

2.2 PROBLEMA INVERSO

A teoria de inversão trata do problema de se fazer inferências sobre sistemas físicos a partir de dados observados. Visto que quase todos os dados estão sujeitos a alguma incerteza, essas inferências são, portanto, estatísticas. Além disso, uma vez que apenas pode-se registrar um número finito de dados (ruidosos) e uma vez que sistemas físicos são geralmente não lineares, poderão existir vários modelos que se ajustarão aos dados.

A filosofia do processo de inversão é, então, inferir os parâmetros do modelo que descreve o meio físico, cuja solução do problema direto propicie valores calculados os mais semelhantes possíveis dos dados observados. Entretanto, este processo é complicado, em virtude de todas as incertezas que existem em qualquer problema inverso, tais como:

- o quão precisamente os dados são conhecidos;
- se a teoria físico-matemática que descreve a resposta do sistema físico contribuirá significativamente na predição dos dados calculados;
- e se a parametrização do meio físico, a função objetivo e a técnica de busca do mínimo global são adequados.

Existe uma grande variedade em número e sofisticação de métodos que são usados para resolver problemas inversos. Incluem-se dentre esses métodos, procedimentos de otimização que abrangem abordagens globais e locais.

Métodos locais são normalmente divididos em duas categorias: métodos gradiente e métodos diretos (livre de derivadas). Métodos que empregam o gradiente, envolvem o cálculo da função e suas derivadas em cada iteração. Tais métodos são poderosos, mas requerem que a função seja diferenciável sob o domínio relevante. Métodos diretos, no entanto, envolvem apenas o cálculo da função; são geralmente menos eficientes do que os métodos gradiente, porém, como eles não requerem o cálculo das derivadas são mais simples e aplicáveis à

otimização de funções não diferenciáveis. Ambos os casos necessitam de se fornecer uma boa solução inicial (chute) para calcular ou atualizar o modelo corrente. Dado um bom modelo inicial pode-se obter a solução correta em poucas iterações.

Algoritmos de busca global usam a informação sobre o comportamento da função objetivo mais globalmente para atualizar e calcular o modelo corrente. A vantagem é que tais métodos não são sensíveis à escolha inicial dos modelos e a presença de mínimos locais, porém, são computacionalmente mais dispendiosos.

O desafio atualmente é determinar uma maneira ótima de se combinar as duas abordagens, de modo que o procedimento resultante (híbrido) explore os importantes aspectos de ambos os métodos.

Para encontrar o valor mínimo da função objetivo, utilizou-se o procedimento de busca aleatória controlada – *Controlled Random Search* (CRS) (PRICE, 1977), por ser um método de busca global, de fácil implementação computacional e adequada à solução de problemas inversos não lineares, como é o caso do problema considerado neste trabalho.

Apesar do procedimento CRS não ser um método amplamente difundido no meio geofísico como os métodos globais conhecidos por *simulated annealing* e algoritmos genéticos, citam-se os trabalhos de Silva e Hohmann (1983) sobre dados magnéticos, Smith e Ferguson (2000) sobre dados de refração sísmica e Tuma (2002) sobre dados de reflexão sísmica, em que o método mostrou-se eficiente em aplicações geofísicas. Na última seção deste capítulo está descrito o procedimento CRS e uma nova abordagem deste algoritmo.

2.2.1 Função objetivo

A determinação de parâmetros elásticos de subsuperfície através da inversão dos coeficientes de reflexão da onda P refletida é um problema de otimização não linear que

consiste em encontrar o vetor de parâmetros $\mathbf{m} = [m_1, m_2, \dots, m_M]$ de modo que uma função objetivo $f(\mathbf{m})$ seja minimizada.

A função objetivo utilizada no procedimento de inversão é a função de mínimos quadrados para quantificar a semelhança entre as amplitudes calculadas e observadas da onda P refletida. Portanto, o melhor ajuste dos dados calculados aos observados está associado ao valor mínimo de f , dado pela expressão:

$$f = \sum_j \left[\sum_k \left(A_{j,k}^{obs} - A_{j,k}^{calc} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (2.17)$$

onde,

- o índice j refere-se ao número do traço registrado;
- o índice k refere-se ao número da amostra dentro da janela de tempo;
- A^{obs} são as amplitudes observadas no sismograma registrado;
- A^{calc} são as amplitudes do sismograma sintético calculado em função dos parâmetros ($h, Vp_i, Vp_{i+1}, Vs_i, Vs_{i+1}, \rho_i, \rho_{i+1}$) que correspondem, respectivamente, a profundidade do refletor, velocidade da onda P, velocidade da onda S e densidade dos meios acima (índice i) e abaixo (índice $i + 1$) do refletor considerado.

