas com um conjunto de seus momentos de ordem inferior, não são necessárias muitas informações sobre a dita.

Buscando solucionar o problema de fechamento do método clássico dos momentos, MCGRAW [14] desenvolveu, em 1997, o chamado *Quadrature Method of Moments*, ou QMOM. Este método pertence a classe de métodos híbridos, pois além de sua metodologia numérica também fazer uso de momentos de baixa ordem (como no caso do MOM), ele também apresenta características do método das classes, que propõe a discretização da variável interna distribuída. Este método resolve o problema de fechamento para uma gama elevada de casos sem a necessidade de formulações matemáticas especiais e isto é feito escrevendo as integrais do termo fonte da EBP com o emprego de quadraturas Gaussianas. As Equações ficam com a seguinte forma:

$$\mu_k = \int_0^{v_{mx}} v^k f(x, v, t) dx = \sum_{i=1}^N \xi_i^k w_i \quad (2.36)$$

$$k = 0, 1, \dots, 2N - 1 \quad (2.37)$$

Isto equivale a seguinte aproximação para a  $f$ :

$$f(x, v, t) \approx \sum_{i=1}^N w_i \delta(v - \xi_i) \quad (2.38)$$

Na Equação 2.36, o valor  $N$  é o **número de pontos de quadratura** utilizados para aproximar a integral, partindo-se de um conjunto de  $2N$  momentos. As abscissas  $\xi_i$  são as abscissas da quadratura, distribuídas no domínio da variável interna, e  $w_i$  são os pesos de cada um destes pontos. Através da Equação 2.38, é possível notar que a  $f$  é representada por um somatório de funções delta de Dirac, ou seja, não é gerada uma aproximação funcional para a distribuição. Através da utilização da quadratura Gaussiana, as Equações 2.32, 2.33 assumem as formas descritas abaixo:

$$A_g(v, t) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [(\xi_i - \xi_j)^k - \xi_i^k - \xi_j^k] a(\xi_i, \xi_j) w_i w_j \quad (2.39)$$

$$B_r(v, t) = - \sum_{i=1}^N b(\xi_i) w_i [\vartheta(\xi_i) \phi_k(\xi_i) - \xi_i^k] \quad (2.40)$$

onde,

$$\phi_k(\xi_i) = \int_0^{\xi_i} v^k P(v|\xi_i) \quad (2.41)$$

então, pode-se escrever a Equação de transporte dos momentos segundo a Equação 2.42, abaixo:

$$\begin{aligned} \frac{d\mu_k}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [(\xi_i - \xi_j)^k - \xi_i^k - \xi_j^k] a(\xi_i, \xi_j) w_i w_j + \\ \sum_{i=1}^N b(\xi_i) w_i [\vartheta(\xi_i) \phi_k(\xi_i) - \xi_i^k] \end{aligned} \quad (2.42)$$

A obtenção dos pesos e abscissas através dos momentos da distribuição é feita através de um algoritmo de inversão, e o artigo utiliza o Algoritmo Produto-Diferença, ou *Product-Difference Algorithm*, PDA, desenvolvido por GORDON [11], que utiliza os momentos para montar uma matriz tridiagonal da qual se obtém os pesos e abscissas. Em seu trabalho, MCGRAW [14] compara seus resultados com os resultados de HULBURT e KATZ [12], analisando o problema monovariado de crescimento de aerossóis. Ficou constatado que seu método era capaz de acompanhar a solução do problema até o sexto primeiro momento, enquanto o MOM só conseguia fazer o mesmo acompanhamento até o segundo momento apenas.

O QMOM, apesar da sensível melhora em relação a seu predecessor, apresenta algumas desvantagens. Além de, conforme já citado, não gerar a aproximação funcional para a distribuição, a inversão dos momentos empregando o PDA é feita a cada passo de tempo, o que aumenta significativamente seu custo computacional. Além disso, quando maior o número de momentos empregados na aproximação das integrais, mais mal-condicionada se torna a matriz de momentos que se inverte para o computo dos pesos e abscissas das quadraturas. Este aumento no número de condicionamento da matriz, definido como a razão entre o maior e o menor de seus autovalores, é responsável por introduzir erros nos cálculos das quadraturas. O QMOM também perde sua eficiência em casos multivariados. O QMOM serviu como base para uma série de métodos baseados em momentos que se propõem a solucionar a EBP. Contudo, este trabalho se restringirá a revisão apenas de métodos que sugerem alguma forma de reconstruir a distribuição. A idéia apresentada pelo QMOM de fechamento das integrais do termo fonte por quadratura abriu portas para o desenvolvimento de métodos mais modernos, tanto em termos de robustez quanto de acurácia.

Um destes métodos foi introduzido por LAGE [15], denominado *Dual-Quadrature Method of Generalized Moments* sendo um método que propõe o emprego de uma dupla quadratura para resolver de forma acurada as integrais que compõem o termo fonte da EBP, empregando nestes cálculos os denominados **momentos generalizados**. O método busca também gerar uma aproximação funcional para a distribuição de probabilidade, mediante o uso de uma família de polinômios ortogonais, que serão representados, nesta seção, por  $\phi_i$ . Algumas Equações já apresentadas na seção de polinômios ortogonais serão lembradas e reescritas nesta nova notação.

Os momentos empregados no desenvolvimento desta metodologia recebem o nome generalizados pois deixam de ser calculados em termos de monômios da variável interna  $v$  (considerando o problema monovariado) e passam a ser calculados mediante o emprego de outras funções teste, como, por exemplo, bases de polinômios ortogonais. Este último é o caso do DuQMoGeM de LAGE [15]. A forma com a qual se gera os momentos modificados de ordem  $k$ ,  $\mu_k^\phi$ , é dada segundo a Equação 2.43.

$$\mu_k^\phi = \int_0^{v_{max}} \phi_k(v) f(v, t) dv \quad (2.43)$$

É importante notar que, quando  $\phi_k(v) = v^k$ ,  $\mu_k^\phi = \mu_k$ . A aplicação do operador de momentos generalizados à EBP gera um conjunto de Equações que descrevem a dinâmica destes momentos.

Conforme visto na seção sobre polinômios ortogonais, a propriedade de ortogonalidade entre os polinômios empregados neste método é caracterizada através da Equação 2.44, para a família de polinômios  $\phi_i$  em função de uma medida  $d\bar{\lambda}(v)$  positiva contínua equivalente a  $\omega(v)dv$ . Nesta Equação,  $\omega(v)$  é a **função peso**, associada a família específica de polinômios ortogonais. Vale lembrar que a ortogonalidade é definida em termos do **produto interno** entre dois polinômios, em relação a medida citada, quando este conceito é generalizado para um espaço de funções.

$$(\phi_i, \phi_j)_{d\bar{\lambda}(v)} \equiv \int_0^{v_{max}} \phi_i(v) \phi_j(v) \omega(v) dv = \delta_{ij} \|\phi_i\|_{d\bar{\lambda}(v)}^2 \quad (2.44)$$

Se  $\phi_i = \phi_j$ , define-se então norma de um polinômio  $\phi_i$  como dada pela Equação 2.45.

$$\|\phi_i\|_{d\bar{\lambda}} = \sqrt{(\phi_i, \phi_i)_{d\bar{\lambda}}} \quad (2.45)$$

Uma propriedade interessante e que justifica o emprego de polinômios ortogonais é que existe entre eles uma relação de recorrência. Na Equação acima,  $\delta_{ij}$  é o delta de Kronecker, o que indica que uma vez que  $i \neq j$ , o valor assumido pela integral é 0. Quando o coeficiente do primeiro termo do polinômio ortogonal é 1, este recebe o nome de polinômio mônico. A aproximação funcional empregada para a distribuição

neste método é dada segundo a Equação 2.46 abaixo.

$$f(v, t) = \omega(v) \sum_{i=0}^{\infty} c_i \phi_i(v) \implies p_{2n-1}(v, t) \approx \omega(v) \sum_{i=0}^{2n-1} c_i \phi_i(v, t) \quad (2.46)$$

A Equação acima também ressalta que a ordem da aproximação funcional empregando quadraturas de Gauss-Christoffel é de  $2n - 1$ , onde  $n$  é o número de pontos de quadratura. O artigo busca esclarecer que as medidas a serem usadas nas equações 2.44 e 2.46 são as que apresentam a função peso  $\omega(v)$  associada que melhor aproxima  $f(v, t)$ . Destaca ainda a importância de se conhecer a medida  $\omega(v)dv$  uma vez que isto assegura o computo da quadratura gaussiana.

Dependendo do domínio no qual a variável  $v$  e, portanto,  $f(v, t)$  estão definidos, escolhas apropriadas para a função peso incluem:

- $\omega(v) = 1$ ,  $v \in [0, v_{max}]$ , associada aos polinômios de Legendre, modificados para o intervalo associado.
- $\omega(v) = v^a e^{-v}$ ,  $v \in [0, \infty)$ , associada aos polinômios de Laguerre generalizados.
- $\omega(v) = e^{-a^2 x^2}$ ,  $x \in (-\infty, \infty)$ , associada aos polinômios de Hermite.

Na Equação 2.46, os coeficientes de ponderação da aproximação  $c_i$  são dados segundo a Equação 2.47 abaixo.

$$c_i = \frac{(\phi_i, f)_{dv}}{\|\phi_i\|^2} = \frac{1}{\|\phi_i\|_{d\bar{\lambda}(v)}^2} \int_0^{v_{max}} \phi_i(v) f(v) dv = \frac{\mu_i^\phi}{\|\phi_i\|_{d\bar{\lambda}(v)}^2} \quad (2.47)$$

A análise da Equação 2.47 ressalta a relação entre a constante  $c_i$  e o momento generalizado associado a um polinômio de grau  $i$ ,  $\mu_i^\phi$ .

A EBP é então resolvida substituindo-se a aproximação gerada para a função dada na Equação 2.46 operada com momentos generalizados.

Visando também uma aproximação da distribuição de partida e se aproveitando da idéia de LAGE [15] de empregar a uma dupla quadratura, YUAN e FOX [16] propuseram o emprego de distribuições especiais para gerar a aproximação. Este método será melhor abordado e detalhado no próximo capítulo, uma vez que serviu de base para o desenvolvimento deste trabalho.

Um método cujo enfoque principal é a geração de uma aproximação para uma distribuição, destaca-se o KDEM, *Kernel Density Element Method* de ATHANASSOULIS e GAVRILIADIS [8], que busca gerar esta aproximação para uma distribuição normalizada em domínio finito  $[0,1]$  tendo como base uma superposição de distribuições do tipo beta. A aproximação é dada segundo a Equação 2.48 abaixo.

$$f(x, \mathbf{p}_I) = \sum_{i=1}^I p_i K(x; x_i, h) \quad (2.48)$$

Na Equação 2.48 acima,  $K$  é a KDF beta, posicionadas nos pontos  $x_i$  e com largura de banda  $h$ . Na mesma Equação,  $p_i$  são coeficientes de ponderação de cada KDF e satisfazem a condição dada abaixo, na Equação 2.49.

$$\sum_{i=1}^I p_i = 1 \quad p_i \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, I \quad (2.49)$$

Utilizando esta forma de aproximação para a distribuição desconhecida, o problema pode ser formulado. A partir de um conjunto de  $N$  momentos  $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_N) \in M^{(N)}$ , deve-se obter um vetor de coeficientes de ponderação  $\boldsymbol{p} = (p_1, p_2, \dots, p_I)$  tal que seja minimizada a norma  $\ell^2$  entre os momentos da distribuição que se deseja aproximar e os momentos ponderados da KDF beta, segundo:

$$\|\mu_n - \sum_{i=1}^I B_{n,i} p_i\|_{\ell^2} = \min \quad (2.50)$$

Na Equação 2.50,  $B_{n,i}$  são os momentos das KDFs, dados segundo:

$$B_{n,i} = \int_0^1 x^n K(x; x_i, h) dx \quad (2.51)$$

Os autores ressaltam também a importância da restrição  $\boldsymbol{\mu} \in M^{(N)}$ , afirmando que deve ser assegurado que o vetor de momentos pertença ao espaço de momentos de dimensão  $N$ . No artigo, os autores propõem a utilização de um filtro recursivo para atingir este objetivo, no qual os momentos de alta ordem sejam modificados para que obedeçam a restrição citada.

A escolha da função objetivo a ser minimizada também merece destaque, uma vez que o conceito de norma está atrelado a noção geométrica de comprimento. Dito isto, fica claro que se a dita função objetivo assumisse hipoteticamente o valor zero, os momentos da distribuição que se deseja aproximar seriam idênticos aos momentos ponderados das KDFs beta empregados para gerar aproximação.

Ainda no contexto da problemática envolvida na reconstrução de uma distribuição a partir de um conjunto finito de seus momentos, destaca-se o método da máxima entropia e o artigo de LAWRENCE e PAPANICOLAU [17]. O método propõe que a entropia correspondente a uma distribuição  $f(x)$  seja maximizada, submetida a restrição de que os  $N+1$  primeiros momentos da aproximação sejam iguais aos momentos originais (LEBAZ *et al.* [18]).

O método busca maximizar o funcional da entropia de Shannon  $H(f)$ , do contexto de Teoria da Informação, definido segundo a Equação 2.52:

$$H[f] = - \int_0^{\infty} f(x) \ln f(x) dx \quad (2.52)$$

Na Equação acima,  $f(x)$  é distribuição. A aproximação proposta para a distribuição neste método é dada segundo a Equação 2.53 abaixo (LEBAZ *et al.* [18]), submetida às restrições impostas pela Equação 2.54.

$$f_M(x) = \exp \left[ - \sum_{j=0}^N \xi_j x^j \right] \quad (2.53)$$

Na Equação acima,  $\xi_j$  são multiplicadores de Lagrange.

O problema formulado é restrito às condições impostas na Equação 2.54:

$$\mu_i = \int x^i f_M(x) dx, \quad n = 0, 1, 2, \dots, N \quad (2.54)$$

Os multiplicadores de Lagrange são obtidos através da solução de um sistema de  $N + 1$  equações não lineares, dados segundo a Equação 2.55 abaixo.

$$H[f] = - \int_a^b [f(x) \ln f(x) - f(x)] dx + \sum_{j=0}^N \xi_j \left( \int_a^b x^j f(x) dx - \mu_j \right) \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (2.55)$$

Geralmente, métodos iterativos são empregados na solução da Equação 2.55 (LAWRENCE e PAPANICOLAU [17]). Neste método, a distribuição reconstruída é não-negativa.

# Capítulo 3

## Metodologia

A solução do problema de momentos truncado, tanto em domínio semi-infinito quanto em finito, não é simples. A grande dificuldade, conforme mostrado nas seções anteriores, reside no fato de que diversas distribuições diferentes podem apresentar o mesmo conjunto de momentos quando este é finito, ou seja, quando é truncado em uma certa quantidade de momentos.

O problema de reconstruir a distribuição pode ser resolvido de diferentes maneiras, como fora visto na seção de métodos numéricos. O DuQMöGeM de LAGE [15], por exemplo, utiliza uma família de polinômios ortogonais. Uma outra forma consiste em aproximar a distribuição que não se conhece por uma outra distribuição, que seja conhecida, que é o que foi proposto neste trabalho. A princípio, qualquer distribuição pode ser empregada. A aproximação ocorre através de um ajuste adequado dos parâmetros destas distribuições. Neste trabalho esse ajuste foi feito através de uma rotina de otimização global. O critério para boa aproximação tem como base o erro relativo entre os momentos da distribuição de partida e os momentos da distribuição aproximante. Para aproximar as distribuições serão utilizadas as KDFs Beta e Gama. O tópico seguinte tem o objetivo de abordar as propriedades que definem uma KDF, bem como apontar os principais motivos pelos quais estas distribuições especiais serão empregadas na metodologia deste trabalho.

### 3.0.1 Teoria de KDFs

Inicialmente, é importante que se defina e conheça os motivos pelos quais as KDFs são tão interessantes de serem empregadas na reconstrução de distribuições. Para tal, considera-se uma KDF qualquer denotada por  $K(x; \xi_\alpha, \sigma)$ . Esta é caracterizada através das propriedades enumeradas abaixo (ATHANASSOULIS e GAVRILIADIS [8]). Na dependência de  $K$ ,  $\xi_\alpha$  é o ponto do domínio no qual é aplicada a KDF e  $\sigma$  é a largura de banda desta. É importante ressaltar que não se pressupõe que a KDF seja simétrica.

- $K(x; \xi_\alpha, \sigma)$  é uma função contínua definida em um domínio  $D_K = A \times A \times$

$[0, \infty)$ . O intervalo  $A$  empregado nas dimensões de  $D_K$  corresponde a uma determinada região do domínio ou ao domínio inteiro no qual está definida a função a ser reconstruída,  $f(x)$ .

- $K(x; \xi_\alpha, \sigma) \geq 0, \quad \forall (x; \xi_\alpha, \sigma) | (x; \xi_\alpha, \sigma) \in D_K$ , o que equivale dizer que  $K$  é uma função positiva-definida.
- $\int_A K(x; \xi_\alpha, \sigma) = 1, \quad \forall (x, \sigma) \in A \times [0, \infty)$
- Para  $\delta > 0$ ,  $\lim_{\sigma \rightarrow 0} \int_{|x - \xi_\alpha| > \delta} K(x; \xi_\alpha, \sigma) d\xi_\alpha = 1, \quad \xi_\alpha \in A$

A análise das propriedades de  $K$  permite concluir que esta também se trata de uma distribuição. É interessante, porém intuitivo, observar que quando a largura de banda da KDF em questão tende a zero, a KDF tende à uma distribuição do tipo delta de Dirac, conforme enunciado acima.

- $\lim_{\sigma \rightarrow 0} K(x; \xi_\alpha, \sigma) = \delta[x - \xi_\alpha]$ ,

Por conta das propriedades desta última, tem-se que:

- $\lim_{\sigma \rightarrow 0} \int_A f(\xi_\alpha) K(x; \xi_\alpha, \sigma) d\xi_\alpha = f(x)$

É importante notar que as KDFs empregadas no desenvolvimento deste trabalho apresentam os mesmos domínios das funções densidade que se deseja reconstruir. Alguns métodos numéricos utilizam em seu desenvolvimento metodológico essas distribuições especiais, conforme já citado, como por exemplo o KDEM e o EQMOM.

### 3.0.2 EQMOM

O EQMOM é um método que, além de buscar resolver de forma acurada as integrais que constituem o termo fonte da EBP, que foram vistos nas Equações 2.32, 2.33 e 2.34, propõe a reconstrução da distribuição empregando uma soma ponderada de funções-peso não negativas, segundo a Equação 3.1.

$$p_n(x) = \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha \delta_\sigma(x, \xi_\alpha) \quad (3.1)$$

Na Equação acima,  $p_n(x)$  é a aproximação a ser gerada,  $w_\alpha$  são os pesos ou coeficientes de ponderação e  $\delta_\sigma(x, \xi_\alpha)$  representa a KDF, determinada pela largura de banda,  $\sigma$ , e que será escolhida dependendo do domínio em questão e aplicada em  $\xi_\alpha$ , ponto de colocação da KDF, denominado abscissa. Ainda,  $n$  é o número de KDFs superpostas para gerar a aproximação da distribuição, ou seja, é uma medida do

grau com que se deseja realizar a aproximação. Conforme já citado, é importante observar o exposto na Equação 3.2

$$\lim_{\sigma \rightarrow 0} \delta_\sigma(x, \xi_\alpha) = \delta[x - \xi_\alpha], \quad (3.2)$$

o que significa que quando a largura de banda da KDF for a zero, o EQMOM se reduz ao QMOM, por questões de consistência. Por esse motivo, este método recebe o nome de *Extended Quadrature Method of Moments* ou *Extended QMOM*. Apesar das principais características do EQMOM já terem sido devidamente apresentadas, cabe uma descrição numérica mais detalhada deste importante método, uma vez que este serviu de base para o desenvolvimento deste trabalho. As KDFs empregadas no método são mais discutidas a seguir, bem como suas propriedades. O EQMOM faz uso de  $2n + 1$  momentos para o cálculo dos  $n$  pesos,  $n$  abscissas e o  $\sigma$  empregados na reconstrução da distribuição. O momento extra ( $m_{2n}$ ) é utilizado para o cálculo de largura de banda, através de um processo de otimização, o que será visto mais adiante.

A KDF beta, empregada pelo EQMOM quando se quer reconstruir a distribuição em domínio finito, isto é,  $x \in [0, 1]$  consiste em uma família de distribuições contínuas. Cada distribuição é caracterizada por dois parâmetros positivos de forma,  $\lambda_\alpha$  e  $\mu_\alpha$ , segundo a Equação (3.3).

$$\delta_\sigma(\xi, \xi_\alpha) = \frac{\xi^{\lambda_\alpha - 1} (1 - \xi)^{\mu_\alpha - 1}}{B(\lambda_\alpha, \mu_\alpha)} \quad (3.3)$$

Na equação acima,  $B(\lambda_\alpha, \mu_\alpha)$  é a função beta, empregada com a finalidade de gerar uma constante de normalização, assegurando que o valor da integração da distribuição no domínio seja unitário. A função beta consiste apenas em uma razão de funções gama, na forma mostrada na Equação (3.4).

$$B(\lambda_\alpha, \mu_\alpha) = \frac{\Gamma(\lambda_\alpha + \mu_\alpha)}{\Gamma(\lambda_\alpha)\Gamma(\mu_\alpha)} \quad (3.4)$$

Para a KDF beta, os parâmetros assumem as formas propostas por YUAN e FOX [16], no artigo que descreve o EQMOM e segundo as Equações (3.5) e (3.6).

$$\lambda_\alpha = \frac{\xi_\alpha}{\sigma} \quad (3.5)$$

$$\mu_\alpha = \frac{(1 - \xi_\alpha)}{\sigma} \quad (3.6)$$

No artigo [16], os momentos da beta KDF são dados em função dos parâmetros do EQMOM segundo a Equação 3.7.

$$m_k^{an} = \frac{\xi_\alpha + (k - 1)\sigma}{1 + (k - 1)\sigma} m_{k-1}^{(\alpha)}, \quad k > 0 \quad (3.7)$$

Quando  $k = 0$ ,  $m_0^{(\alpha)} = 1$ . É possível escrever os momentos inteiros da beta KDF segundo a Equação 3.32,

$$m_k^{num} = \sum_{\alpha=1}^n w_{\alpha} G_k(\xi_{\alpha}, \sigma) \quad (3.8)$$

onde  $G_k$  é dado segundo a Equação 3.9.

$$G_k = \begin{cases} 1, & k = 0 \\ \prod_{i=0}^{k-1} \frac{\xi_{\alpha} + i\sigma}{1 + i\sigma}, & k \geq 1 \end{cases} \quad (3.9)$$

A análise do produtório da Equação 3.9 permite concluir que  $G_k$  será um polinômio em  $\xi_{\alpha}$  de ordem  $k$ . Conhecendo a relação dada segundo a Equação 3.10,

$$m_k^* = \sum_{\alpha=1}^n w_{\alpha} \xi_{\alpha}^k \quad (3.10)$$

o sistema de Equações formado para os momentos  $m_k$  em função dos momentos  $m_k^*$  para  $k$  até quarta ordem fica na forma da Equação 3.11.

$$\begin{aligned} m_0 &= m_0^* \\ m_1 &= m_1^* \\ m_2 &= \frac{1}{1 + \sigma} (m_2^* + \sigma m_1^*) \\ m_3 &= \frac{1}{(1 + 2\sigma)(1 + \sigma)} m_3^* + 3\sigma m_2^* + 2\sigma^2 m_1^* \\ m_4 &= \frac{1}{(1 + 3\sigma)(1 + 2\sigma)(1 + \sigma)} m_4^* + 6\sigma m_3^* + 11\sigma^2 m_2^* + 6\sigma^3 m_1^* \end{aligned} \quad (3.11)$$

O sistema em questão pode ser escrito na forma matricial como em  $\mathbf{m} = \mathbf{A}(\sigma)\mathbf{m}^*$ . Desta forma, é possível destacar a dependência da matriz triangular inferior  $\mathbf{A}$  com o parâmetro  $\sigma$ . Conforme já citado, o momento de ordem  $2n$ , que no caso do sistema acima equivale ao  $m_4$  é utilizado para montar uma Equação do tipo 3.12.

$$J_n(\sigma) = m_{2n} - \gamma_{2n} m_{2n}^* - \gamma_{2n-1} m_{2n-1}^* - \dots \quad (3.12)$$

Então, um algoritmo de otimização é utilizado para encontrar o menor valor de  $\sigma$  para o qual  $J_n(\sigma)$ , assuma um valor pequeno, podendo este ser zero.

De forma semelhante a KDF beta, a KDF gama também consiste em uma família de distribuições contínuas, definidas em domínio semi-infinito, isto é,  $x \in [0, \infty)$ . Cada distribuição pode ser caracterizada por dois parâmetros,  $\lambda_{\alpha}$  denominado parâmetro de forma e  $\sigma$ , denominado parâmetro de taxa, e apresentam a forma mostrada na Equação 3.13. O parâmetro  $\lambda_{\alpha}$  apresenta a mesma definição que a observada na Equação (3.5). Finalmente, pode-se reescrever a KDF gama em termos dos novos parâmetros, segundo:

$$\delta_\sigma(\xi, \xi_\alpha) = \frac{\xi^{\lambda_\alpha - 1} e^{-\xi/\sigma}}{\Gamma(\lambda_\alpha) \sigma^{\lambda_\alpha}} \quad (3.13)$$

Os momentos  $m_k^{(\alpha)}$  para a KDF gama são dados segundo a Equação 3.14.

$$m_k^{an} = \frac{\Gamma(\lambda_\alpha + k)}{\Gamma(\lambda_\alpha)} \left( \frac{\xi_\alpha}{\lambda_\alpha} \right)^k \quad (3.14)$$

De forma semelhante ao caso da KDF beta, os momentos da gama também podem ser escritos na forma da Equação 3.32. O polinômio  $G_k$  fica na forma dada por 3.15.

$$G_k = \begin{cases} 1, k = 0 \\ \prod_{i=0}^{k-1} (\xi_\alpha + i\sigma), k \geq 1 \end{cases} \quad (3.15)$$

A Equação 3.15 auxilia na montagem do sistema dado abaixo, para k até ordem 4.

$$\begin{aligned} m_0 &= m_0^* \\ m_1 &= m_1^* \\ m_2 &= m_2^* + \sigma m_1^* \\ m_3 &= m_3^* + 3\sigma m_2^* + 2\sigma^2 m_1^* \\ m_4 &= m_4^* + 6\sigma m_3^* + 11\sigma^2 m_2^* + 6\sigma^3 m_1^* \end{aligned} \quad (3.16)$$

Este sistema de Equações também pode ser rearranjado na forma  $\mathbf{m} = \mathbf{A}(\sigma)\mathbf{m}^*$ . Novamente, o momento de ordem  $2n$  é utilizado para a montagem da Equação para  $J_n(\sigma)$  e o mesmo procedimento de encontrar a menor raiz para esta Equação ocorre na sequência.

O procedimento numérico para o computo da primeira quadratura do EQMOM consiste nas seguintes etapas:

- Dados  $\mathbf{m} = \mathbf{A}(\sigma)\mathbf{m}^*$ , e um valor estimado para  $\sigma$ , calculam-se os valores de  $m_k^*$  para  $k = 0, 1, \dots, 2n - 1$ .
- Realiza-se a inversão do vetor  $\mathbf{m}^*$  com algoritmo adaptativo de Wheeler, para obtenção dos  $n$  pesos e das  $n$  abscissas.
- Calcula-se  $m_{2n}^*$  com os pesos e abscissas da etapa anterior.
- Calcula-se o valor de  $\sigma$ , buscando-se a menor raiz para  $J_n(\sigma)$ .
- Caso  $J_n(\sigma) \neq 0$ , estima-se um novo valor para  $\sigma$  e se itera até a convergência.

É importante ressaltar que a busca da menor raiz de  $J_n(\sigma)$ , ou seja, o menor valor de  $\sigma$  para o qual  $J_n(\sigma)$  assume valor zero, não é condição suficiente para a

boa condução dos cálculos. De acordo com a teoria apresentada na seção 2.2.4, um conjunto de momentos é consistente ou realizável se os determinantes de Hankel sejam não-negativos. A realizabilidade implica na obediência das condições dadas segundo as equações a seguir.

$$w_\alpha > 0 \quad (3.17)$$

A Equação 3.18, abaixo, se refere ao domínio da KDF gama.

$$\xi_\alpha \in [0, \infty) \quad (3.18)$$

A Equação 3.19, abaixo, se refere ao domínio da KDF beta.

$$\xi_\alpha \in [0, 1] \quad (3.19)$$

Estas condições implicam na positividade dos valores dos pesos e na inclusão das abscissas no domínio da KDF utilizada na aproximação da distribuição em questão. Quando se conclui o cálculo da primeira quadratura, os parâmetros que compõem a KDF já se encontram determinados.

### 3.0.3 A Metodologia Proposta

A metodologia desenvolvida no decorrer deste trabalho emprega apenas a primeira quadratura do EQMOM na geração dos parâmetros numéricos: os  $n$  pesos  $w_\alpha$ , as  $n$  abscissas  $\xi_\alpha$  e o único  $\sigma$ . O método desenvolvido neste trabalho propõe valores de  $\sigma$  diferentes para cada ponto de colocação, ao contrário do EQMOM, em que o valor de  $\sigma$  é o mesmo para todas as KDFs. Como a quadratura associada à KDF não foi computada, foi utilizado o nome ponto de colocação ao invés de ponto de quadratura. O método empregará  $3n$  momentos para o cálculo de  $n$  pesos  $w_\alpha$ ,  $n$  abscissas  $\xi_\alpha$  e  $n$   $\sigma_\alpha$ . A idéia que motiva o uso de mais momentos e de valores de  $\sigma_\alpha$  diferentes para cada KDF é gerar uma melhor representação para as distribuições, incluindo as mais complexas, como é o caso de distribuições multimodais.

Quando as Equações 3.5 e 3.6 são generalizadas em termos dos diferentes  $\sigma$ , ficam na forma das Equações 3.20 e 3.21.

$$\lambda_\alpha = \frac{\xi_\alpha}{\sigma_\alpha} \quad (3.20)$$

$$\mu_\alpha = \frac{(1 - \xi_\alpha)}{\sigma_\alpha} \quad (3.21)$$

Sendo assim, a KDF beta escrita em termos dos parâmetros envolvendo os diferentes  $\sigma_\alpha$  assume a forma mostrada na Equação 3.22:

$$\delta_{\sigma_\alpha}(\xi, \xi_\alpha) = \frac{\xi^{\lambda_\alpha-1}(1-\xi)^{\mu_\alpha-1}}{B(\lambda_\alpha, \mu_\alpha)} \quad (3.22)$$

A KDF gama assume a forma dada na Equação 3.23, abaixo:

$$\delta_{\sigma_\alpha}(\xi, \xi_\alpha) = \frac{\xi^{\lambda_\alpha-1}e^{-\xi/\sigma_\alpha}}{\Gamma(\lambda_\alpha)\sigma_\alpha^{\lambda_\alpha}} \quad (3.23)$$

Além disso, o cálculo dos momentos numéricos, ou seja, dos momentos reconstruídos, será dado segundo a Equação 3.24, bastante semelhante a Equação 3.32.

$$m_{k_{num}}^\alpha = \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha G_k(\xi_\alpha, \sigma_\alpha) \quad (3.24)$$

Para a KDF beta, as generalizações para vários  $\sigma_\alpha$  leva às Equações 3.25 e 3.26.

$$G_k = \begin{cases} 1, k = 0 \\ \prod_{i=0}^{k-1} \frac{\xi_\alpha + i\sigma_\alpha}{1+i\sigma_\alpha}, k \geq 1 \end{cases} \quad (3.25)$$

$$m_k^{an} = \frac{\xi_\alpha + (k-1)\sigma_\alpha}{1 + (k-1)\sigma_\alpha} m_{k-1}^{(\alpha)}, k > 0 \quad (3.26)$$

Para a KDF gama, a mesma generalização é feita, como mostram as Equações 3.27 e 3.28.

$$G_k = \begin{cases} 1, k = 0 \\ \prod_{i=0}^{k-1} (\xi_\alpha + i\sigma_\alpha), k \geq 1 \end{cases} \quad (3.27)$$

$$m_k^{an} = \frac{\Gamma(\lambda_\alpha + k)}{\Gamma(\lambda_\alpha)} \left( \frac{\xi_\alpha}{\lambda_\alpha} \right)^k \quad (3.28)$$

Uma vez exposta a característica chave do método proposto, pode-se entender melhor seu funcionamento. Antes de prosseguir com a descrição da metodologia em questão, deve-se esclarecer que será resolvido um problema cuja formulação é dada segundo a Equação 3.29.

$$f(\xi) = \sum_{j=1}^m w_j \delta_{\sigma_j}(\xi, \xi_j) \approx \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha \delta_{\sigma_\alpha}(\xi, \xi_\alpha) \quad (3.29)$$

Na Equação acima, o lado esquerdo corresponde ao somatório das  $m$  distribuições utilizadas para gerar a distribuição a ser aproximada (aqui denominada **distribuição de partida**) e o lado direito representa a sua aproximação, usando  $n$  de KDFs. Na geração das funções a serem aproximadas (lado esquerdo), empregaram-se combinações das próprias KDFs beta e gama, além de distribuições como a Kumaraswamy definida em domínio finito  $[0,1]$  e a Chi e Exponencial, definidas em domínio semi-infinito  $[0,\infty)$ . As fórmulas e gráficos de curvas características destas distribuições

estão comentadas no Apêndice A. Para gerar a aproximação (lado direito) foram empregadas apenas as KDFs beta e gama.

Dependendo da função de partida escolhida para gerar o conjunto de  $3n$  momentos iniciais, os parâmetros alimentados no programa são diferentes. Isto ocorre por um motivo bastante simples.

Dependendo da distribuição de partida, os valores de entrada variam. Quando esta envolve KDFs beta ou gama, os valores de entrada são, respectivamente, os pesos de cada uma das  $m$  KDFs empregadas, as abscissas e as larguras de banda. Com estes valores, se obtém os parâmetros das KDFs:  $\lambda_\alpha$  e  $\sigma_\alpha$  no caso da gama e  $m_\alpha$  e  $\lambda_\alpha$  no caso da beta. No caso da distribuição de partida ser uma combinação de distribuições Chi, Exponencial ou Kumaraswamy, além dos pesos de cada uma das  $m$  distribuições empregadas, os valores de entrada são os próprios parâmetros destas distribuições, uma vez que não existe nenhuma relação entre abscissas e larguras de banda com estes.

A Tabela 3.1 procura esclarecer o que fora exposto acima.

**Tabela 3.1:** Valores de entrada de acordo com a distribuição de partida.

Distribuições de Partida	Valores de Partida
Beta	$w_j, \xi_j, \sigma_j$
Gama	$w_j, \xi_j, \sigma_j$
Kumaraswamy	$w_j, a, b$
Chi	$w_j, c$
Exponencial	$w_j, l$

A Tabela 3.1 acima permite mostrar que, para casos em que a distribuição de partida for constituída por superposição de betas ou gamas, é necessário o cálculo dos parâmetros  $\mu_\alpha$  e  $\lambda_\alpha$  a partir das abscissas e larguras de banda. Quando se trabalha com as demais distribuições na geração da distribuição de partida isto não ocorre, uma vez que as variáveis de entrada já são os próprios parâmetros destas.

O vetor de momentos analíticos da distribuição de partida, ou seja, a distribuição que se deseja aproximar, consiste na soma ponderada por pesos das  $m$  distribuições. Em termos de cálculo e para melhor visualização, isto foi feito mediante a alocação dos  $3n$  momentos de cada uma das  $m$  distribuições a serem combinadas em uma matriz, multiplicada pelo peso dado a cada uma das distribuições, conforme mostra a Equação 3.30.

$$\mathbf{m}_k = \begin{bmatrix} m_0^{(1)} & m_0^{(2)} & \dots & m_0^{(m)} \\ m_1^{(1)} & m_1^{(2)} & \dots & m_1^{(m)} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ m_k^{(1)} & m_k^{(2)} & \dots & m_k^{(m)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ \vdots \\ w_m \end{bmatrix} \quad (3.30)$$

A matriz apresenta  $m$  colunas, uma para cada distribuição que se deseja combinar e  $k = 3n$  linhas, uma para cada momento. Conhecendo o vetor de momentos analíticos e sabendo que os momentos numéricos são dados pela Equação 3.24, pode-se formular a função objetivo que será minimizada na presente metodologia. Esta última é dada pelo somatório dos erros relativos entre os momentos analíticos e numéricos, como mostra a Equação 3.31.

$$f_{ob} = \sum_{i=1}^{3n} \sqrt{\left( \frac{p_i}{3n} \frac{m_i^{an} - m_i^{num}}{m_i^{an}} \right)^2} \quad (3.31)$$

Na equação acima,  $\mathbf{p}$  é um vetor de ponderação de momentos, cuja finalidade é penalizar os momentos de maior ordem, em situações aonde estes se tornem muito grandes em magnitude. Este vetor é obtido segundo a Equação 3.32 abaixo.

$$p_i = e^{-ci} \quad (3.32)$$

Na equação acima,  $c$  é uma constante que, quando nula, torna o vetor  $\mathbf{p}$  unitário. Cabe ressaltar que, como estimativa inicial de parâmetros numéricos, o programa não utiliza apenas a primeira quadratura do EQMOM. Uma outra estimativa inicial foi proposta, que consiste em causar uma perturbação randômica de módulo entre 0 e 20% nos parâmetros numéricos. Esta estimativa inicial só foi utilizada no caso em que a distribuição de partida era uma combinação de KDFs beta e gama. Como o coração do método consiste em passar pesos, abscissas e larguras de banda para uma rotina de otimização não-linear multiparamétrica, o valor da perturbação imposta não pode modificar radicalmente as variáveis do problema, uma vez que este pode convergir para um valor indesejado.

O processo de otimização foi feito utilizando o pacote de otimização não-linear denominado NLOpt, "*Non Linear Optimization*". Este pacote conta com diversos métodos de otimização não-linear multiparamétrica, tanto baseados no gradiente da função objetivo quanto outros que dispensam o uso das derivadas da função objetivo (GN - *Global Not derivative*). O algoritmo de otimização global empregado foi o CRS-LM, do inglês "*Controlled Random Search with Local Mutation*". Este método permite o que se definam restrições nos limites de busca, tanto inferiores quando superiores além de permitir ao usuário fornecer o tamanho inicial da população de partículas,  $P$ , que varrerá o domínio na busca de um ótimo. O tamanho dessa população de partículas deve levar em conta a quantidade  $N$  de parâmetros a serem otimizados. Esses pontos são devidamente distribuídos no espaço no qual a função objetivo está definida. Esta, então, evolui segundo uma regra heurística para tentar localizar um novo mínimo, e assim o procedimento se repete a cada iteração, até atingir um dos critérios de saída dos cálculos (KAELO e ALI [19]).

Após a otimização global, foi proposta a utilização de um algoritmo de otimização local com o objetivo de refinar a solução obtida com o CRS. O algoritmo empregado foi o BOBYQA, que além de permitir a definição das restrições, dispensa igualmente o emprego das derivadas da função objetivo.

Os critérios de parada para a otimização global diferiram levemente dependendo do caso. Em geral, trabalhou-se com as tolerâncias absoluta e relativa na ordem de  $10^{-15}$  na função objetivo. Já nos parâmetros, as tolerâncias absoluta e relativa variaram de acordo com o caso, assumindo valores entre  $10^{-9}$  e  $10^{-7}$ , dependendo da quantidade de parâmetros a serem otimizados. Evidentemente, a população também variou, uma vez que quanto maior o número de parâmetros, mais partículas devem ser distribuídas no domínio para o compute do valor ótimo adequado.

Finalmente, cabe a descrição em etapas da metodologia desenvolvida, em etapas. Sendo assim, para os parâmetros alimentados adequados para cada caso como descrito na Tabela 4.3, segue-se:

1. Se a distribuição de partida for gerada por uma superposição de KDFs gama ou beta, calcula-se os parâmetros destas KDFs, com auxílio das Equações 3.20 ou 3.21, partindo-se das abscissas e larguras de banda de entrada. Caso a distribuição de partida não seja beta ou gama, já são alimentados os parâmetros no programa. Caso a estimativa inicial (KDFs gama e beta, apenas) seja a perturbação randômica de 0 a 20% esta é feita em seguida nas variáveis de entrada.
2. Calculam-se os momentos analíticos  $m_k$  da distribuição de partida, conforme mencionado, através da matriz 3.30.
3. Inverte-se esse conjunto de momentos com a primeira quadratura do EQMOM, obtendo-se assim um conjunto com  $n$  pesos,  $n$  abscissas e  $n$  larguras de banda.
4. Otimiza-se a função objetivo com o CRS.
5. Otimiza-se a função objetivo com o BOBYQA.

Cabe ressaltar novamente que, se a estimativa inicial que gera os parâmetros a serem alimentados na rotina de otimização for o EQMOM, todos os valores de  $\sigma_\alpha$  serão iguais, uma vez que o este método gera a mesma largura de banda para todos os pontos de quadratura.

# Capítulo 4

## Resultados e Discussões

Esta seção se destina a apresentar e comentar os principais resultados obtidos através do algoritmo proposto. O capítulo será estruturado em subseções de acordo com os casos propostos.

A nomenclatura destes casos busca descrever o problema de aproximação que se deseja resolver. Os ítems que aparecem em uma nomenclatura genérica são dados a seguir.

**Tabela 4.1:** Sufixo 1 - Inicial correspondendo à distribuição de partida

Sufixo	Distribuição
G	KDF Gama
B	KDF Beta
C	Chi
K	Kumaraswamy
E	Exponencial

Seguido do sufixo 1, vem o número  $m$  de distribuições que compõem a distribuição de partida: 2, 3, 4 ou 5. Após o número  $m$  vem a inicial correspondendo à KDF empregada na aproximação,  $G$  para a gama e  $B$  para a beta. Tendo-se especificado a KDF empregada na aproximação, a informação em seguida é o número  $n$  de KDFs empregadas na aproximação, : 2, 3, 4 ou 5. Após, vem a estimativa inicial empregada, cuja identificação é feita mediante o apresentado na Tabela 4.2.

**Tabela 4.2:** Sufixos associados a estimativa inicial.

Sufixo	Estimativa Inicial
Eqm	EQMOM
Per	perturbação randômica

A perturbação randômica de até 20% no valor das variáveis de partida, em todos os casos, foi calculada usando as funções *random()* e *srandom()* disponíveis na biblioteca em *C stdlib.h*.

Seguindo a lógica exposta a respeito da nomenclatura, pode-se construir a Tabela 4.3 que indica as condições com as quais foram conduzidos os processos de otimização para cada um dos casos. O algoritmo CRS trabalha com um tamanho de partículas padrão que não pode ser menor que  $(3n+1)10$ , onde  $3n$  é a quantidade de parâmetros. Por isso, na Tabela 4.3 abaixo, o tamanho da população ficou escrito desta forma: para que se pudesse evidenciar o quão grande a população teve que ser para o método funcionar adequadamente.

**Tabela 4.3:** Casos propostos.

Caso	População	Tol. Rel. Par.	Tol. Abs. Par.	Tol. Rel. F. Obj.	Tol. Rel. F. Obj.
B2B2EqmCRS	$(3n+1)40$	$10^{-8}$	$10^{-8}$	-	-
B2B2PerCRS	$(3n+1)40$	$10^{-8}$	$10^{-8}$	-	-
B3B3EqmCRS	$(3n+1)20$	$10^{-10}$	$10^{-10}$	-	-
B3B3PerCRS	$(3n+1)20$	$10^{-10}$	$10^{-10}$	-	-
B4B4EqmCRS	$(3n+1)100$	$10^{-8}$	$10^{-8}$	-	-
B4B4PerCRS	$(3n+1)100$	$10^{-8}$	$10^{-8}$	-	-
B5B5EqmCRS	$(3n+1)90$	$10^{-15}$	$10^{-15}$	$10^{-15}$	$10^{-15}$
B5B5PerCRS	$(3n+1)90$	$10^{-7}$	$10^{-7}$	-	-
G2G2EqmCRS	$(3n+1)40$	$10^{-8}$	$10^{-8}$	-	-
G2G2PerCRS	$(3n+1)40$	$10^{-8}$	$10^{-8}$	-	-
G3G3EqmCRS	$(3n+1)40$	$10^{-9}$	$10^{-9}$	-	-
G3G3PerCRS	$(3n+1)40$	$10^{-9}$	$10^{-9}$	-	-
G4G4EqmCRSD	$(3n+1)150$	$10^{-8}$	$10^{-8}$	-	-
G4G4PerCRS	$(3n+1)100$	$10^{-7}$	$10^{-7}$	-	-
G5G5EqmCRS	$(3n+1)150$	$10^{-15}$	$10^{-15}$	$10^{-15}$	$10^{-15}$
G5G5PerCRS	$(3n+1)150$	$10^{-15}$	$10^{-15}$	$10^{-15}$	$10^{-15}$
C2G2qmCRS	$(3n+1)90$	$10^{-15}$	$10^{-15}$	$10^{-15}$	$10^{-15}$
C3G3qmCRS	$(3n+1)90$	$10^{-15}$	$10^{-15}$	$10^{-15}$	$10^{-15}$
E2G2qmCRS	$(3n+1)100$	$10^{-15}$	$10^{-15}$	$10^{-15}$	$10^{-15}$
E3G3EqmCRS	$(3n+1)100$	$10^{-15}$	$10^{-15}$	$10^{-15}$	$10^{-15}$
K2B2qmCRS	$(3n+1)40$	$10^{-15}$	$10^{-15}$	$10^{-15}$	$10^{-15}$
K3B3EqmCRS	$(3n+1)80$	$10^{-15}$	$10^{-15}$	$10^{-15}$	$10^{-15}$

Os valores de partida também fazem parte da definição dos casos e estão dispostos nas tabelas de valores acompanhando cada um dos gráficos obtidos. Na maioria dos casos pode-se observar que não foram empregados critérios de saída com base na função objetivo. Isto se deu ao fato de que garantir uma boa convergência na função objetivo não foi suficiente para garantir uma boa aproximação da função de partida na maioria dos casos. Exemplos disso serão dados adiante, no presente capítulo.

Recordando a Equação 3.29, este trabalho busca resolver o seguinte problema de reconstrução de uma distribuição inicial através de otimização, conforme mostra a Equação 4.1.

$$f(\xi) = \sum_{j=1}^m w_j \delta_{\sigma_j}(\xi, \xi_j) \approx \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha \delta_{\sigma_\alpha}(\xi, \xi_\alpha) \quad (4.1)$$

A análise do problema proposto permite observar que se parte de uma ou mais distribuições (do mesmo tipo) que, ponderadamente somadas pelos coeficientes de ponderação  $w_\alpha$  fornecem a distribuição de partida e que se usará uma das KDFs,

beta ou gama, para aproximar essa função de partida.

Inicialmente serão mostrados os resultados para os casos teste para observar o comportamento do algoritmo frente a quantidade de parâmetros a serem calculados.

A legenda que será observada nos gráficos é dada segundo a nomenclatura abaixo, onde  $\xi$  será a variável interna.

- A curva  $f(\xi)$  corresponde a distribuição de partida.
- A curva  $C_n(\xi)$  é obtida usando os parâmetros das KDFs aproximantes com os valores gerados da estimativa inicial.
- A curva  $G_n(\xi)$  é gerada com os parâmetros resultantes da otimização global.
- A curva  $p_n(\xi)$  é gerada com os parâmetros finais.

Acompanhando cada um dos casos, segue uma tabela de valores de parâmetros e outra informando demais dados relevantes à otimização. É importante ressaltar que dificilmente uma distribuição real exibirá perfil semelhante aos casos teste propostos. O emprego de distribuições mais complexas foi feito com o intuito de analisar a robustez da metodologia proposta neste trabalho em reconstruir as distribuições. O método foi implementado em linguagem C, empregando rotinas em FORTRAN e compilado com *gcc* e *gfortran*, operando com Ubuntu® versão 12.04. Cabe ainda fazer uma observação pertinente a nomenclatura utilizada: nesta seção não se deve chamar os coeficientes de ponderação das KDFs e distribuições de pesos, e nem os pontos nos quais se colocam as distribuições de abscissas, uma vez que esta terminologia se enquadra em cálculos de quadraturas. Contudo, por questões de simplificação da notação, os pontos de colocação são representados por  $\xi_\alpha$  e os coeficientes de ponderação por  $w_\alpha$ .

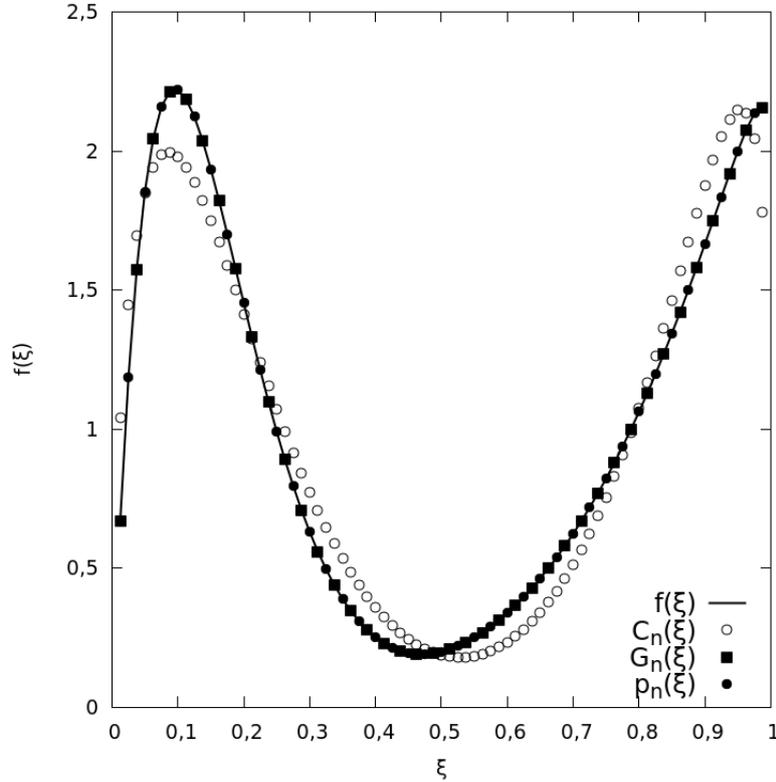
## 4.1 Aproximando distribuições Betas por séries de distribuições Beta

Esta seção se destina a mostrar os resultados dos casos teste nos quais as distribuições de partida foram geradas a partir da combinação ponderada de distribuições beta, aproximadas também por distribuições do tipo beta. Foram utilizadas de 2 a 5 distribuições, tanto para gerar a distribuição de partida quando a aproximante.

Isto foi feito para verificar o comportamento da otimização frente as diferentes estimativas iniciais. Cabe ressaltar que, como a distribuição de partida é definida em domínio finito  $[0,1]$ , com  $m_0 = 1$  todas as variáveis do problema ( $w_\alpha$ ,  $\xi_\alpha$  e  $\sigma_\alpha$ ) pertencem a este domínio. Note que os coeficientes de ponderação são normalizados.