2.2.2 Parâmetros do modelo

A parametrização do modelo é um dos elementos chave na aplicabilidade de qualquer método de inversão, pois, é ela quem dita os tipos de modelos que podem ser explorados.

O problema inverso proposto tem quatro incógnitas ($Vs_1, Vs_2, \rho_1, \rho_2$, sendo que os índices 1 e 2 referem-se, respectivamente, aos meios acima e abaixo do refletor em questão). Acredita-se que deixar a velocidade da onda P (Vp_1, Vp_2) e a profundidade do refletor (h) como mais parâmetros a serem estimados pelo processo de inversão (7 parâmetros)

umentaria muito a complexidade do problema considerado, portanto, será assumido que as velocidades da onda P e a profundidade do refletor foram determinadas através do processamento e análise convencionais ao método de reflexão sísmica.

2.2.3 Solução do problema direto

A modelagem dos dados para o problema em questão consiste no cálculo do sismograma sintético de reflexão, considerando-se meios elásticos e homogêneos. Para tal, utilizou-se o programa SEIS88 (ČERVENÝ; PŠENČIK, 1988) que através do método do raio permite calcular tempos de chegada, amplitude e fase dos coeficientes de reflexão.

2.2.4 Descrição do algoritmo de busca

Para encontrar o mínimo da equação (2.17) empregou-se o procedimento de busca aleatória controlada (CRS) para otimização global conforme descrito por Price (1977). Um novo procedimento, baseado no algoritmo CRS e no método simplex de Nelder e Mead (1965) (NMS) foi implementado, e seu desempenho comparado com o algoritmo de Price.

Inicialmente serão descritos o algoritmo CRS de Price e o método simplex de Nelder e Mead e ao término desta seção será apresentado e discutido o algoritmo CRS modificado. Na descrição, tanto matrizes como vetores, foram denotados por letras maiúsculas em negrito.

2.2.4.1 O algoritmo CRS de Price

O procedimento de busca aleatória controlada (CRS – *Controlled Random Search*) é um método direto, aleatório, não requer que a função seja diferenciável ou que as variáveis

sejam contínuas e é aplicável na presença de vínculos. Os aspectos essenciais do algoritmo estão indicados no diagrama de fluxo da Figura 2.1.

O algoritmo de Price consiste, inicialmente, em escolher aleatoriamente L pontos (sujeito a vínculos, se houverem) sobre um domínio de busca, \mathbf{B} , definido pelos domínios de cada um dos M parâmetros. A função objetivo é calculada em cada ponto de busca, e a posição e o valor da função objetivo correspondente a cada ponto são armazenados numa matriz, \mathbf{A} . O ponto (\mathbf{H}) com o maior valor de função objetivo, $f(\mathbf{H})$, é determinado e armazenado. Em seguida $(M + 1)$ pontos de busca são escolhidos aleatoriamente entre os L pontos armazenados atualmente em \mathbf{A} .

Em cada iteração este conjunto de $(M + 1)$ pontos constituirá um simplex e, então, um novo ponto de busca \mathbf{Q} será selecionado através da reflexão do $(M + 1)$ -ésimo ponto de busca com respeito aos M primeiros pontos de busca do simplex, de acordo com a equação vetorial $\mathbf{Q} = 2*\mathbf{C} - \mathbf{P}$, onde \mathbf{P} é a posição do $(M + 1)$ -ésimo ponto de busca e \mathbf{C} é a posição do centróide dos M primeiros pontos do simplex.

Calculada a posição de \mathbf{Q} que satisfaz os vínculos, a função objetivo é avaliada em \mathbf{Q} e seu valor, $f(\mathbf{Q})$, é comparado com $f(\mathbf{H})$. Se $f(\mathbf{Q})$ for menor do que $f(\mathbf{H})$, \mathbf{H} será então substituído em \mathbf{A} por \mathbf{Q} . Se \mathbf{Q} falhar em satisfazer os vínculos ou se $f(\mathbf{Q})$ for maior do que $f(\mathbf{H})$, então \mathbf{Q} será descartado e um novo ponto \mathbf{Q} será calculado a partir de um novo conjunto de $M + 1$ pontos. Após a substituição de \mathbf{H} e $f(\mathbf{H})$ por, respectivamente, \mathbf{Q} e $f(\mathbf{Q})$, os critérios de parada são testados e o procedimento é interrompido quando um desses for satisfeito.

Três critérios foram adotados para o término da busca:

i) Distribuição plana dos pontos de busca.

$$f(\mathbf{H}) - f(\mathbf{L}) < \varepsilon_1, \quad (2.18)$$

onde $f(\mathbf{H})$ e $f(\mathbf{L})$ são, respectivamente, o maior e o menor valor de função objetivo da população e ε_1 é o valor de tolerância.

ii) *Proximidade dos pontos de busca.* Este critério de convergência estabelece que o processo será repetido até que os pontos de busca encontrem-se próximos o suficiente, dentro de um valor de tolerância ε_2 , estipulado de modo que os pontos sejam considerados similares. Isto é medido através da expressão,

$$\|\mathbf{P}_i - \mathbf{C}\| < \varepsilon_2, \text{ para } i = 1, 2, \dots, L \quad (2.19)$$

onde $\|\mathbf{P}_i - \mathbf{C}\|$ representa a distância do i -ésimo ponto ao centróide da população(L), dado por

$$\mathbf{C} = \frac{1}{L} \left[\sum_{i=1}^L \mathbf{P}_i \right] \quad . \quad (2.20)$$

Isto assegura que todos os pontos convergiram para as vizinhanças de um ótimo ponto e a busca tornou-se local.

iii) Quando um número específico, it_{max} , de iterações é excedido.

2.2.4.2 O método simplex de Nelder e Mead (NMS)

Este é o método de busca direto mais popular para otimização de funções reais sem vínculos. É baseado na comparação dos valores da função objetivo nos vértices de um simplex. Um simplex é uma figura geométrica regular consistindo de $M + 1$ vértices. Na Figura 2.2 é apresentado um diagrama de fluxo esquematizando todas as etapas do algoritmo, conforme descrito a seguir:

- 1) É dado um chute inicial, \mathbf{P}_1 , representado por um vetor M -dimensional que indica a posição deste ponto no espaço de modelos.
- 2) Um simplex inicial é construído, consistindo do ponto inicial e dos pontos adicionais determinados através da seguinte expressão:

$$\mathbf{P}_j = \mathbf{P}_1 + \xi_j, \text{ para } j = 2, 3, \dots, M + 1 \quad (2.21)$$

onde ξ_j é dado a partir da seguinte matriz,

j	$\xi_{1,j}$	$\xi_{2,j}$	\cdots	$\xi_{M-1,j}$	$\xi_{M,j}$
2	p	q	\cdots	q	q
3	q	p	\cdots	q	q
\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	\vdots
M	q	q	\cdots	p	q
$M+1$	q	q	\cdots	q	p

onde $p = \frac{a}{M\sqrt{2}}(\sqrt{M+1} + M - 1)$; $q = \frac{a}{M\sqrt{2}}(\sqrt{M+1} - 1)$ e a é o tamanho do lado do simplex.

3) Uma vez que o simplex é formado, a função objetivo é avaliada em cada ponto (vértice). Determinam-se entre os $M + 1$ pontos do simplex, os pontos: \mathbf{P}_h , \mathbf{P}_s e \mathbf{P}_l ; para os quais a função objetivo assume respectivamente o seu maior, segundo maior e menor valor. O pior ponto (valor mais alto de função objetivo) será substituído por um novo ponto. O método NMS procede à busca do mínimo usando três operações: reflexão, contração e expansão.

4) Primeiro, um ponto refletido, \mathbf{P}_r , é localizado da seguinte maneira:

$$\mathbf{P}_r = \mathbf{C} + \alpha (\mathbf{C} - \mathbf{P}_h), \quad \mathbf{C} = \frac{1}{M} \left[\sum_{i=1}^{M+1} \mathbf{P}_i - \mathbf{P}_h \right] \quad (2.22)$$

onde, α é uma constante positiva e \mathbf{C} é o vetor com as coordenadas do centróide de todos os pontos excluindo o pior ponto, \mathbf{P}_h .