### 4.1.1 Estimativa Inicial: EQMOM

Os resultados apresentados nesta subseção foram obtidos utilizando como estimativa inicial os parâmetros provenientes do EQMOM, empregando otimização global e local em seguida.



**Figura 4.1:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 2 KDFs beta aproximada por 2 KDFs beta respectivamente.

A Figura 4.1 mostra o perfil defasado gerado com a estimativa inicial em relação a curva original. A otimização consegue, contudo, melhorar a aproximação.

**Tabela 4.4:** Tabela de Parâmetros: Caso B2B2EqmCRS

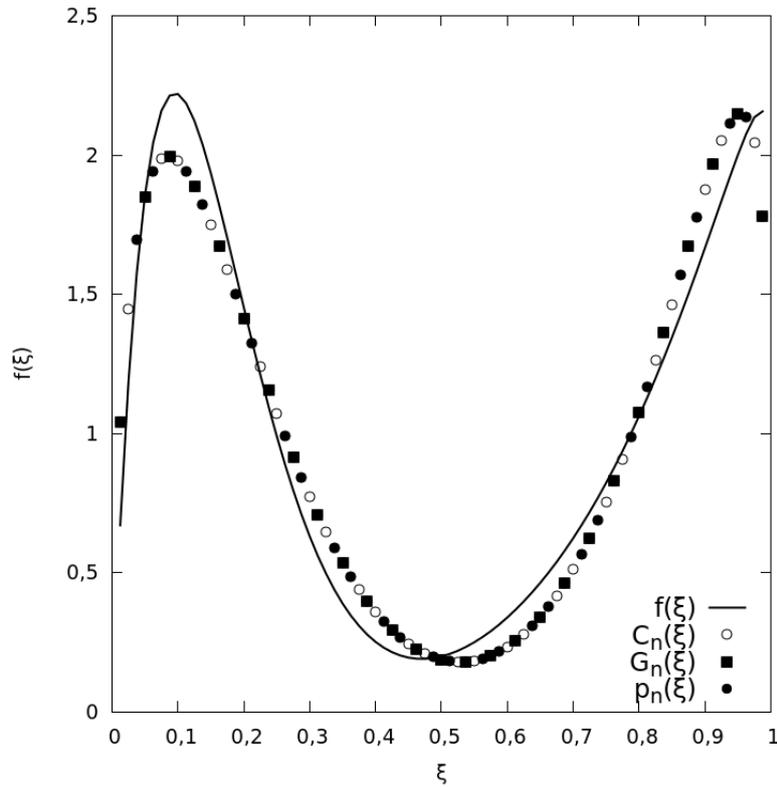
V. de Partida			Estimativa Inicial			Global			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,5000	0,1600	0,0800	0,5300	0,1782	0,1119	0,5000	0,1600	0,0800	0,5000	0,1600	0,0800
0,5000	0,8300	0,1600	0,4700	0,8522	0,1119	0,5000	0,8300	0,1600	0,5000	0,8300	0,1600

A análise da Tabela 4.4 permite constatar que os valores obtidos ao final da etapa de otimização local, os valores obtidos são iguais aos valores de partida. Isto pode ser explicado pela quantidade pequena de parâmetros e, em consequência, de momentos, que são submetidos à otimização.

Foi estabelecida uma comparação entre o método proposto neste trabalho e o EQMOM no sentido de se empregarem apenas os  $2n + 1$  primeiros momentos da distribuição no cálculo da função objetivo. O resultado é mostrado abaixo.

**Tabela 4.5:** Informações adicionais: Caso B2B2EqmCRS

Tempo de cálculo	1,248500e-01 s
Mínimo global	7,612094e-11
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta nos parâmetros atingida.
Mínimo local	4,085177e-11
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações CRS	69789
Número de avaliações BOBYQA	174

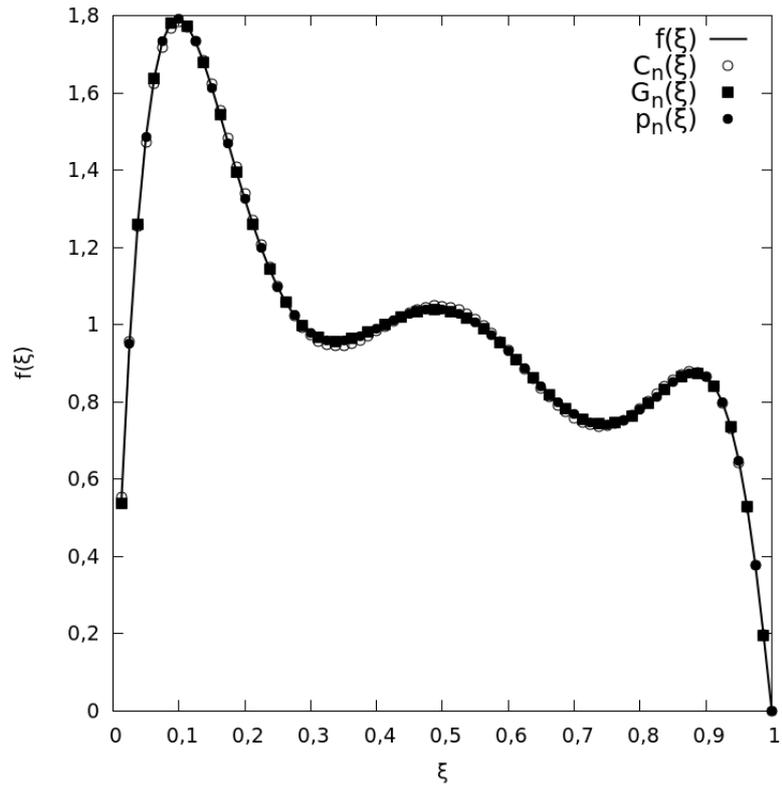


**Figura 4.2:** Comparação entre o presente método e o EQMOM, empregando  $2n + 1$  momentos.

A Figura 4.2 mostra que as curvas geradas pela estimativa inicial e pelo presente método são praticamente sobrepostas, o que é de se esperar. O EQMOM propõe a exata reconstrução dos  $2n + 1$  primeiros momentos. Já o processo de otimização busca minimizar o somatório dos erros relativos entre os momentos, o que equivale na boa aproximação entre os momentos da distribuição de partida e os da distribuição aproximante. Ambos os métodos, então, reproduzem bem os  $2n + 1$  primeiros momentos.

A análise da 4.5 mostra que esse perfil reconstruído da distribuição foi obtido com um tempo relativamente pequeno e com poucas avaliações da função objetivo.

A análise da Figura 4.3 mostra que o perfil gerado com a estimativa inicial é bastante fiel à distribuição de partida. A otimização consegue melhorar a aproximação e tornar o perfil da distribuição reconstruída ainda mais fiel à distribuição de



**Figura 4.3:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 3 KDFs beta aproximada por 3 KDFs beta respectivamente.

partida.

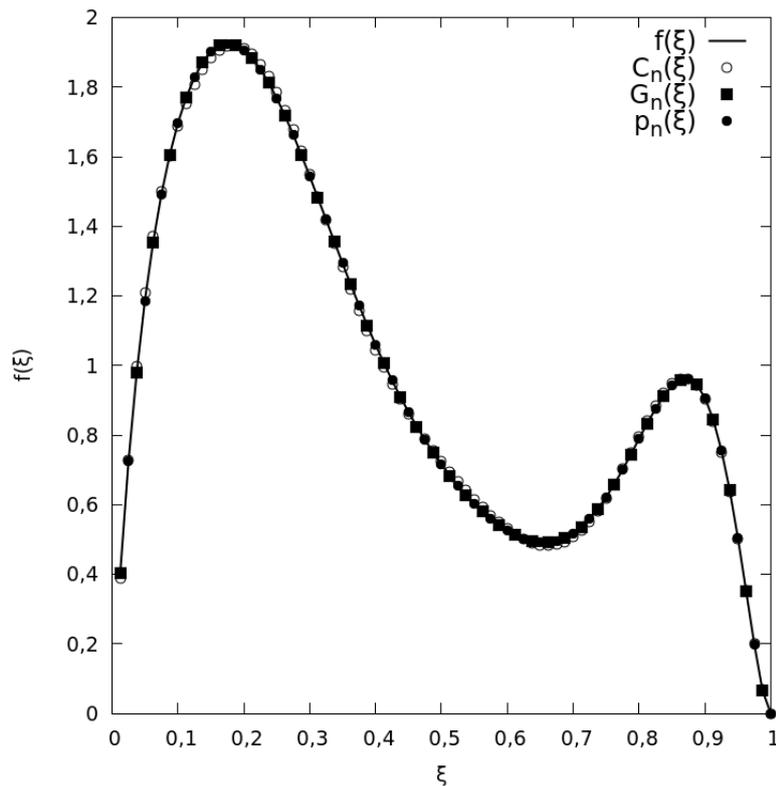
**Tabela 4.6:** Tabela de parâmetros: Caso B3B3EqmCRSD

V. de Partida			Estimativa Inicial			Global			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,4000	0,1600	0,0800	0,4217	0,1673	0,0858	0,4000	0,1600	0,0800	0,4000	0,1600	0,0800
0,4000	0,5000	0,1000	0,3628	0,5030	0,0858	0,4000	0,5000	0,1000	0,4000	0,5000	0,1000
0,2000	0,8300	0,0800	0,2155	0,8210	0,0858	0,2000	0,8300	0,0800	0,2000	0,8300	0,0800

A Tabela 4.6, de forma semelhante a Tabela 4.4, mostra que os valores de saída se igualam aos de partida, pois a quantidade de parâmetros que se utiliza ainda é razoavelmente pequena.

**Tabela 4.7:** Informações adicionais: Caso B3B3EqmCRSD

Tempo de cálculo	1,252786e+01 s
Mínimo global	1,941730e-15
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta nos parâmetros atingida.
Mínimo local	1,887261e-15
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações CRS	5285471
Número de avaliações BOBYQA	177



**Figura 4.4:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 4 KDFs beta aproximada por 4 KDFs beta respectivamente.

É possível observar, através da análise da Figura 4.4, que, se forma semelhante à Figura 4.3, o perfil obtido com a estimativa inicial já é bem parecido com o da distribuição de partida.

**Tabela 4.8:** Tabela de Parâmetros: Caso B4B4EqmCRS

V. de Partida			Estimativa Inicial			Global			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,2000	0,1600	0,0800	0,2446	0,1370	0,0645	0,2140	0,1365	0,0682	0,2140	0,1365	0,0682
0,3000	0,2800	0,0700	0,3816	0,2782	0,0645	0,4359	0,2798	0,0806	0,4359	0,2798	0,0806
0,3000	0,5000	0,1000	0,1585	0,5130	0,0645	0,1474	0,5348	0,0812	0,1474	0,5348	0,0812
0,2000	0,8300	0,0600	0,2154	0,8221	0,0645	0,2026	0,8289	0,0605	0,2026	0,8289	0,0605

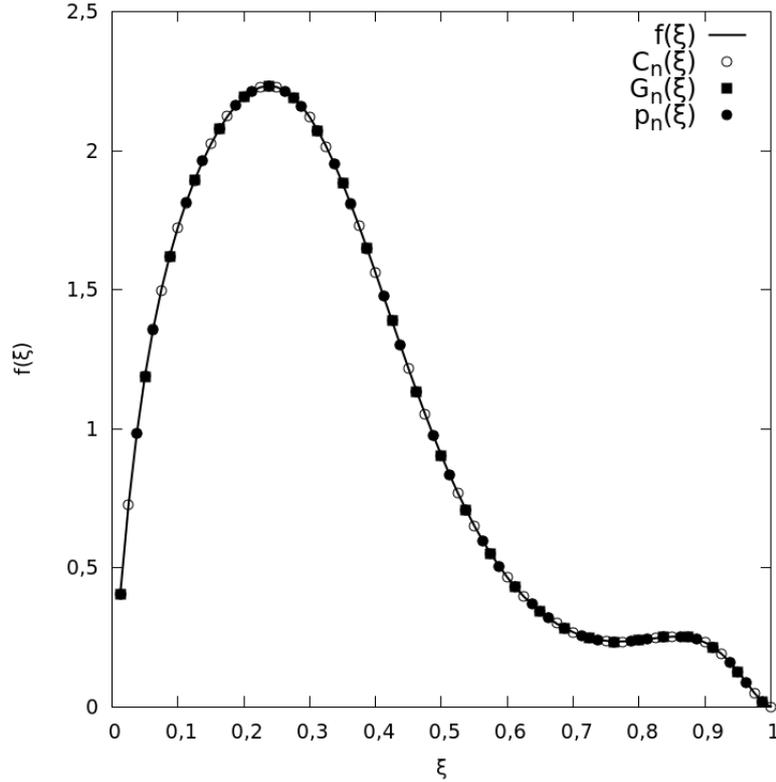
Consegue-se perceber, através da Tabela 4.8 que a quantidade de parâmetros obtidos ao final da otimização não mais se igualam aos valores de partida, uma vez que a quantidade de parâmetros envolvida na otimização deixa de ser tão pequena. É possível notar, contudo, novamente utilizando a Figura 4.4 que a representação gerada não deixa de ser bastante semelhante à distribuição de partida. Para explicar este resultado, basta recorrer ao que fora visto na seção de problema de momentos truncado: apesar dos primeiros  $3n$  momentos das duas distribuições serem iguais, as distribuições podem ser diferentes.

**Tabela 4.9:** Informações adicionais: Caso B4B4EqmCRS

Tempo de cálculo	5,786679e+02 s
Mínimo global	9,286221e-11
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta nos parâmetros atingida.
Mínimo local	9,286221e-11
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações CRS	72400760
Número de avaliações BOBYQA	189

A análise da Tabela 4.9 permite observar um tempo de cálculos maior se comparado com os casos anteriores, o que é de se esperar, uma vez que a quantidade de parâmetros otimizados é maior. A função objetivo atinge um valor bem pequeno, indicando que os valores dos momentos numéricos praticamente se igualam aos dos momentos analíticos. O número de avaliações da função objetivo também aumenta, em consequência do aumento no número de parâmetros.

No caso correspondente a Figura 4.5 é possível observar que, apesar dos valores de sigma serem bastante pequenos, como o domínio é finito, ou seja, os pontos de colocação não podem ficar arbitrariamente dispostas, a superposição de KDFs acaba por unir picos, de forma que não se consegue identificar tantas KDFs e a distribuição deixa de parecer tão complexa. O mesmo é observado na Figura 4.4. Em termos de aproximação da distribuição de partida, pode-se observar, principalmente no caso B5B5EqmCRS que a estimativa inicial de parâmetros com o EQMOM é tão bom que, a princípio, dispensaria o emprego das rotinas de otimização.



**Figura 4.5:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 5 KDFs beta aproximada por 5 KDFs beta respectivamente.

**Tabela 4.10:** Tabela de parâmetros: Caso B5B5EqmCRS

V. de Partida			Estimativa Inicial			Global			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,3000	0,2800	0,0700	0,3024	0,2417	0,0631	0,3034	0,2385	0,0631	0,3034	0,2385	0,0631
0,2000	0,3600	0,0600	0,3652	0,3641	0,0631	0,3705	0,3634	0,0626	0,3705	0,3634	0,0626
0,1500	0,5000	0,1000	0,0768	0,5715	0,0631	0,0770	0,5719	0,0623	0,0770	0,5719	0,0623
0,0500	0,8300	0,0600	0,0541	0,8233	0,0631	0,0542	0,8231	0,0632	0,0542	0,8231	0,0632

A análise da Tabela 4.10 complementa o que é observado na Figura 4.5 em termos de qualidade da aproximação gerada pela estimativa inicial, mostrando que isso pode ocorrer devido ao fato de que os larguras de banda da distribuição inicial tem valores muito semelhantes. A isto, se soma que a aproximação gerada com o EQMOM é boa porque trabalha com o mesmo valor de sigma para todas as KDFs.

**Tabela 4.11:** Informações adicionais: Caso B5B5EqmCRS

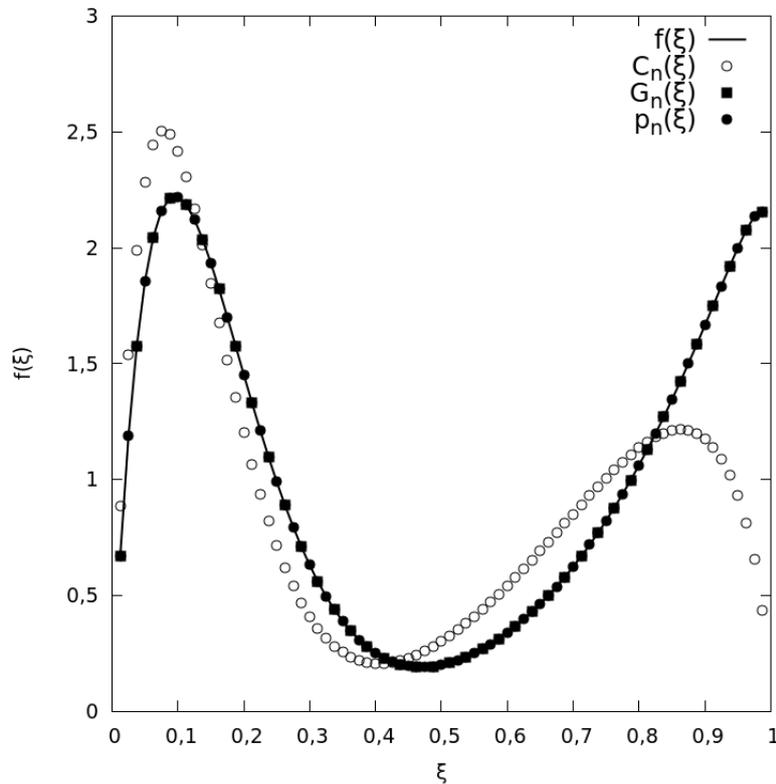
Tempo de cálculo	7,560425e+02 s
Mínimo global	2,812869e-09
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Mínimo local	
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações CRS	74190599
Número de avaliações BOBYQA	243

A Tabela 4.11 mostra que o tempo de cálculos para este caso é muito similar ao

que pode ser observado na Tabela 4.9, apesar do número de parâmetros ser maior no presente caso que no anterior. Contudo, os valores de larguras de banda em ambos os casos não difere muito, logo, a estimativa inicial gerada com o EQMOM é bastante boa, facilitando o processo de otimização. O número de avaliações da função objetivo também é similar ao do caso anterior.

#### 4.1.2 Estimativa Inicial: Perturbação Randômica

Os resultados apresentados nesta subseção foram obtidos utilizando como estimativa inicial uma perturbação randômica de até 20% no valor das variáveis de entrada. Foram empregadas otimização global e local. Estes casos irão permitir melhor análise do comportamento da otimização.



**Figura 4.6:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 2 KDFs beta aproximada por 2 KDFs beta respectivamente.

A Figura 4.6 mostra que a perturbação randômica gera um perfil bastante defasado em relação à distribuição de partida, o que permite avaliar melhor o papel da otimização empregada e do método como um todo. Percebe-se que a otimização melhora significativamente o perfil da representação final gerada, o que evidencia o papel do método proposto.

A análise da Tabela 4.12 permite tirar conclusões semelhantes ao caso análogo cuja estimativa inicial foi feita mediante emprego do EQMOM (Tabela 4.4). A

**Tabela 4.12:** Tabela de parâmetros: Caso B2B2PerCRS

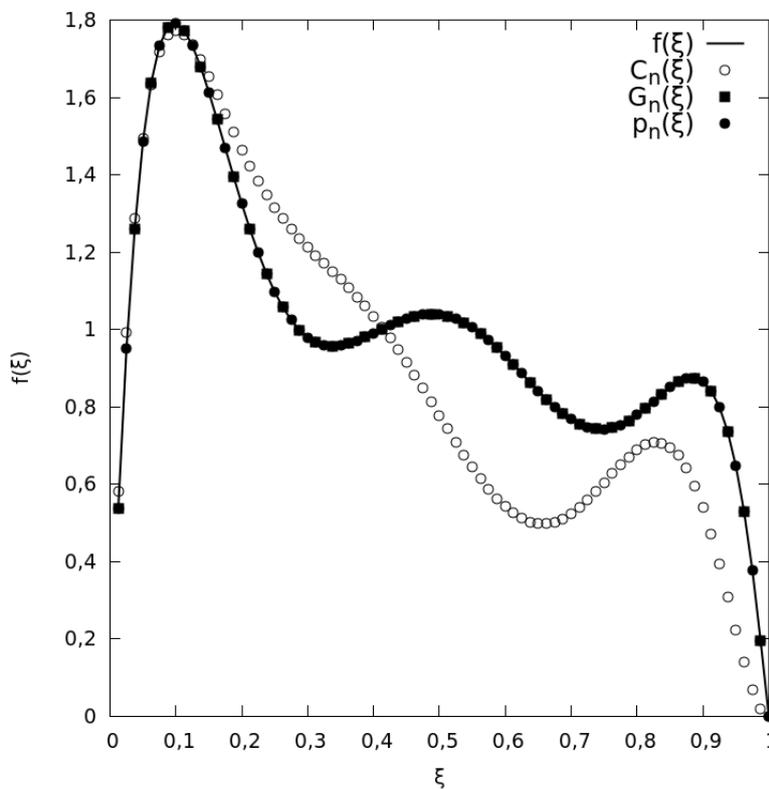
V. de Partida			Estimativa Inicial			Global			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_\alpha$	$w_j$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,5000	0,1600	0,0800	0,4716	0,1346	0,0668	0,5000	0,1600	0,0800	0,5000	0,1600	0,0800
0,5000	0,8300	0,1600	0,4444	0,7574	0,1457	0,5000	0,8300	0,1600	0,5000	0,8300	0,1600

quantidade de parâmetros otimizados, por ser pequena, permite que os valores de saída da rotina sejam integralmente igualados aos valores de partida.

**Tabela 4.13:** Informações adicionais: Caso B2B2PerCRS

Tempo de cálculo	1,827040e-01 s
Mínimo global	2,920881e-11
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta nos parâmetros atingida.
Mínimo local	1,117023e-11
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações CRS	86975
Número de avaliações BOBYQA	129

A Tabela 4.13 mostra novamente um tempo pequeno de cálculos e um valor atingido pela função objetivo também bem pequeno, o que indica que os momentos estão sendo bem aproximados. O número de avaliações da função objetivo com o CRS também é pequeno, se comparado com os casos com maior quantidade de parâmetros.



**Figura 4.7:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 3 KDFs beta aproximada por 3 KDFs beta respectivamente.

A Figura 4.7 permite conclusões parecidas às da Figura 4.6. O perfil gerado com a estimativa inicial também quase não apresenta similaridade com a curva referente à distribuição de partida,  $f(\xi)$ . A otimização se mostra fundamental na melhora da aproximação.

A Tabela 4.14 também apresenta características em comum com a Tabela 4.12, uma vez que em ambas, os valores de partida são recuperados ao final da otimização, devido a quantidade relativamente pequena de parâmetros empregados.

**Tabela 4.14:** Tabela de parâmetros: Caso B3B3PerCRS

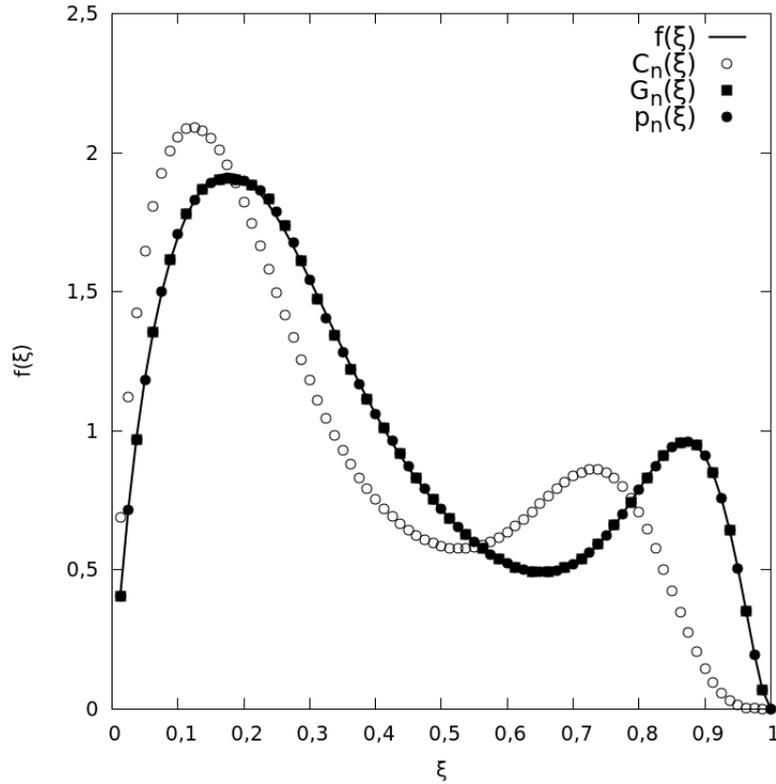
V. de Partida			Estimativa Inicial			Global			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0.4000	0.1600	0.0800	0.3695	0.1534	0.0787	0.4000	0.1600	0.0800	0.4000	0.1600	0.0800
0.4000	0.5000	0.1000	0.3530	0.4052	0.0954	0.4000	0.5000	0.1000	0.4000	0.5000	0.1000
0.2000	0.8300	0.0800	0.1747	0.7896	0.0676	0.2000	0.8300	0.0800	0.2000	0.8300	0.0800

**Tabela 4.15:** Informações adicionais: Caso B3B3PerCRS

Tempo de cálculo	1,450156e+02 s
Mínimo global	4,376489e-12
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta nos parâmetros atingida.
Mínimo local	4,288455e-12
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações CRS	19670034
Número de avaliações BOBYQA	185

A Tabela 4.15 mostra as consequências percebidas pela otimização decorrentes de uma estimativa inicial mais defasada em relação as distribuições de partida. Ao estabelecer-se uma comparação desta com a Tabela 4.13, percebe-se um tempo de cálculos significativamente maior, além de um número de avaliações da função objetivo com o CRS bastante maior. Apesar da perturbação randômica mostrar efetivamente o papel do método na melhor caracterização da distribuição de partida, esta estimativa inicial é mais custosa computacionalmente que o EQMOM.

A análise da Figura 4.8 mostra, novamente, um perfil defasado, gerado pela estimativa inicial empregada e o bom desempenho da otimização em melhorar a aproximação gerada.



**Figura 4.8:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 4 KDFs beta aproximada por 4 KDFs beta respectivamente.

**Tabela 4.16:** Tabela de parâmetros: Caso B4B4PerCRS

V. de Partida			Estimativa Inicial			Global			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,3000	0,1600	0,0800	0,2882	0,1299	0,0690	0,5890	0,2382	0,1255	0,5890	0,2382	0,1255
0,3000	0,2800	0,0700	0,2678	0,2337	0,0622	0,2460	0,5060	0,2444	0,2460	0,5060	0,2444
0,2000	0,5000	0,1000	0,1670	0,4629	0,0832	0,1556	0,8407	0,0533	0,1556	0,8407	0,0533
0,2000	0,8300	0,0600	0,1950	0,7231	0,0500	0,0094	0,2538	0,0099	0,0094	0,2538	0,0099

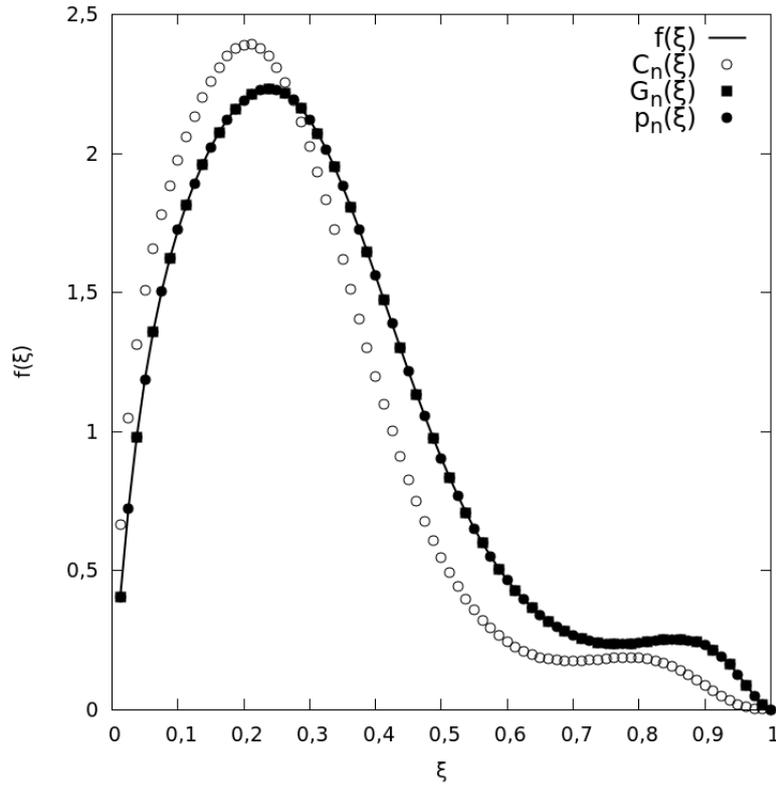
A Tabela 4.16 mostra que os parâmetros de saída da otimização deixam, novamente, de se igualarem aos de partida, em decorrência do aumento da quantidade de parâmetros a serem otimizados. Novamente, complementando com a Figura 4.8, a aproximação não deixa de ser adequada.

**Tabela 4.17:** Informações adicionais: Caso B4B4PerCRS

Tempo de cálculo	7,348111e+03 s
Mínimo global	1,134338e-11
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta nos parâmetros atingida.
Mínimo local	1,134338e-11
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações CRS	909633946
Número de avaliações BOBYQA	172

Fica evidente, mediante a análise da Tabela 4.17, que a defasagem causada pela estimativa inicial é mais custosa para a otimização em termos de cálculos

e de avaliações da função objetivo.



**Figura 4.9:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 5 KDFs beta aproximada por 5 KDFs beta respectivamente.

A análise da Figura 4.9 mostra o perfil defasado gerado pela estimativa inicial e o desempenho da otimização em melhorar a aproximação, apesar do elevado número de parâmetros.

**Tabela 4.18:** Tabela de parâmetros: Caso B5B5PerCRS

V. de Partida			Estimativa Inicial			Global			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0.3000	0.1600	0.0800	0.2933	0.1390	0.0763	0.4260	0.1925	0.0978	0.4260	0.1925	0.0978
0.3000	0.2800	0.0700	0.2852	0.2610	0.0678	0.4201	0.3397	0.0730	0.4201	0.3397	0.0730
0.2000	0.3600	0.0600	0.1627	0.2990	0.0549	0.0599	0.4848	0.1341	0.0599	0.4848	0.1341
0.1500	0.5000	0.1000	0.1436	0.4035	0.0984	0.0446	0.5776	0.0672	0.0446	0.5776	0.0672
0.0500	0.8300	0.0600	0.0411	0.7713	0.0539	0.0494	0.8306	0.0598	0.0494	0.8306	0.0598

A Tabela 4.18 permite constatar que, de forma semelhante ao caso precedente, os parâmetros de saída são diferentes dos de entrada. Isto, novamente, não prejudica a aproximação gerada pelo método. Complementarmente, a análise da Tabela 4.19 mostra que o valor atingido pela função objetivo é bem próximo de 0. Isto já foi justificado anteriormente e é decorrente de se trabalhar com um conjunto truncado de momentos.

A análise da Tabela 4.19 mostra, ao estabelecer-se uma comparação com a Tabela 4.11, tempos de cálculo e número de avaliações da função objetivo maiores,

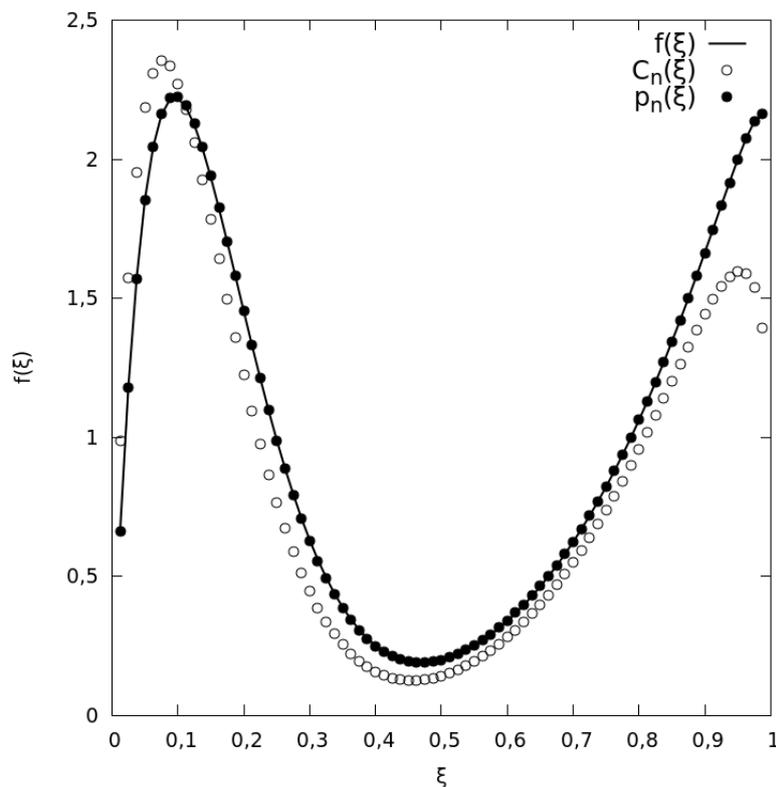
**Tabela 4.19:** Informações adicionais: Caso B5B5PerCRS

Tempo de cálculo	5,799924e+03 s
Mínimo global	1,132553e-10
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta nos parâmetros atingida.
Mínimo local	1,132552e-10
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações CRS	585165331
Número de avaliações BOBYQA	228

decorrentes da defasagem da estimativa inicial.

### 4.1.3 Perturbação Randômica e Otimização Local

Esta seção se destina a mostrar os resultados que são obtidos quando a estimativa inicial é gerado pela perturbação randômica de até 20% nos valores dos parâmetros iniciais e, então, alimentados apenas na otimização local. Note que este cálculo não faz uso da otimização global. Estes cálculos são apresentados como proposta para melhorar as aproximações em situações nas quais se observa uma pequena modificação nos valores dos parâmetros. Tal situação é remete, por exemplo, realiza-se a evolução temporal de uma distribuição. Nesta situação tomada, é de se esperar que não haja modificações bruscas na distribuição.



**Figura 4.10:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 2 KDFs beta aproximada por 2 KDFs beta respectivamente.

A análise da Figura 4.10 mostra que, apesar do perfil gerado com a estimativa inicial apresentar certa defasagem em relação à distribuição de partida, com algumas iterações do otimizador local BOBYQA, esta defasagem se torna bem menos evidente, melhorando expressivamente a aproximação.

**Tabela 4.20:** Tabela de parâmetros: Caso B2B2PerL

V. de Partida			Estimativa Inicial			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,5000	0,1600	0,0800	0,4738	0,1410	0,0757	0,4994	0,1596	0,0793
0,5000	0,8300	0,1600	0,4136	0,8261	0,1409	0,5006	0,8296	0,1609

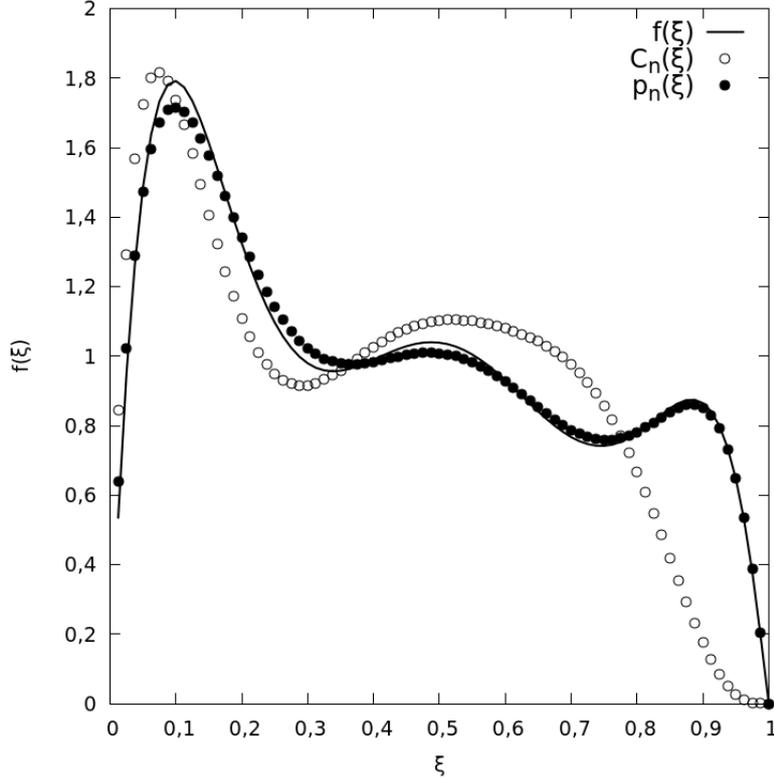
Já deixa de se observar na Tabela 4.20 o que foi observado nas tabelas 4.4 e 4.12 em termos de recuperação integral dos valores de partida. Isto ocorre porque, como o otimizador local não varre o domínio de busca de adequadamente, como é o caso do CRS que trabalha com uma população, este só consegue buscar mínimos em uma região restrita, próxima à estimativa inicial. Algo que decorre deste fato é que a aproximação gerada não será tão boa quanto as que também empregam o CRS. Além disso, como será mostrado adiante, o valor atingido pela função objetivo no final da otimização é significativamente maior que em casos que também se emprega o CRS. Note que, como os valores de perturbação gerados nos casos desta seção não se igualam em intensidade aos casos que utilizam o CRS, não se poderá estabelecer uma comparação muito abrangente.

**Tabela 4.21:** Informações adicionais: Caso B2B2PerL

Tempo de cálculo	2,995140e-01 s
Mínimo local	5,408512e-07
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações BOBYQA	51253

A análise da Tabela 4.21 mostra que o tempo de cálculos é bem pequeno. Complementando o que foi dito anteriormente, o valor da função objetivo não é tão pequeno. O número de iterações do otimizador local também não é muito elevado.

A análise da Figura 4.11 mostra o perfil defasado gerado pela perturbação e a relativa melhora na aproximação gerada pelo otimizador local. Começa-se a observar que o aumento no número de parâmetros implicará em dificuldades na obtenção de aproximações mais adequadas.



**Figura 4.11:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 3 KDFs beta aproximada por 3 KDFs beta respectivamente.

**Tabela 4.22:** Tabela de parâmetros: Caso B3B3PerL

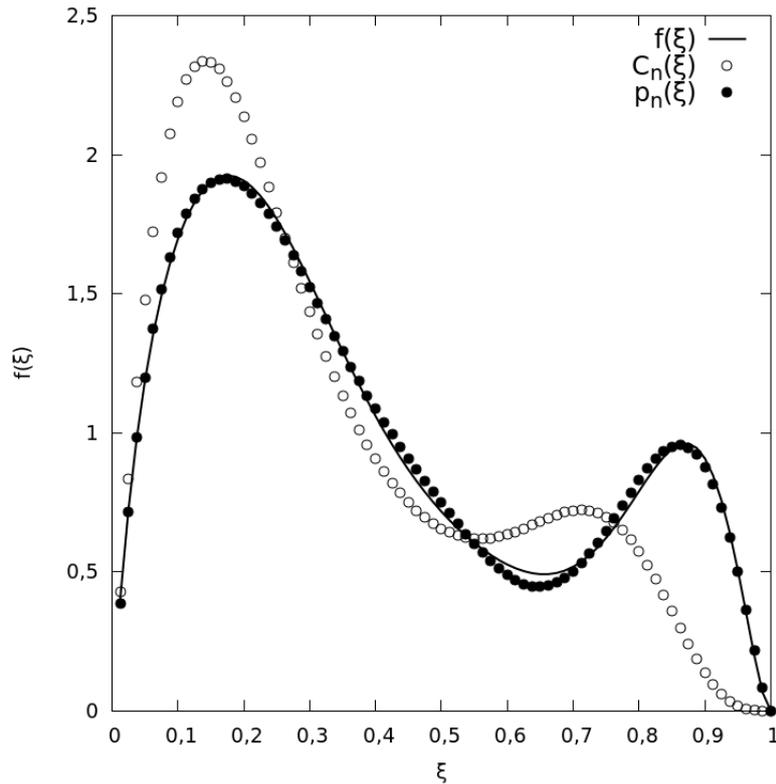
V. de Partida			Estimativa Inicial			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,4000	0,1600	0,0800	0,3525	0,1359	0,0753	0,4192	0,1704	0,0936
0,4000	0,5000	0,1000	0,3877	0,4661	0,0969	0,3899	0,5116	0,1061
0,2000	0,8300	0,0800	0,1947	0,7063	0,0670	0,1909	0,8334	0,0797

A Tabela 4.22 mostra, novamente, que os parâmetros de saída do método diferem dos valores de partida. A diferença, neste caso é que a aproximação gerada apesar de melhor, não consegue se sobrepôr à curva de partida para todos os valores de  $\xi$ .

**Tabela 4.23:** Informações adicionais: Caso B3B3PerL

Tempo de cálculo	1,603845e+00 s
Mínimo local	4,736624e-06
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações BOBYQA	153340

A Tabela 4.23 mostra que o tempo empregado nos cálculos, apesar de ainda ser razoavelmente pequeno é maior que o obtido no caso anterior, Tabela 4.21. O valor final da função objetivo é mais alto, assim como o número de iterações feitas. Isto decorre do aumento do número de parâmetros otimizados.



**Figura 4.12:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 4 KDFs beta aproximada por 4 KDFs beta respectivamente.

A análise da Figura 4.12 permite observar tanto o perfil defasado gerado pela perturbação quanto a melhora na aproximação pela otimização local.

**Tabela 4.24:** Tabela de parâmetros: Caso B4B4PerL

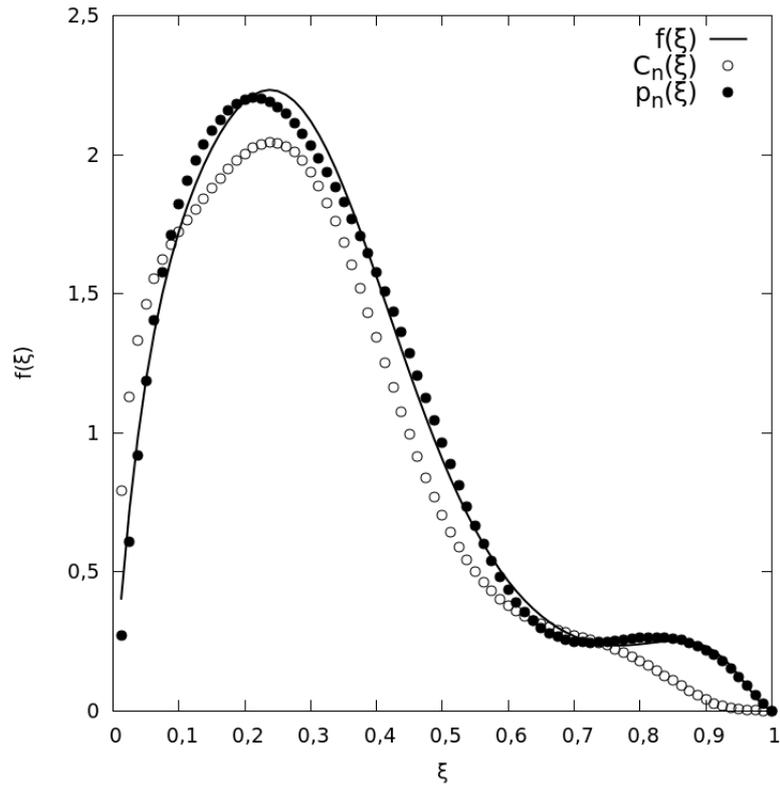
V. de Partida			Estimativa Inicial			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,3000	0,1600	0,0800	0,2979	0,1446	0,0681	0,3382	0,1676	0,0820
0,3000	0,2800	0,0700	0,2981	0,2319	0,0648	0,3253	0,3068	0,0762
0,2000	0,5000	0,1000	0,1949	0,4316	0,0867	0,2377	0,8074	0,0747
0,2000	0,8300	0,0600	0,1786	0,7105	0,0594	0,0988	0,5017	0,0449

A Tabela 4.24 indica que os valores de saída da otimização diferem dos valores de partida, apesar da Figura 4.12 indicar que a aproximação foi adequada.

**Tabela 4.25:** Informações adicionais: Caso B4B4PerL

Tempo de cálculo	7,246830e-01 s
Mínimo local	6,321745e-06
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações BOBYQA	44755

A Tabela 4.25 mostra que o tempo de cálculos é pequeno.



**Figura 4.13:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 5 KDFs beta aproximada por 5 KDFs beta respectivamente.

A Figura 4.13 permite constatar a defasagem causada pela estimativa inicial e o papel da otimização de melhorar a aproximação.

**Tabela 4.26:** Tabela de parâmetros: Caso B5B5PerL

V. de Partida			Estimativa Inicial			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,0500	1,0000	0,8000	0,0448	0,9793	0,7651	0,0522	0,9617	0,7743
0,0500	4,0000	1,0000	0,0414	3,9348	0,9594	0,0487	3,8704	0,9499
0,1000	11,0000	2,0000	0,0880	10,5556	1,9030	0,0903	11,6505	1,6361
0,3000	15,0000	3,0000	0,2582	13,7137	2,7226	0,3085	14,7595	3,1070
0,5000	35,0000	2,0000	0,4728	32,4706	1,7149	0,5002	34,9942	2,0005

A análise da Tabela 4.26 mostra, complementando a Figura 4.13, a defasagem gerada pela estimativa inicial nos valores. A otimização aproxima mais os valores de saída dos de partida, apesar da distribuição final não ser totalmente fiel a de partida.

**Tabela 4.27:** Informações adicionais: Caso B5B5PerL

Tempo de cálculo	5,170828e+00 s
Mínimo local	5,537902e-06
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações BOBYQA	86393

Novamente, com poucas iterações do otimizador local BOBYQA e em um tempo relativamente pequeno, conforme pode ser visto nas Tabela 4.27, consegue-se gerar uma aproximação bastante razoável para a distribuição em questão.

Novamente, os casos mostrados nesta seção podem ser remetidos a situações nas quais estas pequenas modificações nos parâmetros ocorrem, como é o caso do exemplo da evolução temporal, indicando robustez do método para este tipo de problema.

## 4.2 Aproximando distribuições Gama por séries de distribuições Gama

Esta seção se destina a mostrar os resultados obtidos para os casos teste nos quais tanto a distribuição de partida quanto a distribuição aproximadora é gerada por uma soma ponderada de distribuições gama. Nos casos em que a distribuição de partida é gerada por somas ponderadas de distribuições definidas em domínio semi-infinito, foi necessária uma transformação de variáveis visando melhor desempenho do algoritmo de otimização global em achar um mínimo para a função objetivo.

Como, nestes casos, a busca teria que ocorrer em um domínio semi-infinito, trabalhar com as variáveis neste domínio seria impraticável, aumentando em demasia o tempo de otimização ou ainda inviabilizando esta. A proposta de restrição do domínio é dada segundo as Equações 4.2 e 4.3. Cabe ressaltar que a transformação de variáveis foi feita apenas nos pontos de colocação  $\xi_\alpha$  e nas larguras de banda  $\sigma_\alpha$ ,

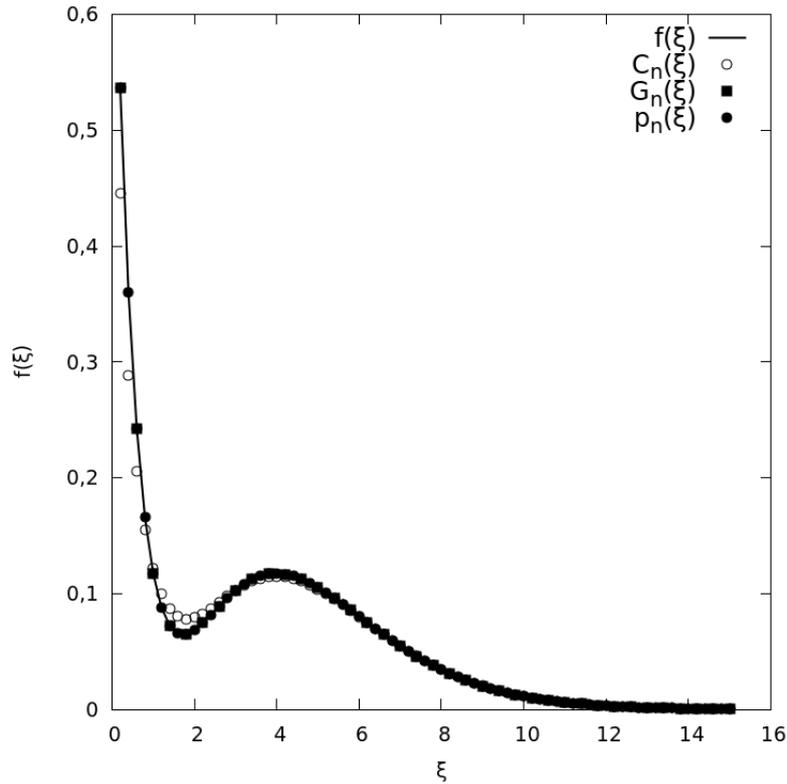
uma vez que os coeficientes de ponderação, por serem normalizados, já tem domínio definido  $[0,1]$ .

$$\xi_\alpha^* = e^{-\xi_\alpha} \quad \xi_\alpha = -\ln(\xi_\alpha^*) \quad (4.2)$$

$$\sigma_\alpha^* = e^{-\sigma_\alpha} \quad \sigma_\alpha = -\ln(\sigma_\alpha^*) \quad (4.3)$$

Em decorrência da transformação acima, tanto os pontos colocação quanto larguras de banda ficam restritas ao domínio  $[0,1]$ .

## 4.2.1 Estimativa Inicial: EQMOM



**Figura 4.14:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 4 KDFs beta aproximada por 4 KDFs beta respectivamente.

A Figura 4.14 permite constatar que a curva correspondente à estimativa inicial gerada pelo EQMOM ( $C_n(\xi)$ ) é bastante fiel a distribuição de partida. A otimização, contudo, melhora a aproximação, sobretudo para valores pequenos de  $\xi$ .