5) Se o ponto refletido, \mathbf{P}_r , for o melhor ponto, um ponto expandido, \mathbf{P}_e , é calculado por:

$$\mathbf{P}_e = \mathbf{C} - \gamma (\mathbf{C} - \mathbf{P}_r) \quad (2.23)$$

onde, γ é uma constante positiva.

Se o ponto expandido for melhor do que o ponto refletido, o pior ponto é substituído pelo ponto expandido e o processo reiniciado. Caso contrário, o pior ponto é substituído pelo ponto refletido e o processo reiniciado.

6) Se o ponto refletido não for o melhor ponto, porém não é pior do que o segundo pior, \mathbf{P}_s , o pior ponto é substituído pelo ponto refletido e o processo reiniciado.

7) Se o ponto refletido tem o pior valor de função objetivo dos pontos correntes, um ponto contraído, \mathbf{P}_c , é localizado como segue:

$$\mathbf{P}_c = \mathbf{C} - \beta (\mathbf{C} - \mathbf{P}_h), \quad (2.24)$$

onde β situa-se entre 0 e 1.

Se o ponto refletido for melhor do que o pior ponto, porém não é melhor do que o segundo pior, um ponto contraído é calculado a partir do ponto refletido como segue:

$$\mathbf{P}_c = \mathbf{C} - \beta (\mathbf{C} - \mathbf{P}_r), \quad (2.25)$$

A função objetivo é agora avaliada no ponto contraído. Se uma melhora é alcançada, o pior ponto é substituído pelo ponto contraído e o processo é reiniciado. Caso contrário, os pontos são movidos uma meia distância em direção ao melhor ponto deste simplex:

$$\mathbf{P}_i = (\mathbf{P}_i + \mathbf{P}_l)/2 \quad (2.26)$$

e o processo é então reiniciado.

O procedimento é interrompido quando o critério de convergência ou de parada é satisfeito.

2.2.4.3 O algoritmo CRS modificado

Uma nova abordagem do procedimento CRS de Price é proposta. O algoritmo CRS modificado combina num único procedimento elementos do método de Price e de Nelder e Mead. Esse novo procedimento difere-se do algoritmo CRS original em dois aspectos:

i) Escolha do pólo do simplex. No algoritmo original o ponto que será tomado como o vértice do simplex a ser refletido, designado pólo do simplex, é escolhido aleatoriamente, pois a escolha do $(M + 1)$ -ésimo ponto de um determinado conjunto de $M + 1$ pontos (que pode ser gerado em qualquer ordem) é aleatória. No algoritmo atual, essa escolha foi modificada de tal forma que o ponto com o maior valor de função objetivo entre os $M + 1$ pontos é selecionado

como pólo do simplex. Tal modificação propende a acelerar a convergência do procedimento, porém essa melhora tende a comprometer a eficácia da busca, pois reduz seu domínio e conseqüentemente as chances de encontrar o mínimo global. No algoritmo proposto, o domínio de busca (neste caso, “domínio de busca” refere-se ao conjunto dos possíveis novos pontos de busca) é caracterizado pelo número de diferentes maneiras no qual $M + 1$ pontos podem ser escolhidos a partir da configuração de L pontos armazenados em \mathbf{A} . O algoritmo de Price tem o domínio de busca $M + 1$ vezes maior conforme ilustrado na Figura 2.4.

Por outro lado, o algoritmo implementado é mais eficiente, porque a probabilidade de sucesso ($f(\mathbf{Q}) < f(\mathbf{H})$) numa dada tentativa é maior do que no algoritmo de Price, como podemos verificar novamente através da Figura 2.4.

ii) *Operações sobre os vértices do simplex.* No algoritmo modificado utiliza-se estrategicamente o fato do ponto, tomado como pólo do simplex, possuir o maior valor de função objetivo e, portanto, emprega-se as operações de reflexão, expansão e contração aos vértices do simplex, ao invés de usar apenas a reflexão do pólo. Essas operações estão descritas no algoritmo apresentado anteriormente.

Em poucas palavras, a estratégia adotada foi a seguinte: combinar no mesmo procedimento a busca global realizada pelo algoritmo CRS realçada por enfoques locais obtidos através do algoritmo NMS. De fato, depois de um determinado passo do procedimento CRS original, o algoritmo modificado procede rigorosamente da mesma forma que algoritmo NMS e a busca torna-se local.