**Tabela 4.28:** Tabela de Parâmetros: Caso G2G2EqmCRS

V. de Partida			Estimativa Inicial			Global			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,4000	0,5000	0,5000	0,4263	0,6497	0,9774	0,4000	0,5000	0,5000	0,4000	0,5000	0,5000
0,6000	5,0000	1,0000	0,5737	5,0947	0,9774	0,6000	5,0000	1,0000	0,6000	5,0000	1,0000

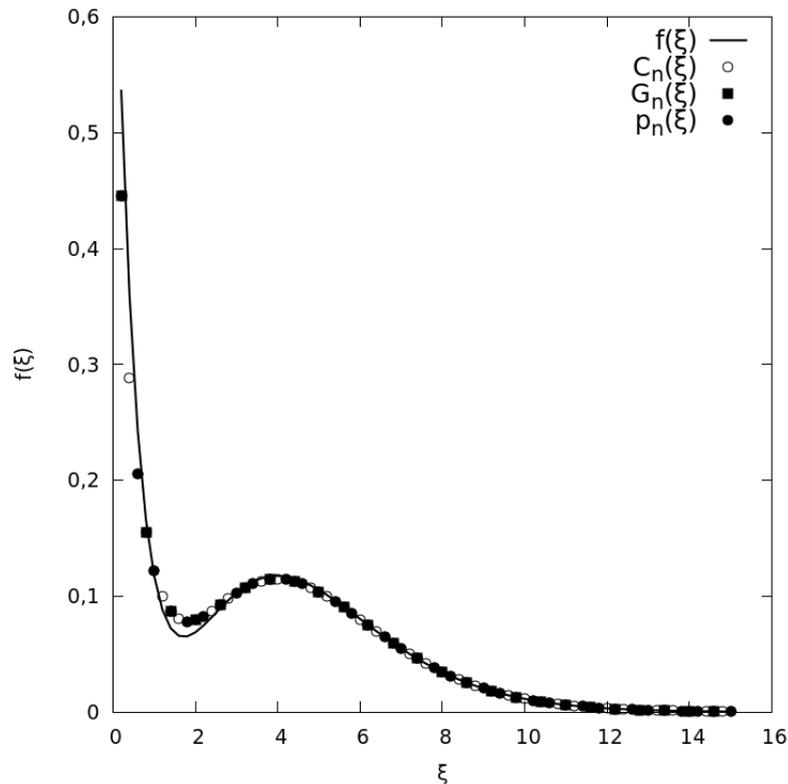
A Tabela 4.28 permite observar que os parâmetros de saída do método são iguais aos valores de partida, devido ao pequeno número de parâmetros submetidos à otimização.

**Tabela 4.29:** Informações adicionais: Caso G2G2EqmCRS

Tempo de cálculo	3,856260e-01 s
Mínimo global	7,239887e-11
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta nos parâmetros atingida.
Mínimo local	2,375730e-11
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações CRS	68721
Número de avaliações BOBYQA	324

A Tabela 4.29 mostra que tanto o tempo de cálculos quanto o valor atingido pela função objetivo foram bem pequenos para este caso.

Novamente, foi feita a comparação entre o presente método e a proposta do EQMOM de reprodução dos  $2n+1$  primeiros momentos da distribuição. O resultado desta comparação é mostrado na Figura 4.15.

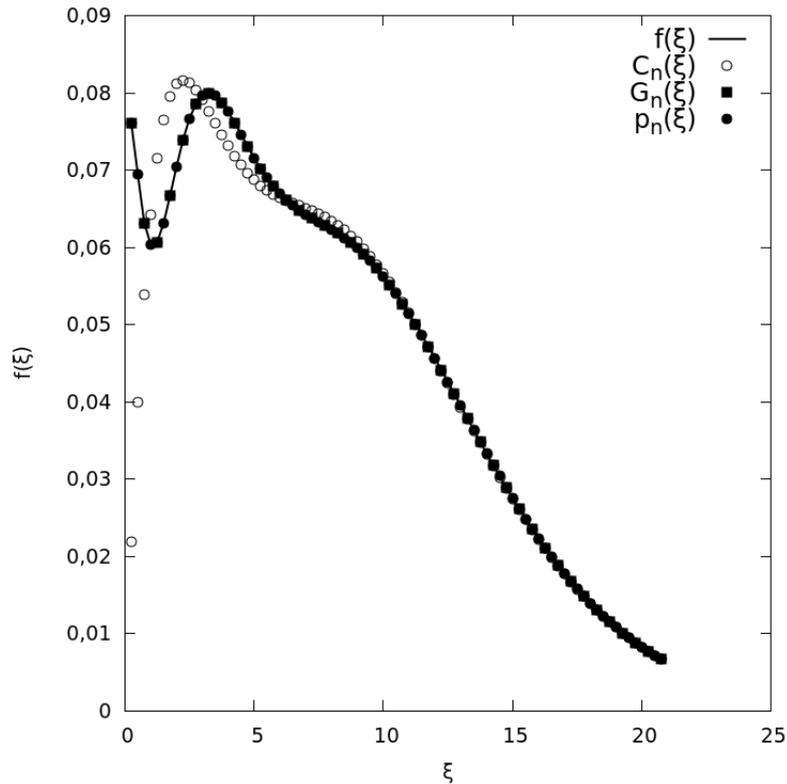


**Figura 4.15:** Comparação entre o presente método e o EQMOM na geração de uma aproximação empregando os  $2n + 1$  primeiros momentos.

A conclusão que se chega é similar ao que fora apontado para o caso B2B2EqmCRS. Ambos os métodos reproduzem bem os  $2n + 1$  primeiros momentos da distribuição. Logo, a vantagem de se trabalhar com  $3n$  momentos reside na melhor caracterização da distribuição, pois mais momentos são empregados.

A seguir, estão presentes os resultados para o caso G3G3EqmCRS.

A Figura 4.16 mostra que a estimativa inicial gerada pelo EQMOM não é tão boa quanto no caso anterior. A otimização apresenta papel de grande importância na reconstrução da distribuição.



**Figura 4.16:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 3 KDFs gama aproximada por 3 KDFs gama respectivamente.

**Tabela 4.30:** Tabela de Parâmetros: Caso G3G3EqmCRS

V. de Partida			Estimativa Inicial			Global			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,1000	1,0000	0,8000	0,0204	0,0000	1,9642	0,1000	1,0000	0,8000	0,1000	1,0000	0,8000
0,3000	4,0000	1,0000	0,4349	4,0264	1,9642	0,3000	4,0000	1,0000	0,3000	4,0000	1,0000
0,6000	11,0000	2,0000	0,5447	11,2883	1,9642	0,6000	11,0000	2,0000	0,6000	11,0000	2,0000

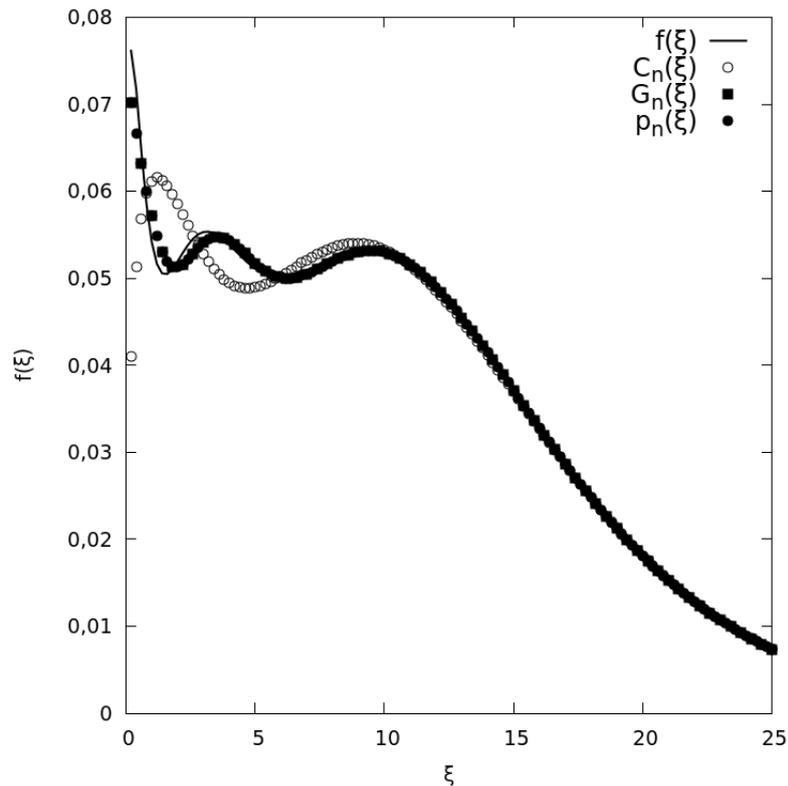
A Tabela 4.30 complementa, mediante análise dos valores, o que pode ser visualizado na Figura 4.16. O EQMOM zera um dos pontos de colocação, mostrando que, apesar de ser uma boa inicialização para muitos casos, não o é para este.

**Tabela 4.31:** Informações adicionais: Caso G3G3EqmCRS

Tempo de cálculo	2,875466e+01 s
Mínimo global	1,852439e-14
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta nos parâmetros atingida.
Mínimo local	1,284460e-14
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações CRS	2001245
Número de avaliações BOBYQA	192

Tendo em vista o número não tão grande de parâmetros, o tempo de cálculos ainda não é tão grande neste caso, como pode ser visto na Tabela 4.31. O valor atingido pela função objetivo é muito próximo de zero. É importante, nos casos

envolvendo a KDF gama, atentar para o critério de saída da otimização global. O motivo disto será discutido adiante.



**Figura 4.17:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 4 KDFs gama aproximada por 4 KDFs gama, respectivamente.

A análise das Figuras 4.16 e 4.17 guardam algumas semelhanças. Novamente, a estimativa inicial gerada pelo EQMOM se mostra falha em representar fielmente a distribuição de partida.

**Tabela 4.32:** Tabela de Parâmetros: Caso G4G4EqmCRS

V. de Partida			Estimativa Inicial			Global			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,1000	1,0000	0,8000	0,0100	0,0000	2,6582	0,0704	4,2632	0,5781	0,0704	4,2632	0,5781
0,2000	4,0000	1,0000	0,3193	3,8102	2,6582	0,2681	3,5846	3,5625	0,2681	3,5846	3,5625
0,3000	11,0000	2,0000	0,6235	12,8137	2,6582	0,2628	11,2514	1,9597	0,2628	11,2514	1,9597
0,4000	15,0000	3,0000	0,0471	21,0859	2,6582	0,3988	15,0027	2,9999	0,3988	15,0027	2,9999

**Tabela 4.33:** Informações adicionais: Caso G4G4EqmCRS

Tempo de cálculo	1,686324e+04 s
Mínimo global	2,102292e-10
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta nos parâmetros atingida.
Mínimo local	2,102292e-10
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações CRS	573311465
Número de avaliações BOBYQA	187

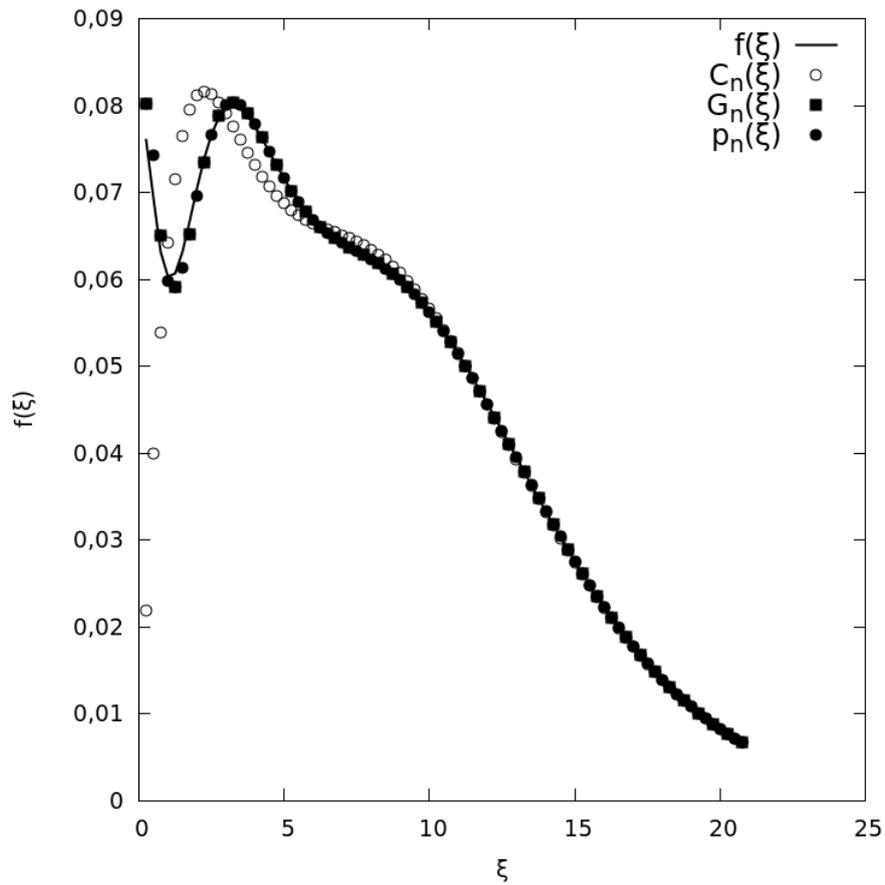
Os casos G3G3EqmCRS e G4G4EqmCRS mostram, através das Tabelas 4.30 e 4.32, que a estimativa do EQMOM é bastante falho, pois ele zera um dos pontos de colocação. O papel da otimização é essencial para melhorar a aproximação gerada pelo EQMOM. O caso G4G4EqmCRS ainda possui um agravante, ocasionado pelos maiores coeficientes de ponderação estarem ponderando as distribuições com maiores valores de pontos de colocação. Esta é uma das causa da boa representação da cauda da distribuição em detrimento de sua região inicial. É importante comentar que, dependendo da quantidade de momentos (e portanto do número de parâmetros) da distribuição gama empregados, os valores destes momentos podem se tornar muito grandes em ordem de magnitude. Um exemplo é dado abaixo, na Tabela 4.34 utilizando os momentos gerados para o caso G4G4EqmCRS.

**Tabela 4.34:** Momentos da KDF gama

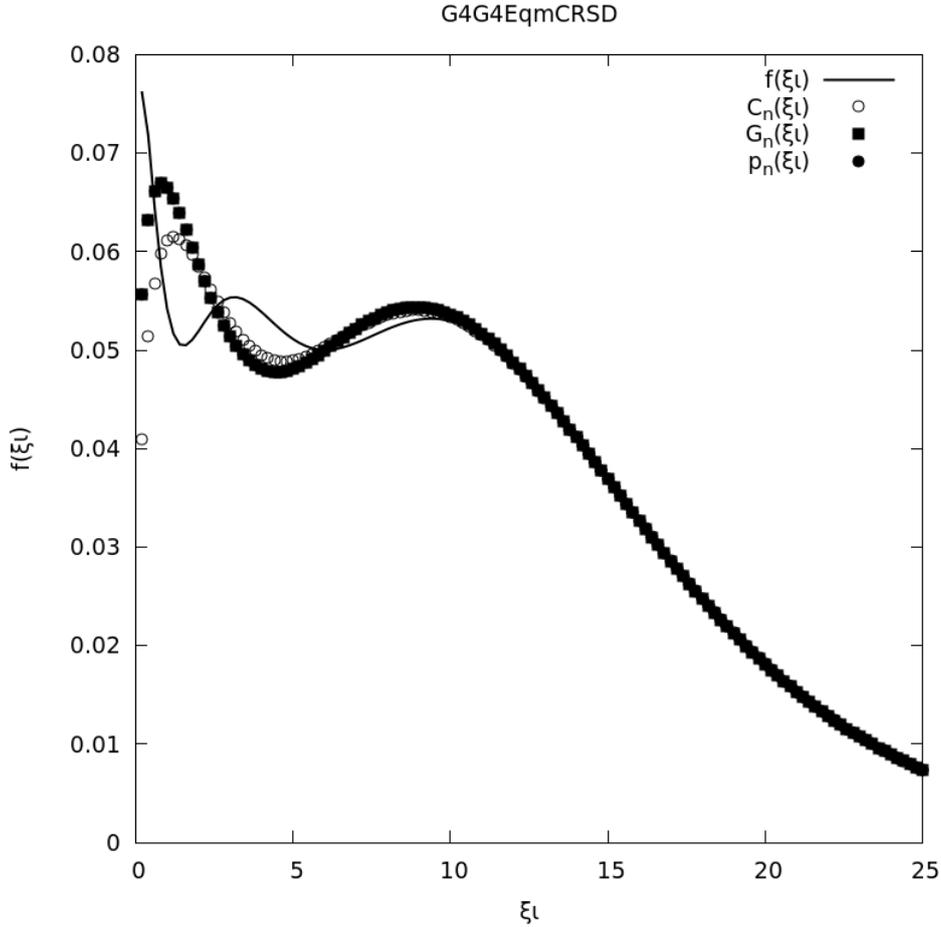
$k$	$m_k$
$m_0$	1,000000e+00
$m_1$	1,020000e+01
$m_2$	1,550800e+02
$m_3$	2,935968e+03
$m_4$	6,554109e+04
$m_5$	1,678865e+06
$m_6$	4,846691e+07
$m_7$	1,555480e+09
$m_8$	5,488995e+10
$m_9$	2,110555e+12
$m_{10}$	8,776189e+13
$m_{11}$	3,921766e+15

Esta discrepância entre os valores dos momentos soma-se ao fato dos maiores coeficientes de ponderação estarem associados a KDFs com os maiores pontos de colocação e gera uma distribuição de partida bem difícil de ser recuperada. A análise da Tabela 4.33 mostra que o tempo gasto foi bastante grande, assim como o número de avaliações da função objetivo e, mesmo assim, a otimização ainda não conseguiu reproduzir da melhor forma a distribuição de partida, apesar da evidente melhora. Deve-se chamar atenção para outro fator importante que é o papel das tolerâncias relativa e absoluta especificada nos parâmetros a serem otimizados. Foi constatado neste trabalho que a rotina de otimização global atingia com facilidade a tolerância relativa e absoluta na função objetivo apesar de ambas serem especificadas na ordem de  $10^{-15}$ , principalmente para os casos envolvendo a distribuição gama. O mesmo não foi observado em relação aos parâmetros. Apesar do critério imposto na função objetivo ser bastante rigoroso, situações em que a saída da otimização pelas tolerâncias nos parâmetros não foi forçada, a aproximação gerada não foi boa. As Figuras 4.18 e 4.19 abaixo mostram os casos em que a otimização atingiu o critério

de saída de tolerância relativa ou absoluta na função objetivo de  $10^{-15}$ .



**Figura 4.18:** Falha na reconstrução da distribuição para valores pequenos de  $\xi$ .



**Figura 4.19:** Um dos pontos de colocação é zerada pelo EQMOM. Como o critério de tolerâncias na função objetivo é atingido preferencialmente, a reconstrução se mostra falha.

Uma explicação razoável que se levanta a respeito do motivo pelo qual a otimização pára por conta de restrições na função objetivo e não nos parâmetros tem como base a ordem de grandeza dos momentos da distribuição gama. Como fora mostrado na Equação 3.31, o que se busca minimizar é o somatório dos erros relativos aos momentos de diferentes ordens. Como os momentos de maior ordem da KDF gama são muito grandes em magnitude se comparados aos momentos iniciais, ou seja, os de menor ordem, os momentos superiores tendem a ser melhor ajustados que os inferiores devido à sua importância no cálculo da função objetivo. Sendo assim, os erros relativos aos momentos de maior ordem são praticamente zerados, enquanto os de menor ordem não, o que leva a função objetivo a assumir um valor praticamente constante ao longo das iterações. É importante ressaltar ainda a importância do vetor  $\mathbf{p}$  citado no Capítulo 3. Pode-se observar com o auxílio da Tabela 4.34 como os momentos da KDF gama crescem em magnitude conforme se aumenta a ordem dos momentos. O intuito do vetor  $\mathbf{p}$ , conforme já citado, é penalizar os momentos de maior ordem, de forma que estes não sejam tão discrepantes, em valor, dos de menor ordem. A Figura 4.20 abaixo busca ilustrar o papel desempenhado pelo vetor

p.

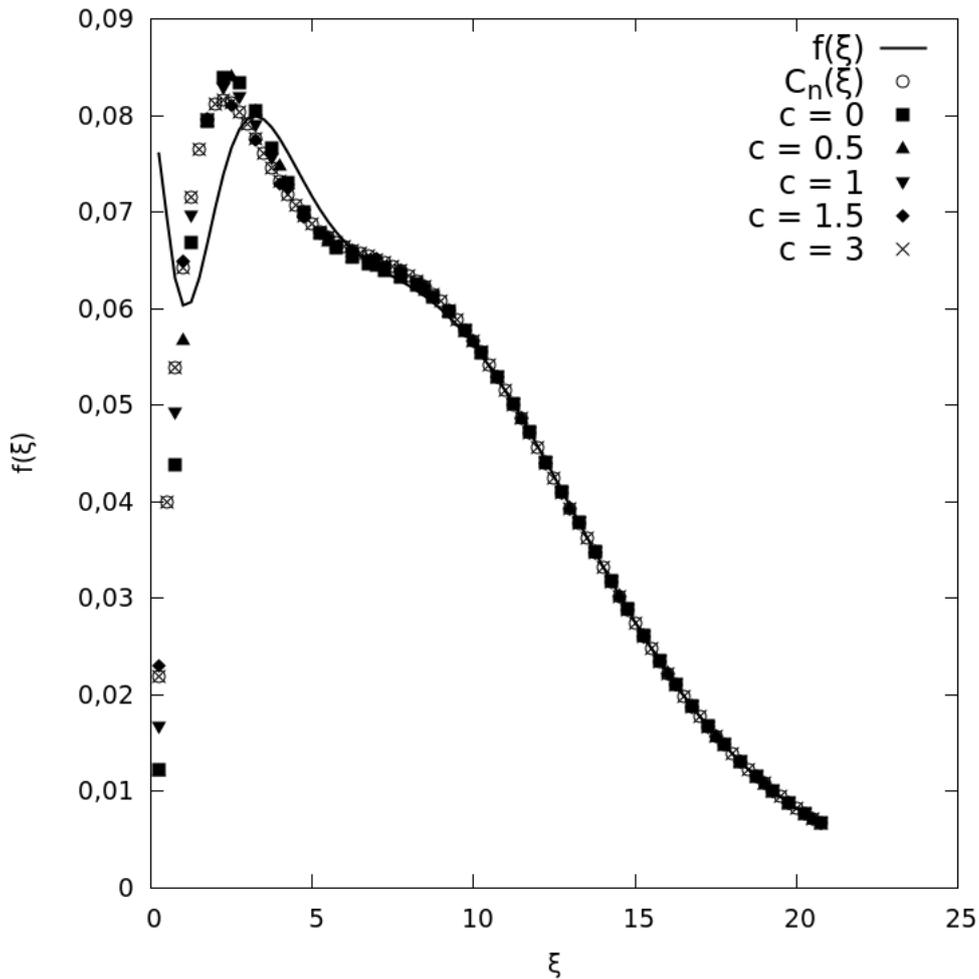
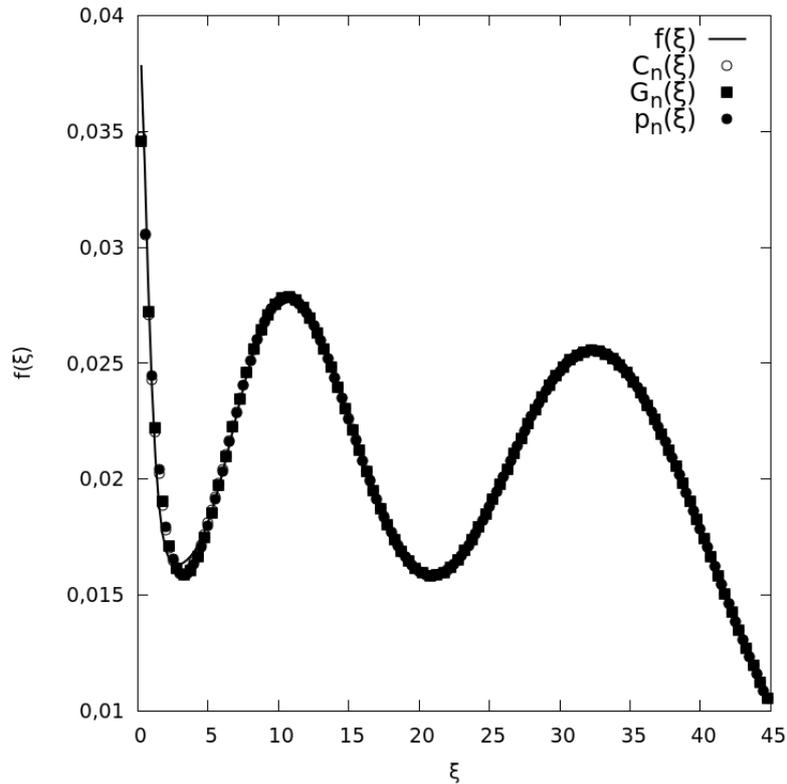


Figura 4.20: Papel desempenhado pelo vetor de ponderação  $\mathbf{p}$  no caso G3G3EqmCRS.

Pode-se observar através da análise da Figura 4.20 que, conforme se aumenta o valor da constante  $c$ , a aproximação resultante vai caminhando em direção à aproximação gerada pelo EQMOM. Quando  $c = 3$ , pode-se observar que as curvas  $C_n$  e  $c = 3$  são sobrepostas. Isto mostra que, para este caso, a ponderação dos momentos não auxilia na geração de uma melhor aproximação da distribuição.

Apesar deste caso conter mais parâmetros que o G4G4EqmCRS, a estimativa inicial proveniente do EQMOM é bom, como mostra a Figura 4.21. Nota-se novamente a dificuldade de gerar uma distribuição reconstruída que se sobreponha a distribuição de partida para pequenos valores da variável interna. Mais uma vez, a cauda é muito bem aproximada.



**Figura 4.21:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 5 KDFs gama aproximada por 5 KDFs gama respectivamente.

**Tabela 4.35:** Tabela de parâmetros: Caso G5G5EqmCRS

V. de Partida			Estimativa Inicial			Global			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,0500	1,0000	0,8000	0,0772	1,9742	2,0008	0,0762	1,9372	1,9371	0,0762	1,9372	1,9371
0,0500	4,0000	1,0000	0,0902	7,5753	2,0008	0,0890	7,5747	2,0860	0,0890	7,5747	2,0860
0,1000	11,0000	2,0000	0,2675	13,5058	2,0008	0,2670	13,4054	2,0097	0,2670	13,4054	2,0097
0,3000	15,0000	3,0000	0,0628	21,1441	2,0008	0,0654	20,9820	2,0017	0,0654	20,9820	2,0017
0,5000	35,0000	2,0000	0,5024	34,9851	2,0008	0,5024	34,9851	2,0008	0,5024	34,9851	2,0008

As Tabelas 4.32 e 4.35 mostram que os parâmetros de saída são bastante diferentes dos parâmetros originais, apesar do valor da função objetivo ser pequeno em ambos os casos. Novamente, isto ocorre devido a possibilidade de diversas distribuições diferentes poderem apresentar o mesmo conjunto truncado de momentos.

**Tabela 4.36:** Informações adicionais: Caso G5G5EqmCRS

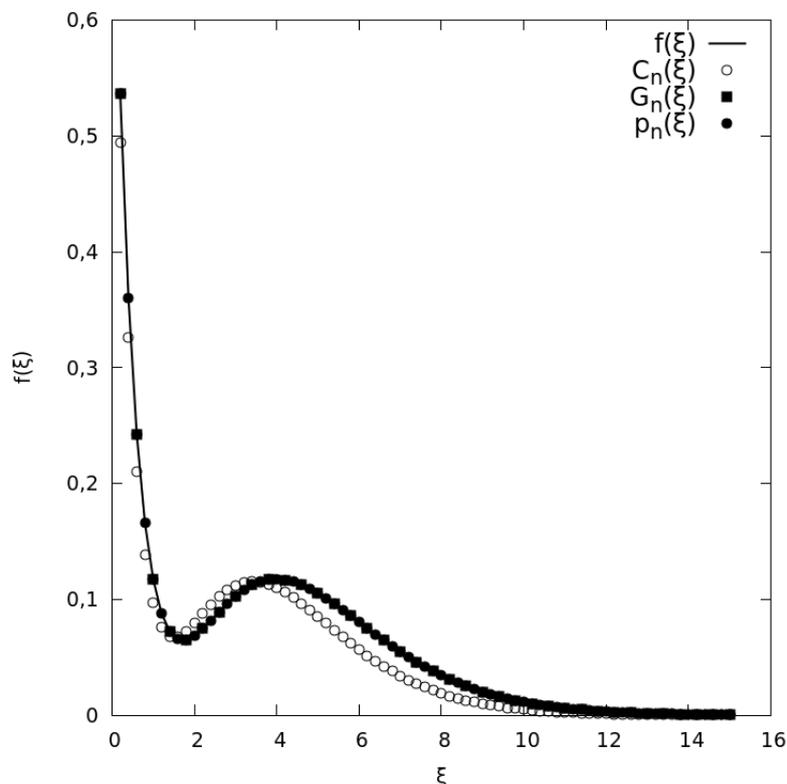
Tempo de cálculo	1,550095e+03 s
Mínimo global	2,114261e-09
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Mínimo local	2,114092e-09
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações CRS	30186739
Número de avaliações BOBYQA	274

Pode-se ainda observar através da análise dos casos G4G4EqmCRS, Tabela 4.33

e G5G5EqmCRS, Tabela 4.36 que o tempo de cálculo do G4G4EqmCRS foi bastante superior ao do caso G5G5EqmCRS. Uma hipótese que pode justificar essa discrepância entre os tempos de cálculo é que, como a distribuição mostrada no caso G4G4EqmCRS é bastante complexa para valores pequenos da variável interna, o otimizador realiza muito mais iterações até que os valores parâmetros das KDFs de menores pontos de colocação atinjam o critério necessário para a convergência.

## 4.2.2 Estimativa Inicial: Perturbação Randômica

Esta seção visa mostrar os resultados obtidos quando se perturba aleatoriamente os valores dos parâmetros de entrada entre 0 e 20%, trabalhando com a KDF gama.



**Figura 4.22:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 2 KDFs gama aproximada por 2 KDFs gama respectivamente.

O perfil gerado com a perturbação randômica, apesar de não diferir muito do da distribuição de partida, apresenta certa defasagem em relação a esta, como pode ser visto na Figura 4.22.

**Tabela 4.37:** Tabela de parâmetros: Caso G2G2PerCRS

V. de Partida			Estimativa Inicial			Global			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,4000	0,5000	0,5000	0,3356	0,4479	0,4049	0,4000	0,5000	0,5000	0,4000	0,5000	0,5000
0,6000	5,0000	1,0000	0,5229	4,3537	0,9180	0,6000	5,0000	1,0000	0,6000	5,0000	1,0000

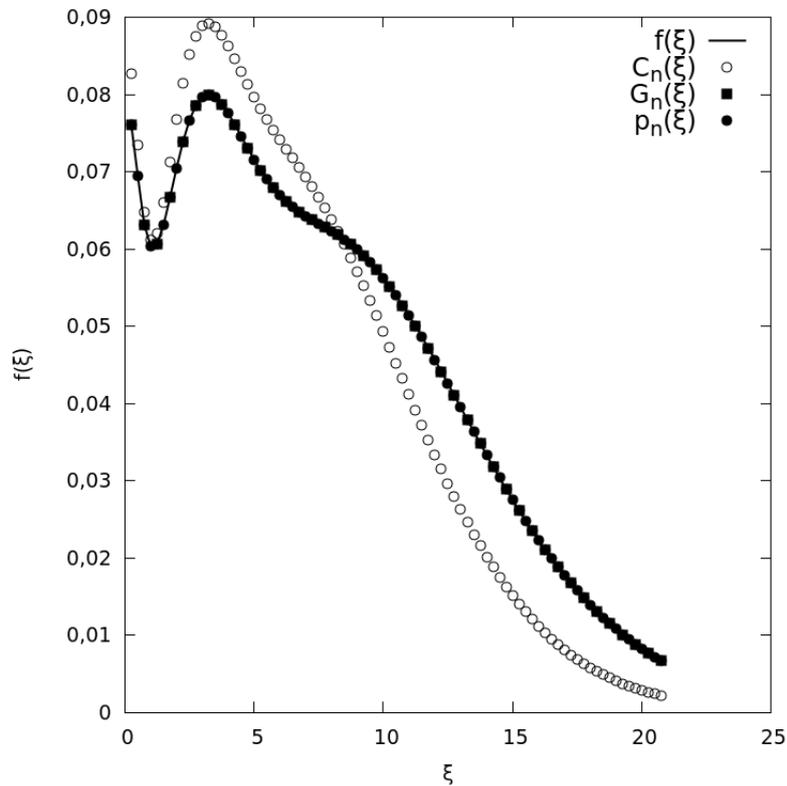
A análise da Tabela 4.37 mostra que, da mesma forma que com o EQMOM como estimativa inicial, os parâmetros de saída da otimização local conseguem se igualar aos da distribuição de partida devido ao baixo número de parâmetros a serem otimizados.

Em relação à Tabela 4.38 pode-se destacar o baixo valor final atingido pela função objetivo. O tempo, apesar de pequeno, é significativamente maior que o observado no caso da Tabela 4.29, sendo o mesmo observado para o número de avaliações da

**Tabela 4.38:** Informações adicionais: Caso G2G2PerCRS

Tempo de cálculo	2,246174e+01 s
Mínimo global	4,785336e-15
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta nos parâmetros atingida.
Mínimo local	3,805100e-15
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações CRS	2037960
Número de avaliações BOBYQA	165

função objetivo. Conforme já visto, isto decorre da maior defasagem em relação à distribuição de partida causada por esta estimativa inicial, se comparada com o EQMOM.



**Figura 4.23:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 3 KDFs gama aproximada por 3 KDFs gama respectivamente.

**Tabela 4.39:** Tabela de parâmetros: Caso G3G3PerCRS

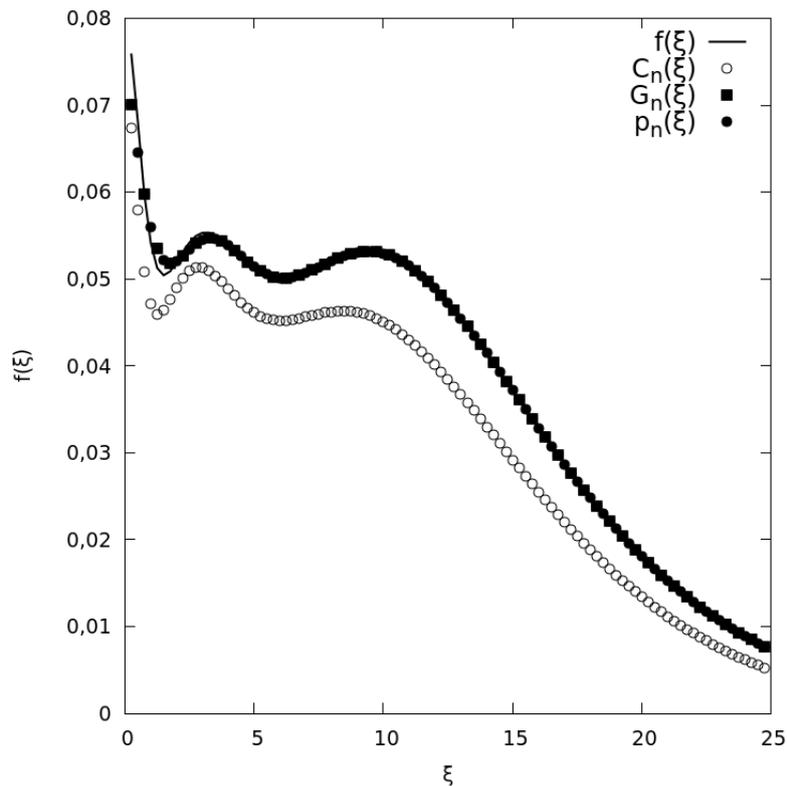
V. de Partida			Estimativa Inicial			Global			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,1000	1,0000	0,8000	0,0957	0,8620	0,6560	0,1000	1,0000	0,8000	0,1000	1,0000	0,8000
0,3000	4,0000	1,0000	0,2764	3,5929	0,8303	0,3000	4,0000	1,0000	0,3000	4,0000	1,0000
0,6000	11,0000	2,0000	0,5486	9,1147	1,7184	0,6000	11,0000	2,0000	0,6000	11,0000	2,0000

De forma semelhante ao caso mostrado na Tabela 4.37, os valores de saída são novamente igualados aos de partida, como mostra a Tabela 4.39.

**Tabela 4.40:** Informações adicionais: Caso G3G3PerCRS

Tempo de cálculo	2,246174e+01 s
Mínimo global	4,785336e-15
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta nos parâmetros atingida.
Mínimo local	3,805100e-15
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações CRS	2037960
Número de avaliações BOBYQA	165

A Tabela 4.40 mostra que o tempo de cálculos não foi muito grande e que o valor final da função objetivo é quase zero.



**Figura 4.24:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 4 KDFs gama aproximada por 4 KDFs gama respectivamente.

A Figura 4.24 mostra novamente a defasagem causada pela estimativa inicial. É importante observar, contudo, que para valores pequenos da variável interna, a curva gerada pela perturbação, apesar de defasada, não é tão discrepante quanto a mesma para o caso do EQMOM (Figura 4.17), que zera um dos pontos de colocação. Isto terá algumas consequências para a otimização, que serão complementadas a seguir.

A Tabela 4.41 mostra, mais uma vez, que a diferença exibida pelos valores de saída da otimização local em relação aos valores de partida não implica na má representação da distribuição de partida.

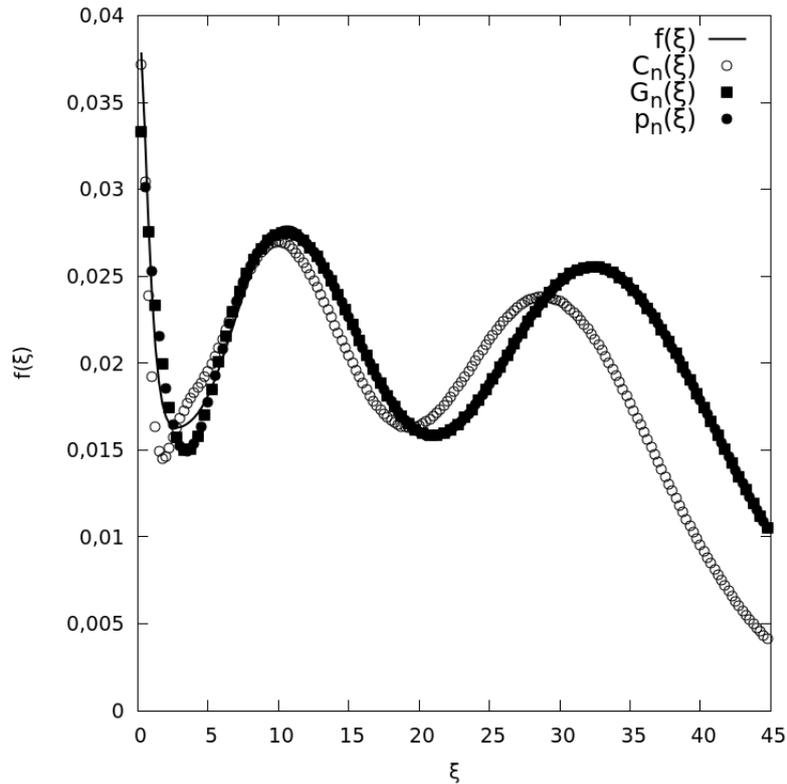
**Tabela 4.41:** Tabela de parâmetros: Caso G4G4PerCRS

V. de Partida			Estimativa Inicial			Global			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0.1000	1.0000	0.8000	0.0811	0.9181	0.7877	0.2088	2.6769	2.6356	0.2088	2.6769	2.6356
0.2000	4.0000	1.0000	0.1737	3.7006	0.9673	0.1022	4.2667	0.7576	0.1022	4.2667	0.7576
0.3000	11.0000	2.0000	0.2572	9.6779	1.8609	0.2884	11.0881	1.9876	0.2884	11.0881	1.9876
0.4000	15.0000	3.0000	0.3286	14.6920	2.5671	0.4006	14.9960	3.0002	0.4006	14.9960	3.0002

**Tabela 4.42:** Informações adicionais: Caso G4G4PerCRS

Tempo de cálculo	1,122741e+03 s
Mínimo global	2,411490e-12
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta nos parâmetros atingida.
Mínimo local	2,411459e-12
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações CRS	39825109
Número de avaliações BOBYQA	193

A análise da Tabela 4.42, se comparada com a Tabela 4.33, permite constatar que, apesar da defasagem causada pela perturbação ser bem pronunciada, o tempo de cálculos para este caso ainda é menor que o mesmo obtido quando se emprega o EQMOM. Isto ocorre porque atingir o critério estabelecido de tolerância nos parâmetros se torna mais fácil, pois a perturbação não altera tanto a região inicial da distribuição de partida quanto o EQMOM. O número de avaliações da função objetivo também é menor. O valor final da função objetivo também é menor que no caso análogo empregando o EQMOM.



**Figura 4.25:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 5 KDFs gama aproximada por 5 KDFs gama respectivamente.

A Figura 4.25 mostra que a perturbação gera um perfil de estimativa inicial bastante diferente do da distribuição de partida, sobretudo na região inicial (baixos valores de  $\xi$ ) desta. A otimização melhora bastante a aproximação.

**Tabela 4.43:** Tabela de parâmetros: Caso G5G5PerCRS

V. de Partida			Estimativa Inicial			Global			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0.0500	1.0000	0.8000	0.0412	0.8211	0.6620	0.1118	3.2272	3.3543	0.1118	3.2272	3.3543
0.0500	4.0000	1.0000	0.0487	3.8298	0.8158	0.0567	7.5959	0.9186	0.0567	7.5959	0.9186
0.1000	11.0000	2.0000	0.0910	9.5576	1.8291	0.2932	14.1096	1.9513	0.2932	14.1096	1.9513
0.3000	15.0000	3.0000	0.2752	14.2103	2.6352	0.0350	23.3326	1.6278	0.0350	23.3326	1.6278
0.5000	35.0000	2.0000	0.4021	31.3248	1.7176	0.5033	34.9786	2.0011	0.5033	34.9786	2.0011

A Tabela 4.43 permite perceber o impacto da perturbação nos valores de partida.

**Tabela 4.44:** Informações adicionais: Caso G5G5PerCRS

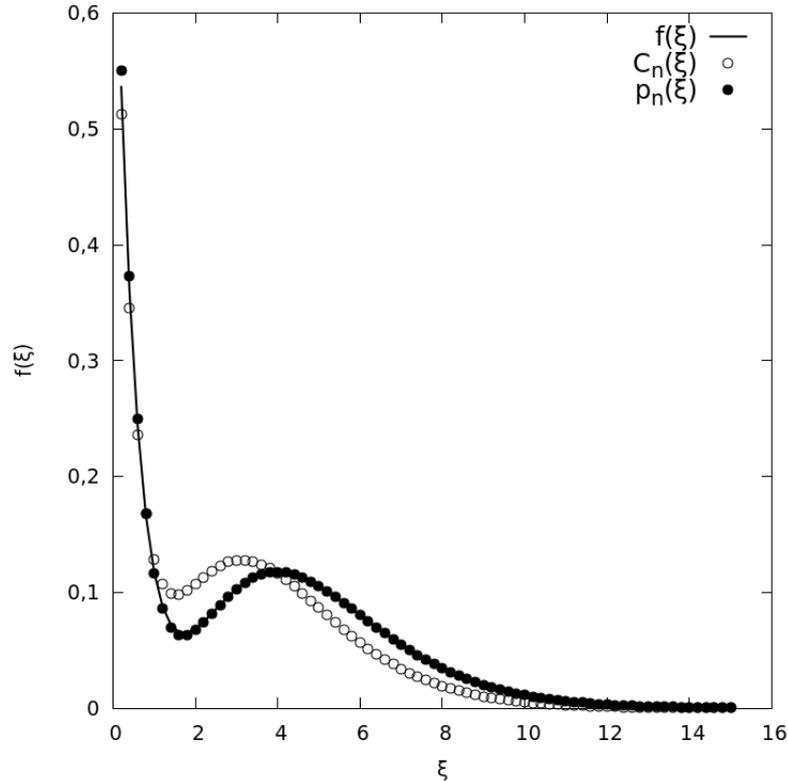
Tempo de cálculo	4,997571e+03 s
Mínimo global	1,634522e-10
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta nos parâmetros atingida.
Mínimo local	1,634462e-10
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações CRS	108782737
Número de avaliações BOBYQA	245

O que se pode concluir da análise dos gráficos apresentados nesta seção, através

das Figuras 4.22, 4.23, 4.24 e 4.25 apresenta algumas similaridades e importantes diferenças em relação ao que se observou para os casos análogos envolvendo a KDF beta. A perturbação como estimativa inicial altera bastante o perfil da distribuição mas a otimização consegue melhorar visivelmente o perfil da curva gerada. As aproximações geradas, contudo, não foram tão boas de forma geral, para os casos envolvendo a gama como foram para os casos envolvendo a beta. O motivo disto já foi explicado: os casos apresentam coeficientes de ponderação de maior valor em KDFs com pontos de colocação também grandes, gerando casos difíceis e que dificilmente corresponderiam a distribuições reais. Além disso, a discrepância existente entre os momentos de maior e menor ordem corrobora também para dificultar a aproximação do início da distribuição. Pode-se notar novamente a dificuldade de aproximar a distribuição para valores pequenos da variável interna.

### 4.2.3 Perturbação Randômica e Otimização Local

Nesta seção serão mostrados os resultados obtidos perturbando aleatoriamente as variáveis de entrada e empregando apenas a otimização local.



**Figura 4.26:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 2 KDFs gama aproximada por 2 KDFs gama respectivamente.

A Figura 4.26 evidencia a defasagem causada pela perturbação e posterior melhora na aproximação, empregando apenas o otimizador local.

**Tabela 4.45:** Tabela de parâmetros: Caso G2G2PerL

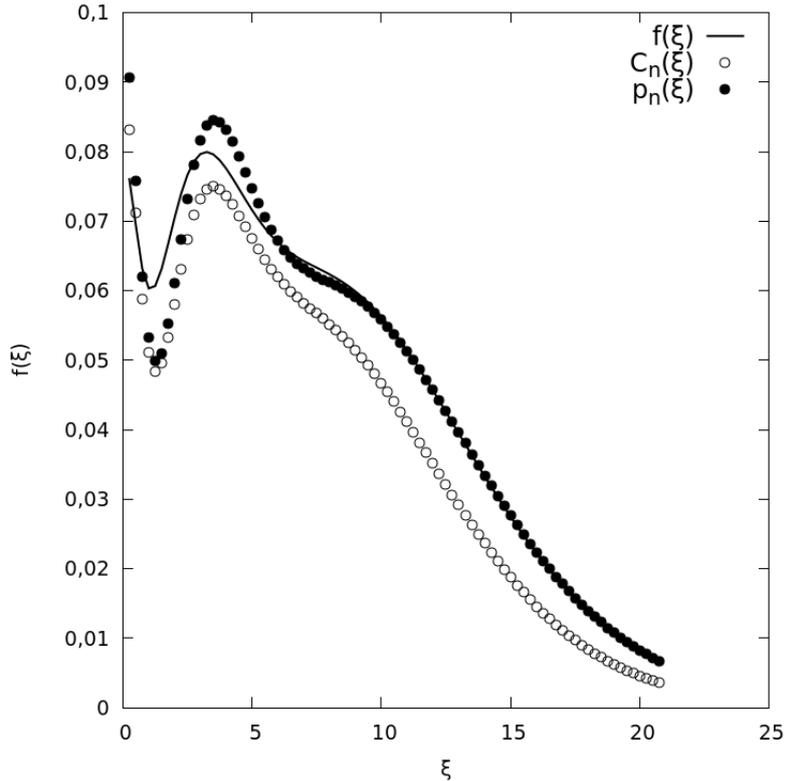
V. de Partida			Estimativa Inicial			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,4000	0,5000	0,5000	0,3752	0,4898	0,4785	0,3982	0,4896	0,4578
0,6000	5,0000	1,0000	0,5804	4,1765	0,9932	0,6018	4,9934	1,0015

É possível constatar através da Tabela 4.45 e da Figura 4.26 que a otimização local desempenha bom papel na aproximação da distribuição de partida, em um tempo relativamente pequeno. A Tabela 4.45 ainda mostra que, ao contrário do que é observado em casos que se emprega o CRS, os valores de saída não são iguais aos de partida, devido a menor capacidade do otimizador local varrer adequadamente o espaço de busca que o global, ficando restrito a uma região menos abrangente deste e mais próxima da estimativa inicial.

**Tabela 4.46:** Informações adicionais: Caso G2G2PerL

Tempo de cálculo	3,770200e-01 s
Mínimo local	5,019791e-06
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações BOBYQA	51025

A análise da Tabela 4.46 mostra que tanto o tempo de cálculos quanto o número de iterações são razoavelmente pequenos.



**Figura 4.27:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 3 KDFs gama aproximada por 3 KDFs gama respectivamente.

A Figura 4.27 mostra a dificuldade apresentada pela otimização local em aproximar de forma adequada o início da distribuição. É possível notar que a região inicial é mais próxima, visualmente, da curva gerada pela estimativa inicial que da distribuição de partida. A cauda da distribuição é melhor aproximada, devido a questão já apresentada do peso exibido pelos momentos de maior ordem de KDFs gama no cálculo da função objetivo.

A Tabela 4.47 complementa o que foi dito anteriormente a respeito da estimativa inicial.

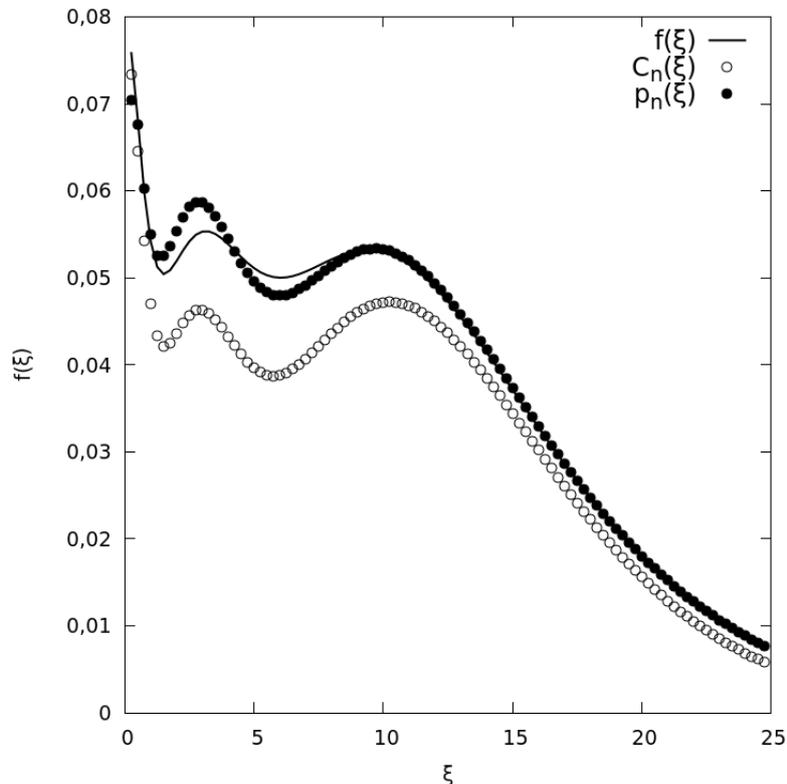
**Tabela 4.47:** Tabela de parâmetros: Caso G3G3PerL

V. de Partida			Estimativa Inicial			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,1000	1,0000	0,8000	0,0951	0,8477	0,6501	0,1092	0,9064	0,7491
0,3000	4,0000	1,0000	0,2468	3,8882	0,8051	0,2812	4,0096	0,7526
0,6000	11,0000	2,0000	0,5004	10,0938	1,8653	0,6096	10,9473	2,0069

**Tabela 4.48:** Informações adicionais: Caso G3G3PerL

Tempo de cálculo	1,333745e+00
Mínimo local	1,105690e-05
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações BOBYQA	79582

A Tabela 4.48 indica tempos de cálculo novamente razoavelmente pequeno.