Uma outra consideração é que o algoritmo original de Nelder e Mead foi formulado para problemas de domínios ilimitados. Com a busca restrita a um domínio, \mathbf{B} , um ponto \mathbf{X} poderia deixá-lo após uma operação de reflexão ou expansão. Caso isso aconteça, o ponto seria projetado no limite de \mathbf{B} , conforme descrito por Luersen e Le Riche (2004), se

$$x_i < u_i, \text{ então } x_i = u_i, \text{ e se } x_i > v_i, \text{ então } x_i = v_i, \quad (2.27)$$

onde x_i é o i -ésimo elemento do vetor de parâmetros indicando a posição do ponto no espaço de busca definido pelos limites inferior e superior, respectivamente \mathbf{u} e \mathbf{v} .

O procedimento é interrompido quando um dos critérios (2.18) a (2.20) for satisfeito.

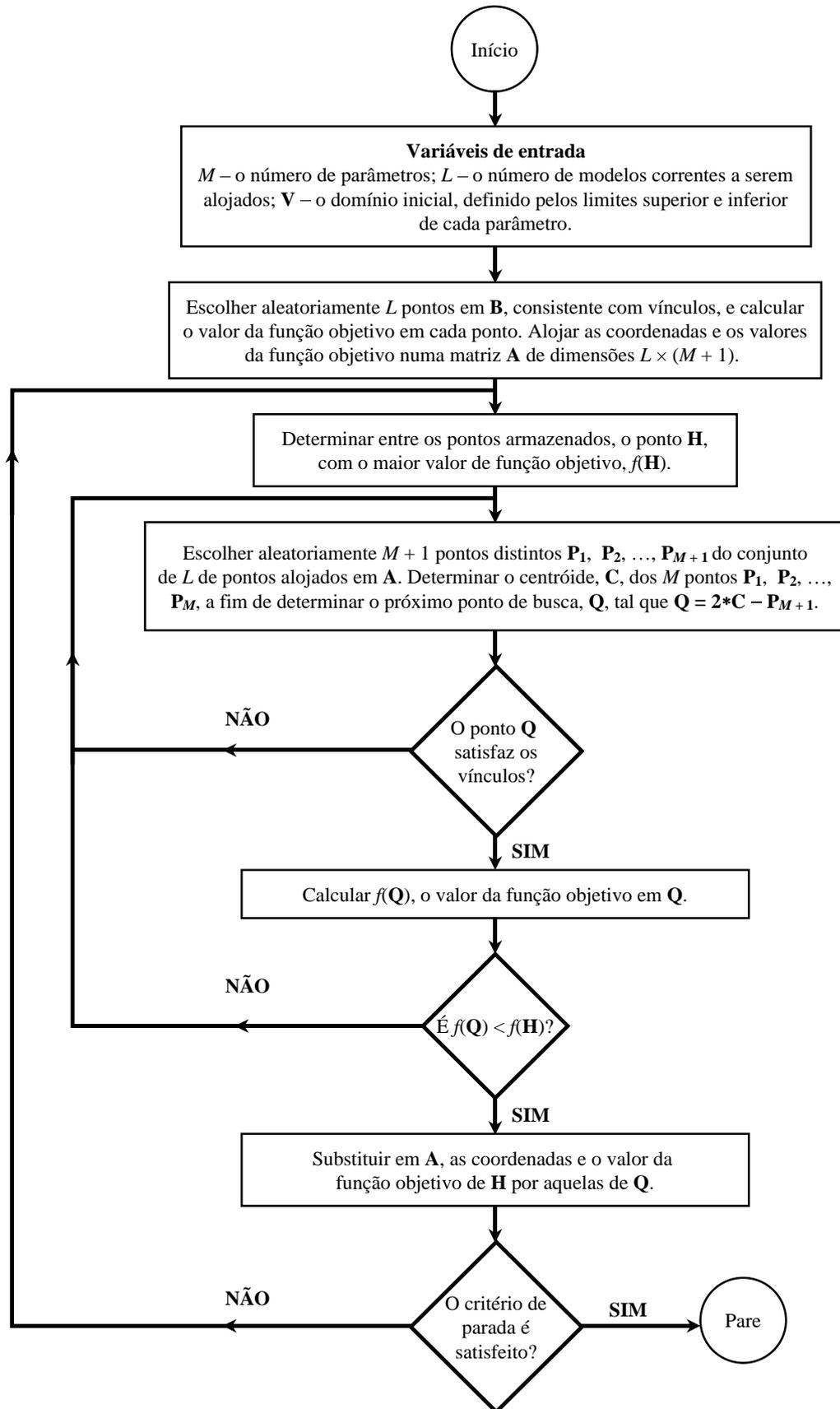


Figura 2.1 – Diagrama de fluxo do algoritmo CRS de Price.