**Figura 4.28:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 4 KDFs gama aproximada por 4 KDFs gama respectivamente.

A Figura 4.28 mostra que, apesar da defasagem gerada pela estimativa inicial, a aproximação obtida é bastante razoável, salvo sua região inicial.

Fica evidente, através da Tabela 4.49 e da Figura 4.28 que o algoritmo de otimização local apresenta dificuldades em aproximar de forma adequada a parte inicial da distribuição, uma vez que, conforme já discutido, esses casos são bastante problemáticos.

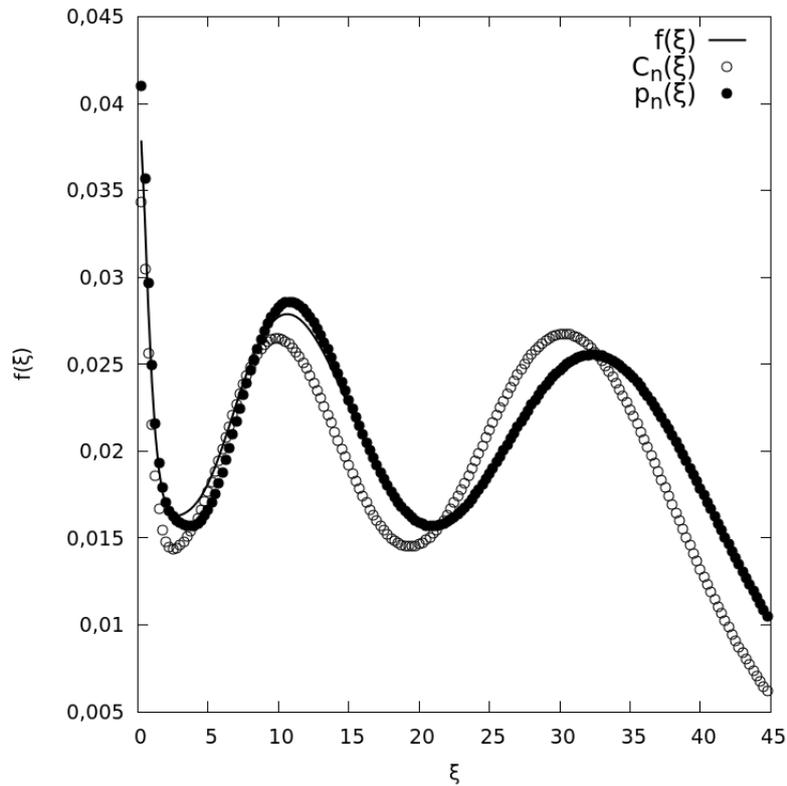
**Tabela 4.49:** Tabela de parâmetros: Caso G4G4PerL

V. de Partida			Estimativa Inicial			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,1000	1,0000	0,8000	0,0854	0,8623	0,6463	0,0897	0,9286	0,6401
0,2000	4,0000	1,0000	0,1659	3,7879	0,8895	0,2049	3,7247	0,8908
0,3000	11,0000	2,0000	0,2414	10,9889	1,8879	0,2286	10,7943	1,7836
0,4000	15,0000	3,0000	0,3628	14,5404	2,4342	0,4768	14,4418	3,0406

**Tabela 4.50:** Informações adicionais: Caso G4G4PerL

Tempo de cálculo	7,341928e+00 s
Mínimo local	8,605828e-06
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações BOBYQA	232038

A análise da Tabela 4.50 mostra que o tempo de cálculos e o número de iterações não foi muito grande.



**Figura 4.29:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 5 KDFs gama aproximada por 5 KDFs gama respectivamente.

A Figura 4.29 mostra que a aproximação gerada é boa em relação a estimativa inicial, apesar de conter mais parâmetros que os demais casos.

A Tabela 4.51 sugere que a boa aproximação gerada pela otimização local, como foi discutido anteriormente, pode ser decorrente da intensidade da perturbação causada neste caso.

**Tabela 4.51:** Tabela de parâmetros: Caso G5G5PerL

V. de Partida			Estimativa Inicial			Local		
$w_j$	$\xi_j$	$\sigma_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,0500	1,0000	0,8000	0,0448	0,9793	0,7651	0,0522	0,9617	0,7743
0,0500	4,0000	1,0000	0,0414	3,9348	0,9594	0,0487	3,8704	0,9499
0,1000	11,0000	2,0000	0,0880	10,5556	1,9030	0,0903	11,6505	1,6361
0,3000	15,0000	3,0000	0,2582	13,7137	2,7226	0,3085	14,7595	3,1070
0,5000	35,0000	2,0000	0,4728	32,4706	1,7149	0,5002	34,9942	2,0005

**Tabela 4.52:** Informações adicionais: Caso G5G5PerL

Tempo de cálculo	5,170828e+00 s
Mínimo local	5,537902e-06
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações BOBYQA	86393

A análise das Tabela 4.52 mostra que o tempo de cálculo foi razoavelmente pequeno.

Pode-se constatar que o papel da otimização local para casos empregando a KDF gama é muito dificultado pelo aumento da ordem de magnitude dos momentos. Isto gerou caudas, de modo geral, bem aproximadas em todos os casos e regiões iniciais menos fiéis às distribuições de partida. A robustez, neste caso, fica prejudicada por tais fatores.

### 4.3 Aproximação de outras distribuições por KDFs Beta e Gama

Esta seção se destina a mostrar os resultados obtidos quando o algoritmo foi utilizado para gerar aproximações de outras distribuições de partida que não combinações lineares de betas e gamas. Foram empregadas em domínio semi-infinito as distribuições Chi e a função exponencial e em domínio finito, a distribuição de Kumaraswamy, sendo que esta última apresenta semelhanças com a distribuição beta. Nesta seção, a única estimativa inicial utilizado foram os coeficientes de ponderação, pontos de colocação e larguras de banda provenientes da primeira quadratura do EQMOM.

Para evidenciar o quão bem a combinação de KDFs aproxima a distribuição de partida, emprega-se a métrica induzida pela norma  $\ell^2$ , dada segundo a Equação 4.4.

$$\|e\|_2 = \sqrt{\int [f(\xi) - p_n(\xi)]^2} \quad (4.4)$$

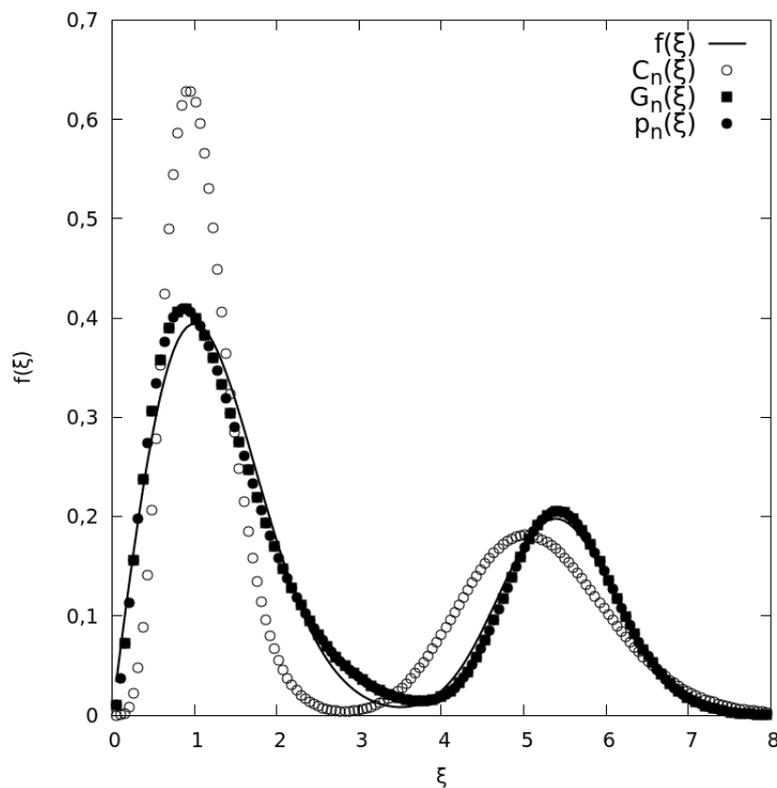
Nesta Equação,  $f(\xi)$  é a distribuição de partida e  $p_n(\xi)$  é a distribuição aproximante. A integral acima foi calculada mediante o uso de quadraturas de Gauss-

Legendre quando a distribuição em questão é definida em domínio finito e Gauss-Laguerre, quando a distribuição é definida em domínio semi-infinito. Foram empregados 50 pontos de quadratura para aproximar as integrais em cada caso, sendo este número suficiente para garantir a convergência da métrica da Equação 4.4 para os casos analisados.

### 4.3.1 Aproximações em domínio semi-infinito

#### Aproximação de distribuições Chi por KDFs Gama

Na seção a seguir, relembando a Tabela 3.1,  $c$  é o único parâmetro da distribuição Chi.



**Figura 4.30:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 2 distribuições Chi aproximada por 2 KDFs gama, respectivamente.

A análise da Figura 4.30 mostra que o EQMOM é bastante falho como estimativa inicial neste caso. A otimização se mostra essencial para tornar a aproximação gerada mais fiel à distribuição de partida

**Tabela 4.53:** Tabela de parâmetros: Caso C2G2EqmCRS

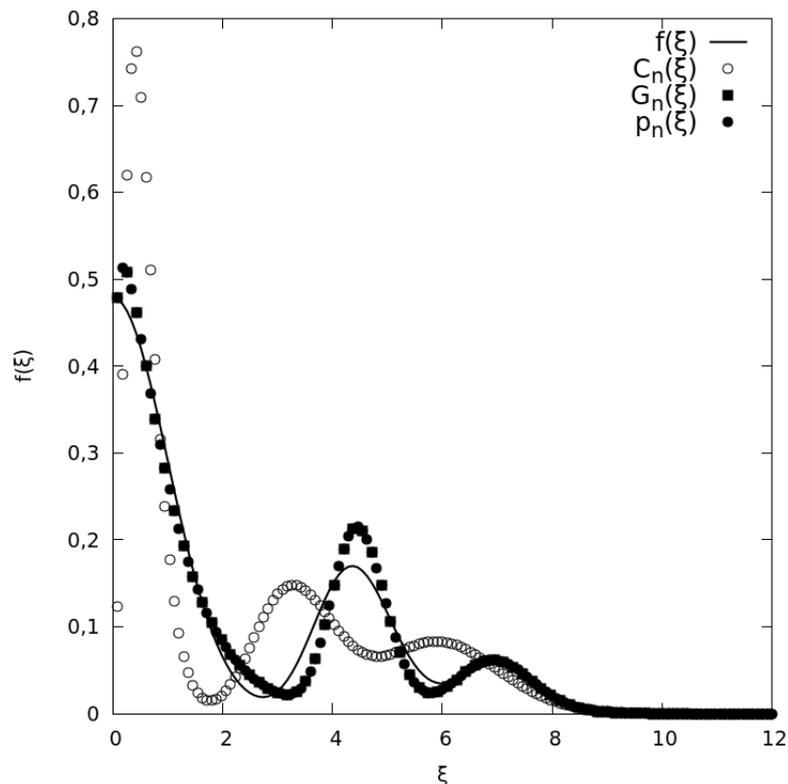
V. de Partida		Estimativa Inicial			Global			Local		
$w_j$	$c_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,6500	2,0000	0,6021	1,0871	0,1513	0,6645	1,3137	0,4420	0,6645	0,13137	0,4420
0,3500	30,0000	0,3979	5,1802	0,1513	0,3355	5,4931	0,0784	0,3355	5,4931	0,0784

A Tabela 4.53 ilustra os valores dos parâmetros em cada etapa presente no método.

**Tabela 4.54:** Informações adicionais: Caso C2G2EqmCRS

Tempo de cálculo	1,535871e+00 s
Mínimo global	2,489042e-14
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Mínimo local	2,271662e-14
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações CRS	280233
Número de avaliações BOBYQA	126

As Tabelas 4.54 e 4.53 permitem tirar algumas conclusões. O valor atingido pela função objetivo remete a teoria apresentada na seção de problema de momentos truncado. Neste capítulo, foi visto que quando se trabalha com um conjunto  $K$  finito de momentos, perde-se caracterização de distribuições. Em decorrência disso, diversas distribuições diferentes podem apresentar este mesmo conjunto  $K$  de momentos. O tempo de cálculos é razoavelmente pequeno.



**Figura 4.31:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 3 distribuições Chi aproximada por 3 KDFs gama, respectivamente.

A Figura 4.31 contém os perfis das curvas obtidos em cada etapa do método. Esta também evidencia a defasagem exibida pela curva gerada com a estimativa inicial, indicando que o EQMOM novamente se mostra falho.

A Tabela 4.55 mostra os parâmetros obtidos nas diferentes etapas do método.

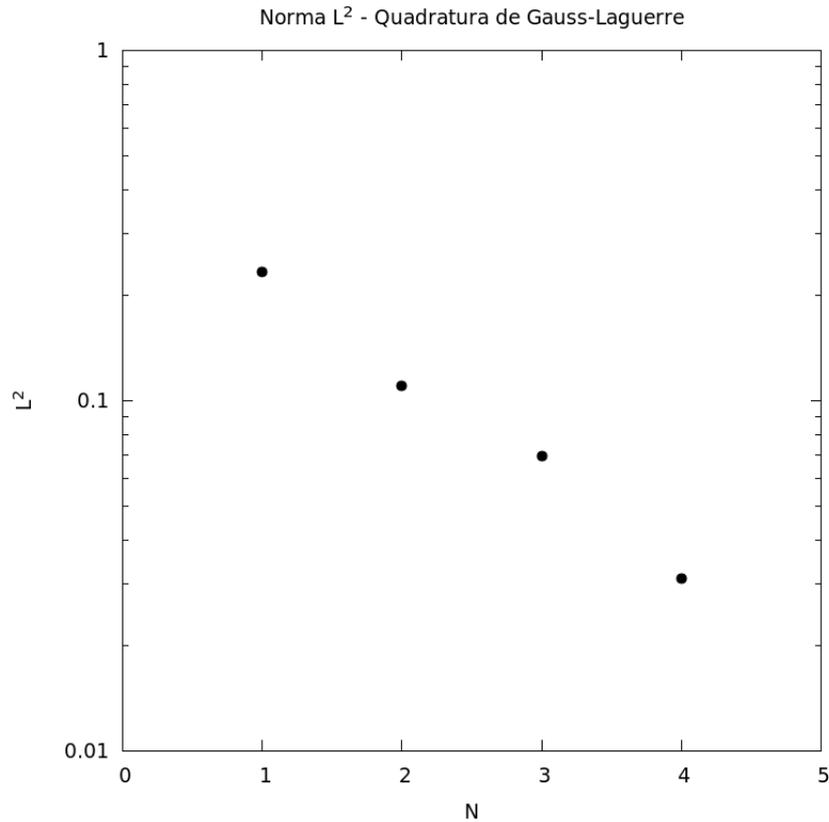
**Tabela 4.55:** Tabela de parâmetros: Caso C3G3EqmCRS

V. de Partida		Estimativa Inicial			Global			Local		
$w_j$	$c_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,6000	1,000	0,5186	0,5725	0,1688	0,6334	0,9303	0,7334	0,6334	0,9303	0,7334
0,3000	20,0000	0,2770	3,4444	0,1688	0,2591	4,5031	0,0537	0,2591	4,5031	0,0537
0,1000	50,0000	0,2045	6,1452	0,1688	0,1075	6,9894	0,0697	0,1075	6,9894	0,0697

**Tabela 4.56:** Informações adicionais caso C3G3EqmCRS

Tempo de cálculo	4,350176e+01 s
Mínimo global	5,083913e-13
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Mínimo local	4,493886e-13
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações CRS	3420628
Número de avaliações BOBYQA	174

A Tabela 4.56 mostra informações relevantes para a otimização. Observando o valor da função objetivo nas Tabelas 4.54 e 4.56, percebe-se que o valor da função objetivo é muito pequeno, o que implica que tanto a distribuição de partida quando a KDF aproximante apresentam momentos quase idênticos. Contudo, isto não implica que a distribuição aproximante seja idêntica a distribuição de partida. Logo, apesar do caso estar convergido, as curvas não tem que se sobrepor. A otimização consegue, contudo, melhorar bastante a aproximação.



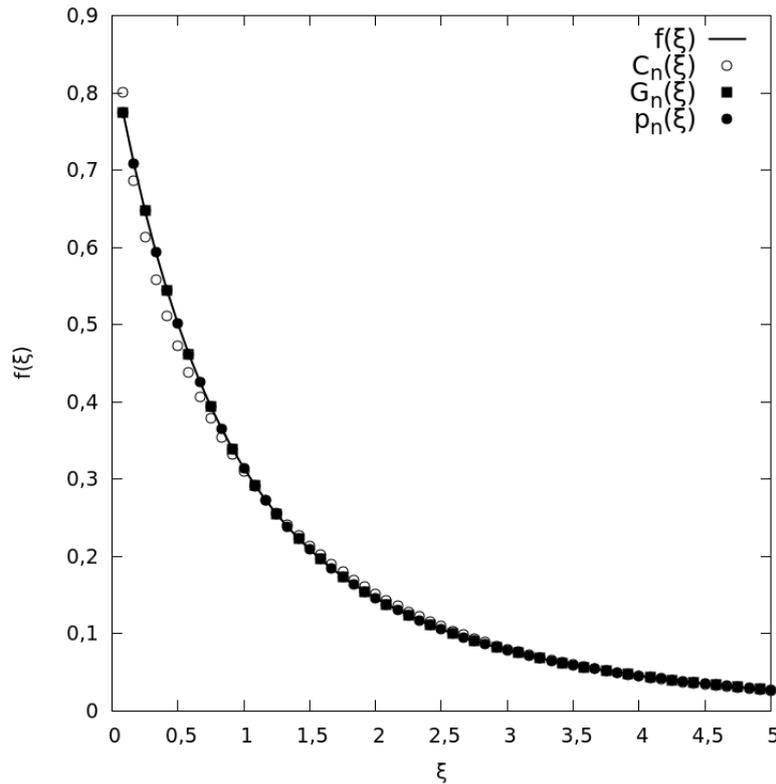
**Figura 4.32:** Cálculo da métrica  $\ell^2$  quando se altera o número de KDFs combinadas para gerar a aproximação. Caso C3G3EqmCRS.

A Figura 4.32 mostra como fica o cálculo da métrica para diferentes números de KDFs empregadas na aproximação. Estes números foram variados entre 1 e 4. O caso base foi o C3G3EqmCRS, que gera a distribuição de partida com a combinação linear de 3 distribuições tipo Chi. Pode-se notar que, quando se trabalha com 4 KDFs para gerar a aproximação, esta se torna mais acurada, uma vez que o valor da métrica é menor que nos casos com 1, 2 e 3 KDFs.

### Aproximação de distribuições Exponenciais por KDFs Gama

Nesta subseção,  $l$  é o parâmetro da distribuição exponencial.

A Figura 4.33 mostra o perfil de aproximações obtido em diferentes etapas do método. A estimativa gerada com o EQMOM não se mostra tão discrepante como nos casos envolvendo a distribuição Chi. A otimização consegue, contudo, melhorar o perfil da aproximação final.



**Figura 4.33:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 2 distribuições exponenciais aproximada por 2 KDFs gama, respectivamente.

**Tabela 4.57:** Tabela de parâmetros: Caso E2G2EqmCRS

V. de Partida		Estimativa Inicial			Global			Local		
$w_j$	$l_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,6500	0,5000	0,9410	1,3061	1,5240	0,3500	0,0666	0,6667	0,3500	0,6677	0,6677
0,3500	1,5000	0,0590	5,1558	1,5240	0,6500	2,000	2,000	0,6500	2,0000	2,0000

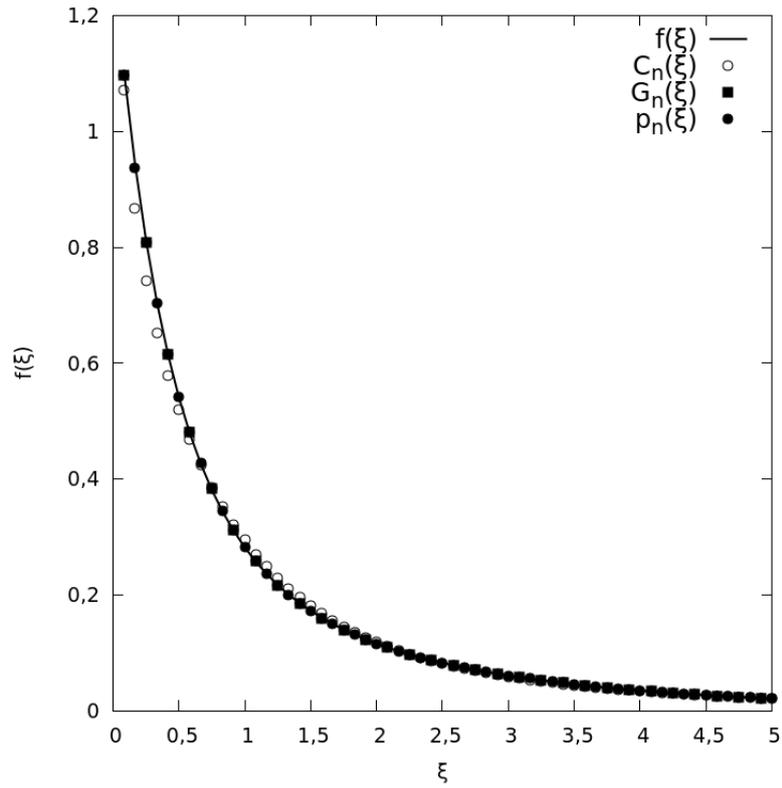
A Tabela 4.57 mostra os valores de parâmetros ao longo do método.

**Tabela 4.58:** Informações adicionais: Caso E2G2EqmCRS

Tempo de cálculo	2,794735e+00 s
Mínimo global	3,319758e-13
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Mínimo local	1,885240e-13
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações CRS	508057
Número de avaliações BOBYQA	125

A Tabela 4.58 traz informações complementares a otimização. O tempo de cálculos e o número de avaliações da função objetivo são razoavelmente pequenos, assim como o valor atingido pela função objetivo, que quase se aproxima de zero.

A Figura 4.34 mostra os perfis obtidos para as curvas em diferentes etapas do método. O método consegue gerar uma aproximação bem fiel ao perfil da distribuição inicial, apesar da leve defasagem induzida pela estimativa inicial proveniente do



**Figura 4.34:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 3 distribuições exponenciais aproximada por 3 KDFs gama, respectivamente.

EQMOM.

**Tabela 4.59:** Tabela de parâmetros: Caso E3G3EqmCRS

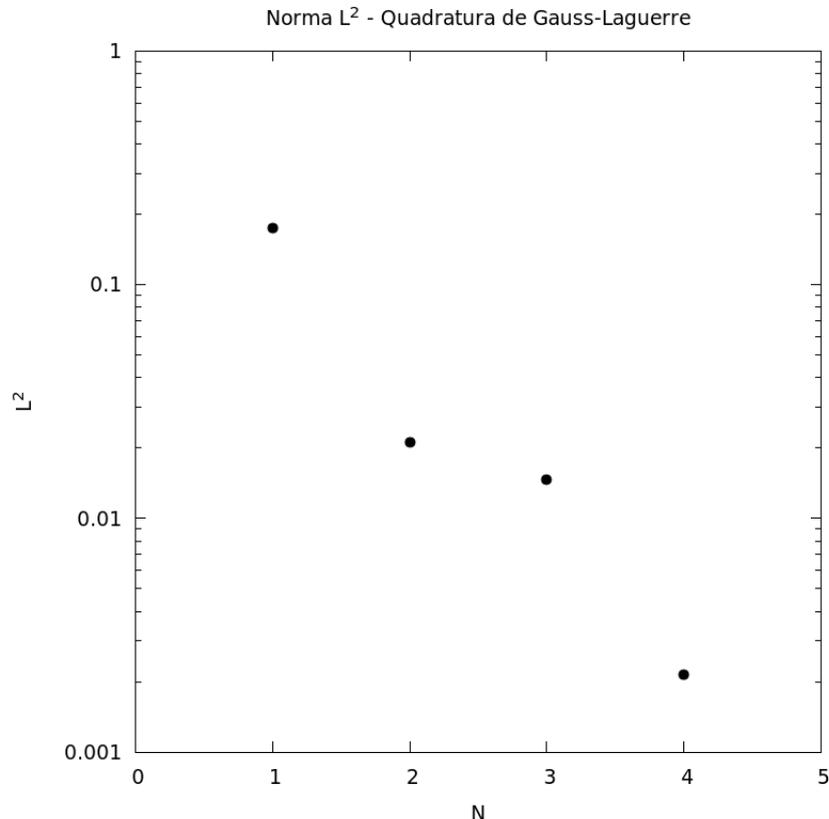
V. de Partida		Estimativa Inicial			Global			Local		
$w_j$	$l_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,5000	0,5000	0,9019	0,9048	1,1299	0,4699	0,4621	0,4746	0,4699	0,4621	0,4746
0,3000	1,5000	0,0962	4,4723	1,1299	0,5008	1,9984	2,0002	0,5008	1,9984	2,0002
0,2000	3,000	0,0019	10,5911	1,1299	0,0293	1,6626	0,5073	0,0293	1,6626	0,5073

A Figura 4.59 permite analisar os valores dos parâmetros de otimização ao longo da execução do método.

**Tabela 4.60:** Informações adicionais: Caso E3G3EqmCRS

Tempo de cálculo	3,386538e+01 s
Mínimo global	3,693817e-08
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Mínimo local	3,693010e-08
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações CRS	2933152
Número de avaliações BOBYQA	144

A Figura 4.60 mostra que o tempo de cálculos é maior que no caso anterior, devido a maior quantidade de parâmetros a serem otimizados. A Figura 4.35 abaixo mostra o gráfico da métrica induzida pela norma  $\ell^2$  para o caso em questão.

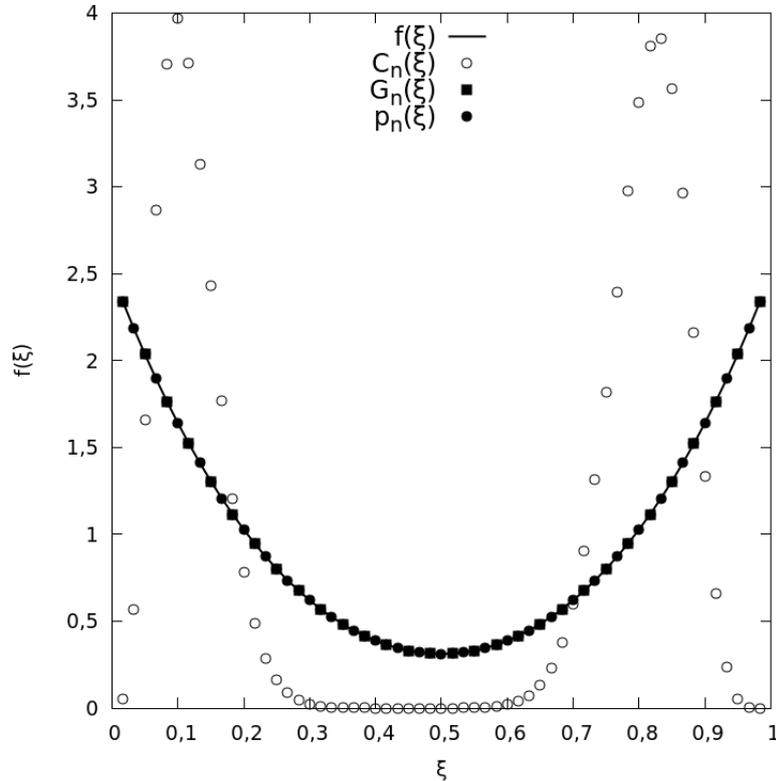
**Figura 4.35:** Cálculo da métrica  $\ell^2$  quando se altera o número de KDFs combinadas para gerar a aproximação. Caso E3G3EqmCRS.

O caso em questão é o E3G3EqmCRS. Novamente, quando se varia o número de KDFs utilizados na aproximação da distribuição de partida gerada por 3 exponenciais entre 1 e 4, observa-se que o valor da métrica vai se tornando progressivamente mais próximo de zero, o que é de se esperar, pois a aproximação se torna mais acurada.

### 4.3.2 Aproximações em domínio finito

#### Aproximação de distribuições Kumaraswamy por KDFs Beta

Nesta seção,  $a$  e  $b$  são parâmetros da distribuição de Kumaraswamy.



**Figura 4.36:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 2 distribuições Kumaraswamy aproximada por 2 KDFs beta, respectivamente.

A Figura 4.36 mostra o perfil de distribuições obtidos em diferentes etapas do método.

**Tabela 4.61:** Tabela de parâmetros: Caso K2B2qmCRS

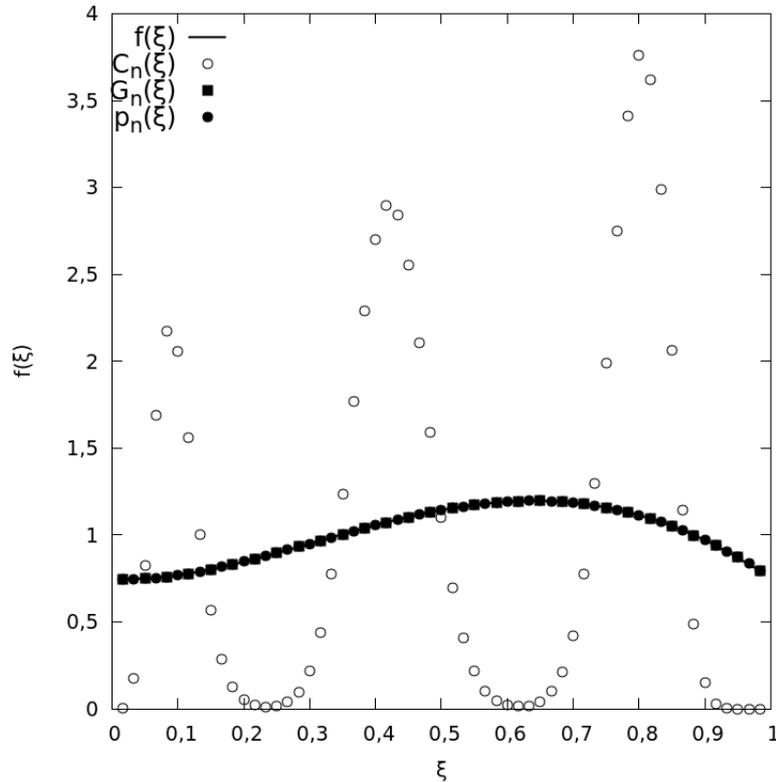
V. de Partida			Estimativa Inicial			Global			Local		
$w_j$	$a_j$	$b_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,5000	1,0000	5,0000	0,4497	0,1169	0,0220	0,5000	0,1667	0,1667	0,5000	0,1667	0,1667
0,5000	5,0000	1,0000	0,5503	0,8131	0,0220	0,5000	0,8333	0,1667	0,5000	0,8333	0,16667

A análise da Figura 4.36 e da Tabela 4.61 mostram que a estimativa inicial gerada pelo EQMOM é bastante falha. A coluna que contém os valores de parâmetros da estimativa inicial mostram que o EQMOM gera um valor muito pequeno de largura de banda neste caso. A otimização é essencial para a obtenção de uma aproximação fiel à distribuição de partida.

A Tabela 4.62 traz informações relevantes sobre a otimização, como o curto tempo de cálculos, atribuído a baixa quantidade de parâmetros e o pequeno valor atingido pela função objetivo. A Figura 4.37 indica os perfis gerados pelos parâ-

**Tabela 4.62:** Informações adicionais: Caso K2B2qmCRS

Tempo de cálculo	1,585710e-01 s
Mínimo global	1,078970e-11
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta nos parâmetros atingida.
Mínimo local	4,595552e-12
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações CRS	84935
Número de avaliações BOBYQA	154



**Figura 4.37:** Função de partida constituída pela soma ponderada de 3 distribuições Kumaraswamy aproximada por 3 KDFs beta, respectivamente.

metros em cada etapa do método. Novamente, a estimativa inicial do EQMOM é bastante defasada e a otimização tem papel crucial na geração de uma aproximação mais adequada.

**Tabela 4.63:** Tabela de parâmetros: Caso K3B3qmCRS

V. de Partida			Estimativa Inicial			Global			Local		
$w_j$	$a_j$	$b_j$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$	$w_\alpha$	$\xi_\alpha$	$\sigma_\alpha$
0,1500	1,0000	5,0000	0,1759	0,0982	0,0124	0,2760	0,5650	0,1985	0,2760	0,5650	0,1985
0,7000	2,0000	2,0000	0,4027	0,4234	0,0124	0,4945	0,3951	0,3940	0,4945	0,3951	0,3940
0,1500	5,0000	1,0000	0,4213	0,7964	0,0124	0,2295	0,7495	0,2549	0,2295	0,7495	0,2549

A Tabela 4.63 mostra a evolução numérica dos parâmetros em cada etapa do método.

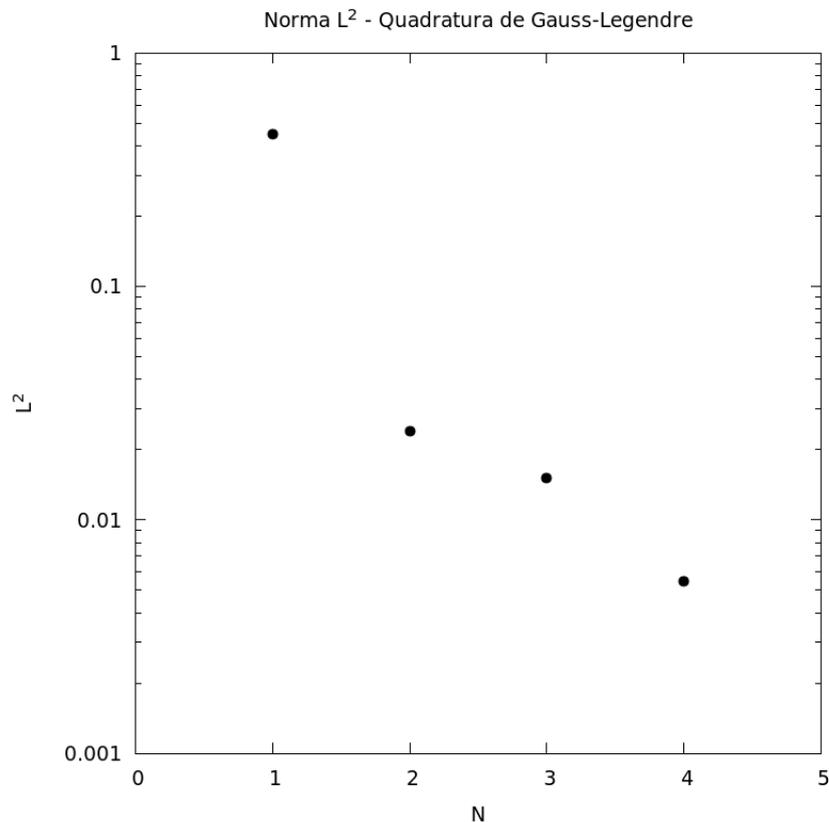
Os resultados obtidos para os casos em que a distribuição de partida é do tipo Kumaraswamy, mostrados nas Figuras 4.36 e 4.37 e nas Tabelas 4.61 e 4.63, observa-

**Tabela 4.64:** Informações adicionais: Caso K3B3qmCRS

Tempo de cálculo	2,229340e-01 s
Mínimo global	1,754956e-14
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Mínimo local	1,589305e-14
Critério de saída	Tolerância relativa ou absoluta na função objetivo atingida.
Número de avaliações CRS	106666
Número de avaliações BOBYQA	129

se que o valor de  $\sigma_\alpha$  para o qual o EQMOM converge é bastante pequeno. Isto acarreta na visível discrepância entre a curva de estimativa inicial e a original para a distribuição de partida. A otimização consegue resolver este problema, gerando uma boa aproximação para as distribuições em questão em um tempo pequeno, como mostram as tabelas 4.62 e 4.64.

Novamente, foi feito o cálculo da métrica induzida pela norma  $\ell^2$ . Neste gráfico,  $N$  é o número de KDFs utilizadas na aproximação da distribuição de partida do tipo Kumaraswamy. O cálculo empregou 50 pontos de quadratura de Gauss-Legendre. O caso em questão é o K4B4qmCRS. O número de KDFs empregadas na aproximação variou entre 1 e 4.



**Figura 4.38:** Cálculo da métrica  $\ell^2$  quando se altera o número de KDFs combinadas para gerar a aproximação. Caso K4B4qmCRS.

Pode-se notar com o auxílio da Figura 4.38 que quanto maior o número de KDFs

empregadas na aproximação, mais acurado o cálculo, uma vez que o valor da métrica se aproxima mais de zero.

# Capítulo 5

## Conclusões e Sugestões

Com o que fora exposto no capítulo anterior, torna-se possível elaborar algumas conclusões decorrentes na análise dos resultados.

A primeira constatação é que o EQMOM gerou um bom chute inicial para situações em que tanto a distribuição de partida quanto a KDF aproximante eram as mesmas, salvo alguns casos, como por exemplo G3G3EqmCRS e G4G4EqmCRS, nos quais uma das abscissas foi a zero. Nestes casos, a otimização apesar de relativo custo, consegue aproximar bem a função de partida.

Pode-se observar também que alguns problemas foram gerados principalmente em cálculos envolvendo a KDF gamma, como a atribuição de coeficientes de ponderação de maior valor em KDFs para as quais o valor das abscissas já era elevado e a desconsideração do alto crescimento no valor dos momentos, conforme se aumenta o número de momentos utilizados. O EQMOM se mostrou uma estimativa inicial robusta para a maioria dos casos estudados, principalmente no que se refere aos casos que envolviam KDFs beta. Já para casos envolvendo KDF gama essa robustez nem sempre foi verificada, como foi mostrado nos casos G3G3EqmCRS e G4G4EqmCRS.

Foi observado também que, quando pequenas perturbações são impostas aos parâmetros da distribuição de partida, principalmente no caso de KDFs beta, a otimização local consegue recuperar adequadamente o perfil da distribuição, o que é um indicativo de que o presente método pode ser robusto em situações nas quais se observa evolução temporal de parâmetros. Já para a KDF gama isto não foi observado para casos complexos como G3G3PerL e G4G4PerL.

O tempo de cálculos não foi muito elevado em situações envolvendo distribuições em domínio finito, o que indica um custo computacional razoavelmente baixo. Ao se trabalhar com domínio semi-infinito, apesar da transformação de variáveis, o custo computacional foi consideravelmente maior, uma vez que função objetivo precisou de mais tempo para atingir os critérios de saída impostos que visam a geração adequada da distribuição final. Nas situações propostas neste trabalho foi observado que o custo computacional aumentou quando se incrementou o número de parâmetros a

serem otimizados.

Quanto a aproximação de distribuições de partida que não eram do tipo beta e nem do tipo gamma, a otimização se mostrou bastante eficaz indicando, em todos os casos, ganho sobre o EQMOM.

### 5.0.3 Sugestões

Seguem, para trabalhos futuros, algumas sugestões que podem complementar os resultados obtidos.

- Trabalhar com distribuições que apresentem perfis mais realistas.
- Utilizar, sobretudo quando a distribuição de partida for gerada com KDFs gama, o emprego de um vetor de ponderação de momentos, penalizando os momentos de maior ordem, melhorando a questão da aproximação da região inicial da distribuição de partida.
- Empregar a otimização com uma função objetivo usando um conjunto menor que o de  $3n$  momentos.

# Referências Bibliográficas

- [1] YEOH, G. H., TU, J. *Computational Techniques for Multiphase Flows*. 1 ed. Oxford, UK, Elsevier Ltd., 2010.
- [2] SILVA, L. F. L. R. *Desenvolvimento de Metodologias para a simulação de escoamentos dispersos utilizando código livre*. Tese de Doutorado, 2008.
- [3] SANTOS, F. P. *Resolução da equação de Balanço Populacional pelo método dos momentos por quadratura direta baseado em momentos generalizados*. Tese de Doutorado, 2010.
- [4] FAVERO, J. L. *Simulação de escoamentos multifásicos polidispersos multivariados*. Tese de Doutorado, 2014.
- [5] RAMKRISHNA, D. *Population Balances - Theory and Applications to Particulate Systems in Engineering*. 2 ed. New York, Academic Press, 2000.
- [6] SHOHAT, J. A., TAMARKIN, J. D. *The Problem of Moments*. 2 ed. New York, American Mathematical Society, 1943.
- [7] CHRISTIANSEN, J. “An Introduction to the Moment Problem”, *Williams University*.
- [8] ATHANASSOULIS, G., GAVRILIADIS, P. “The truncated Hausdorff Moment Problem Solved by Using Kernel Density Functions”, *Probabilistic Engineering Mechanics*, v. 17, n. 8, pp. 273–291, 2002.
- [9] KARLIN, S., SHAPLEY, L. S. *Geometry of Moment Spaces*. Vol. 12 ed. New York, Providence RI: AMS Memoirs, 1953.
- [10] GAUTSCHI, W. *Orthogonal Polynomials - Computation and Approximation*. Oxford Science.
- [11] GORDON, R. “Error bounds in equilibrium statistical mechanics”, *Journal of Mathematical Physics*, v. 9, n. 5, pp. 655 – 663, 1968.

- [12] HULBURT, H. M., KATZ, S. “Some problems in particle technology: A Statistical Mechanical Formulation”, *Chemical Engineering Science*, v. 19, n. 8, pp. 555 – 574, 1964.
- [13] FRENKLACH, M., HARRIS, S. J. “Method of Moments with Interpolative Closure”, *Chemical Engineering Science*, v. 57, n. 12, pp. 2229–2239, 2002.
- [14] MCGRAW, R. “Description of Aerosol Dynamics by the Quadrature Method of Moments”, *Aerosol Science and Technology*, v. 27, 1997.
- [15] LAGE, P. L. C. “On the representation of QMOM as a weighted-residual method - The dual-quadrature method of generalized moments”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 35, n. 11, pp. 2186–2203, 2011.
- [16] YUAN, C. L., FOX, R. O. “An extended quadrature method of moments for population balance equations”, *Journal of Aerosol Science*, v. 51, n. 2, pp. 1–23, 2012.
- [17] LAWRENCE, R. M., PAPANICOLAOU, N. “Maximum entropy in the problem of moments”, *Journal of Mathematical Physics*, v. 25, n. 8, pp. 2404 – 2417, 1984.
- [18] LEBAZ, N., COCKS, A., SPÉRANDIO, M. “Reconstruction of a Distribution from a finite number of its moments: A comparative study in the case of depolymerization process”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 84, pp. 326–337, 2015.
- [19] KAELO, P., ALI, M. M. “Some variants of the controlled random search algorithm for global optimization”, *Journal of Optimization Theory*, v. 130, n. 2, pp. 253–264, 2006.

# Apêndice A

# Apêndice A

## A.0.4 Distribuição Chi

A distribuição Chi é caracterizada por apenas um parâmetro  $c$  e é definida em domínio semi-infinito  $[0, \infty)$ . Sua fórmula é dada segundo a equação A.1.

$$f(x, c) = \frac{2^{(1-\frac{c}{2})} x^{c-1} e^{-\frac{x^2}{2}}}{\Gamma(\frac{c}{2})} \quad (\text{A.1})$$

Na equação acima,  $\Gamma$  é a função Gamma. A Figura A.1 mostra a forma das curvas para distribuições do tipo Chi para diversos valores do parâmetro  $c$ .

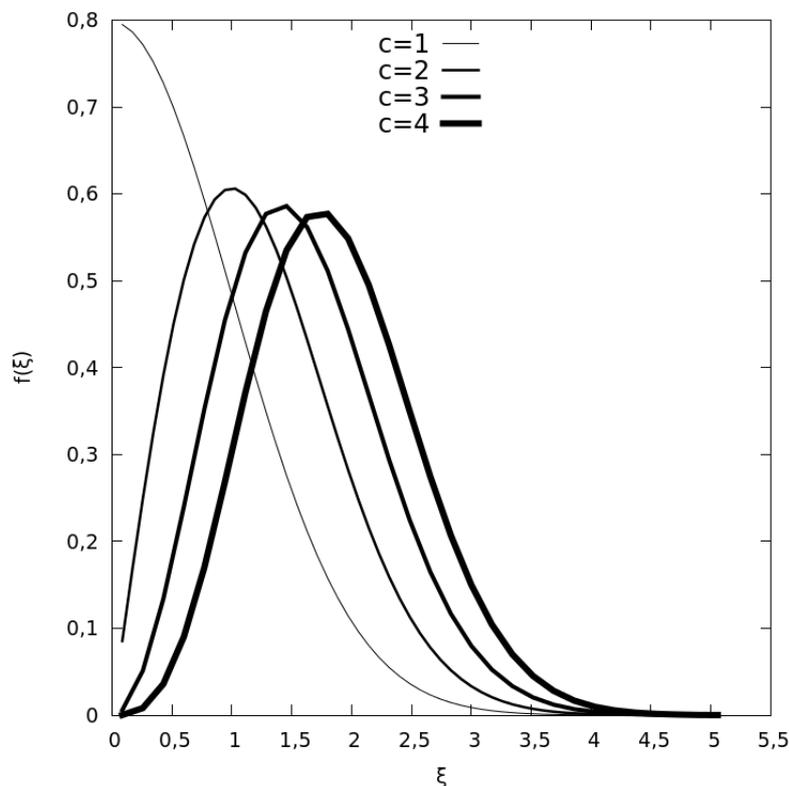


Figura A.1: Distribuição Chi.

Os momentos da distribuição Chi são dados segundo a equação A.2 abaixo.

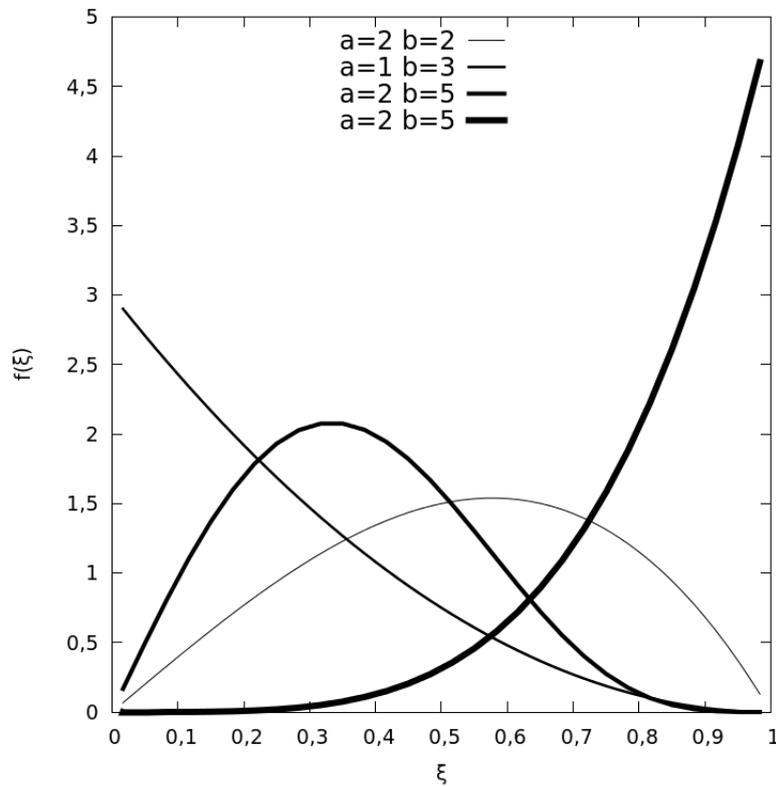
$$\mu_k = \frac{2^{\frac{k}{2}} \Gamma((k+c)/2)}{\Gamma(\frac{c}{2})} \quad (\text{A.2})$$

### A.0.5 Distribuição Kumaraswamy

A distribuição Kumaraswamy possui curvas semelhantes as da distribuição Beta. É definida em domínio finito  $[0,1]$  e é caracterizada por dois parâmetros,  $a$  e  $b$ . Sua fórmula é dada segundo a equação A.3.

$$f(x; a, b) = abx^{a-1}(1-x)^{b-1} \quad (\text{A.3})$$

A Figura A.2 abaixo mostra o perfil dessas curvas para valores específicos dos parâmetros  $a$  e  $b$ .



**Figura A.2:** Distribuição Kumaraswamy.

Da mesma forma que todas as distribuições utilizadas no desenvolvimento deste trabalho, a distribuição Kumaraswamy também apresenta uma expressão analítica para os seus momentos, dada segundo a equação A.4.

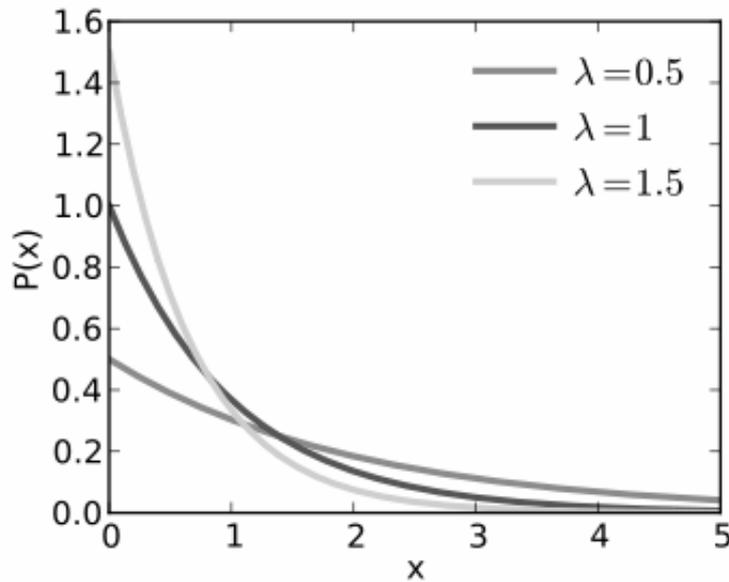
$$\mu_k = \frac{b\Gamma(1 + \frac{k}{a})\Gamma(b)}{\Gamma(1 + b + \frac{k}{a})} \quad (\text{A.4})$$

## A.0.6 Distribuição Exponencial

A distribuição exponencial é uma distribuição com apenas um parâmetro,  $\lambda$ , definida em domínio semi-infinito segundo a equação A.5:

$$\begin{cases} \lambda e^{-\lambda x}, & x \geq 0 \\ 0, & x = 0 \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

Algumas curvas características para a distribuição exponencial podem ser vistas na figura A.3 abaixo.



**Figura A.3:** Distribuição Exponencial.

Os momentos da distribuição exponencial são dados segundo a equação A.6 abaixo.

$$\mu_k = \frac{k!}{\lambda^k} \quad (\text{A.6})$$