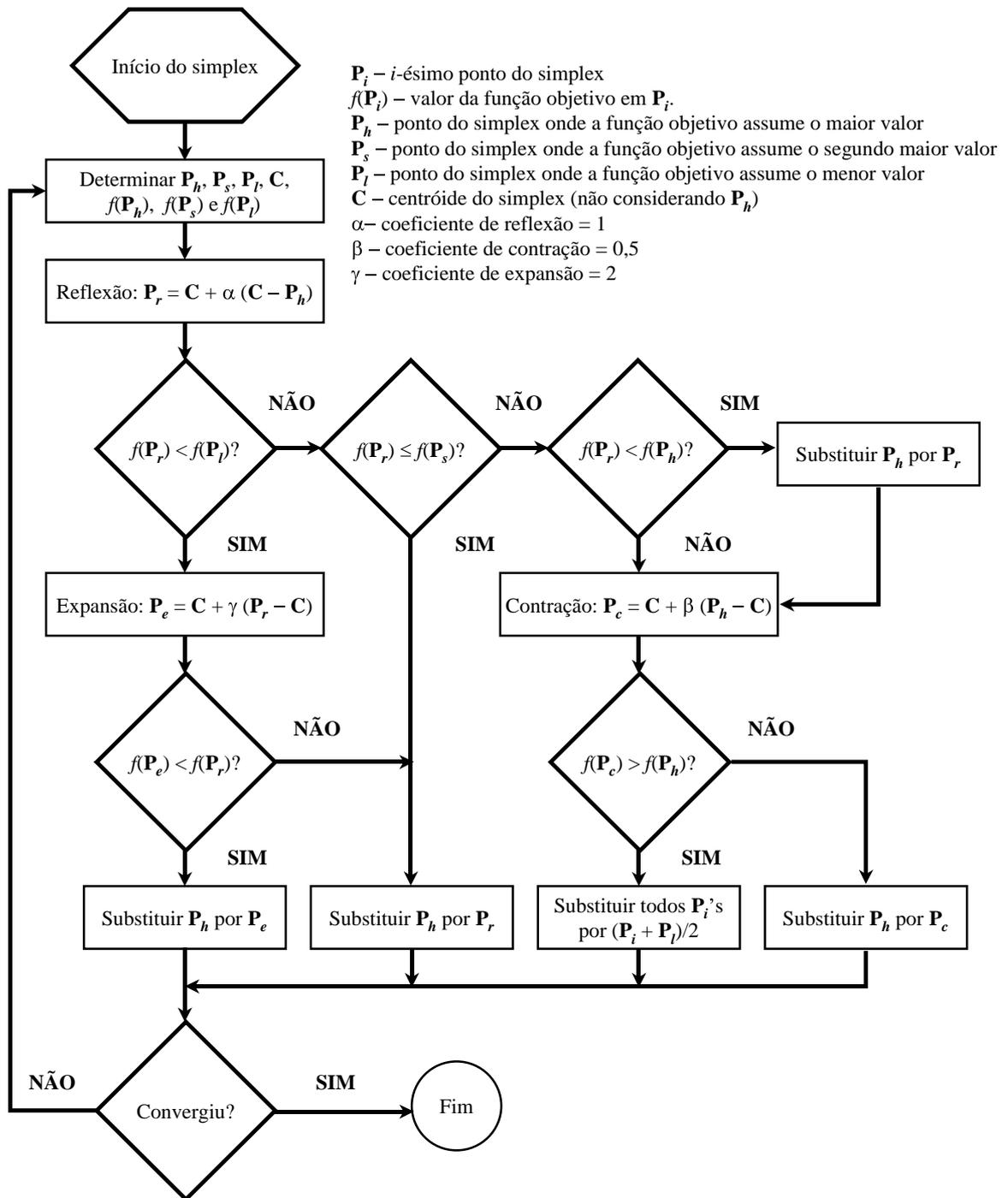


Figura 2.2 – Diagrama de fluxo do clássico método simplex de Nelder e Mead.

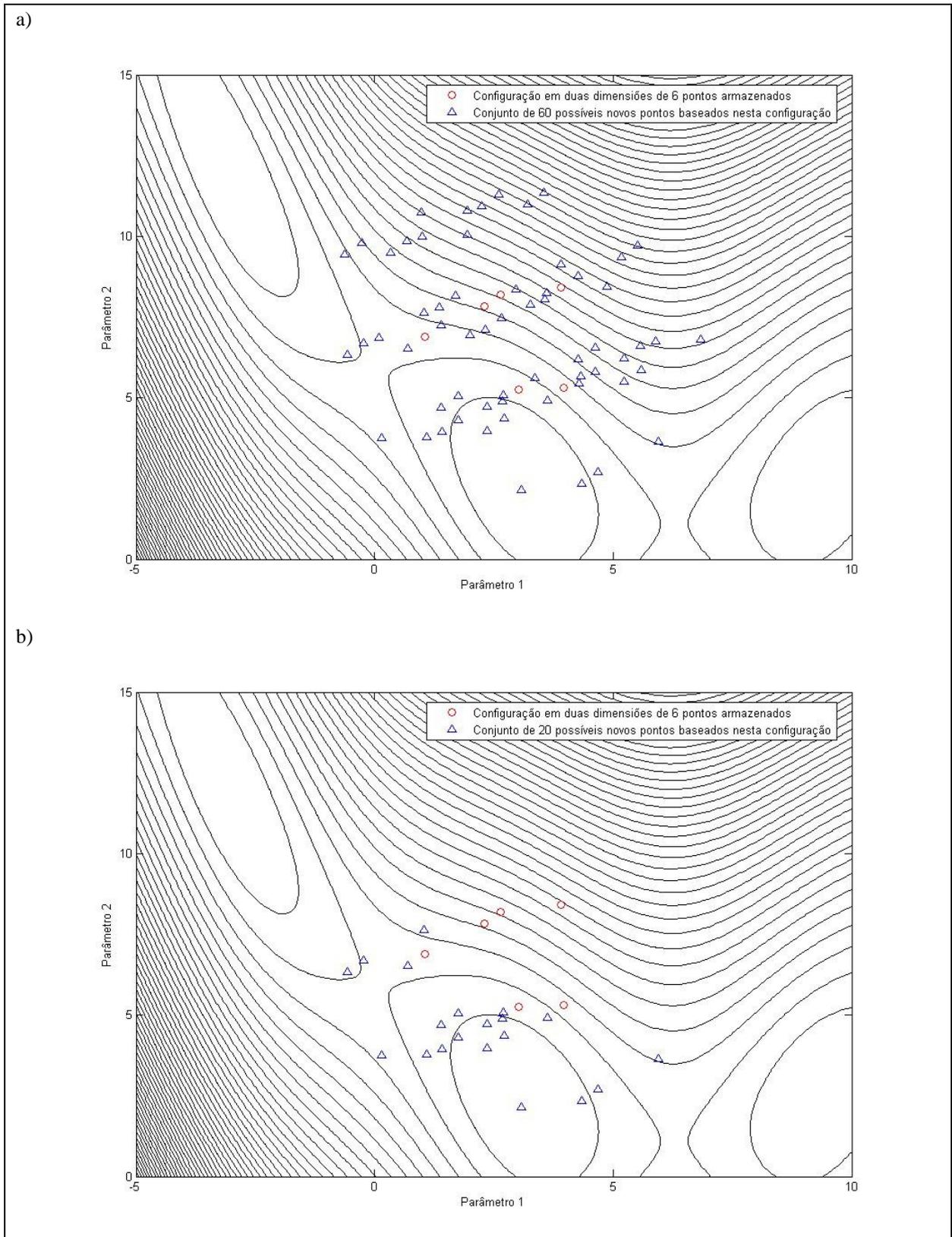


Figura 2.4 – Conjunto dos possíveis novos pontos de busca calculado a partir de uma dada configuração de 6 pontos de busca: **a)** para o algoritmo CRS original, e **b)** para o CRS modificado.