

Estágios do processo de Inversão

1) A Formulação:

1.1) O Problema Geológico: Caracterização do problema geológico. Nesta etapa defini-se: a) os dados geofísicos, b) a estrutura geológica e c) os parâmetros a serem estimados.

1.2) Simplificações: Com base na definição do problema geológico estabeleceremos hipóteses (conjecturas com fundamentos) objetivando estabelecer simplificações.

1.3) Informação a priori: Define-se todas as informações a priori sobre os parâmetros. Estas informações podem ser precisas ou não, podem ser quantitativas, ou semi-quantitativas, ou qualitativas, podem ser geológicas ou físicas.

1.4) Relação Funcional (modelo direto): Após estabelecermos todos estes tópicos acima busca-se a transformação do problema geológico em um problema matemático. Para isto iremos construir uma relação funcional f que estabelece uma relação entre os dados geofísicos observados y^o e os parâmetros p do modelo que serão estimados. Vale ressaltar que a relação funcional (também chamada de modelo direto) envolve outras variáveis, além dos dados geofísicos y^o (também chamados de variáveis dependentes do problema) e os parâmetros desconhecidos p , como por exemplo as variáveis independentes (x) e constantes conhecidas (γ) do modelo.

$$f(p, x, \gamma) = y^o$$

1.5) Problema Matemático: Montagem do sistema de equações que será resolvido. Esta etapa envolve a escolha ou a elaboração do estabilizador matemático (regularizador) em concordância com a informação geológica disponível do problema. O sistema resultante a ser resolvido pode envolver equações lineares ou não-lineares.

2) **A Construção da solução:** A construção da solução consiste na elaboração do algoritmo e na obtenção de uma solução estimada.

3) **Avaliação da solução estimada:**

3.1) Análise das Limitações: Todo o método de inversão elaborado ou utilizado estabelece premissas. Então devemos analisar quais serão as consequências se tais premissas não refletirem uma informação geológica de fato.

3.2) Análise de estabilidade da solução na presença de ruído¹ Esta análise pode ser feita via diferentes formas. A primeira consiste em analisar a solução analítica dos estimadores. A segunda forma é fazendo-se uma análise estatística (através da matriz de covariância dos parâmetros). A terceira forma análise de estabilidade da solução pode ser feita através da realização de testes numéricos controlados com dados contaminados por diferentes seqüências de ruído.

3.3) Simulação de testes sintéticos com dados contaminados com ruído

3.4) Aplicação do método de inversão a dados reais:

A seguir será apresentado um exemplo muito simples envolvendo os estágios do processo de inversão

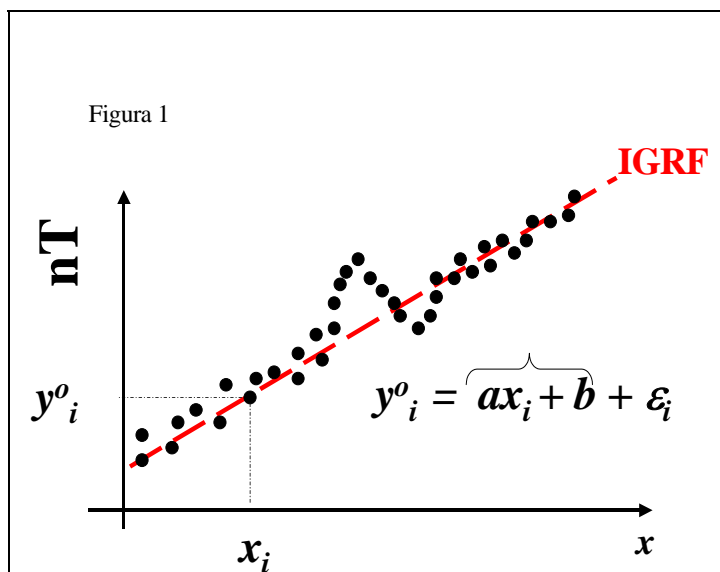
¹ Leia o ANEXO 1 (Conceitos Básicos de Estatística)

Exemplo dos estágios do processo de Inversão:

1) A Formulação:

O Problema Geológico: Dado N observações de uma anomalia magnética obtenha um estimador local do campo Normal da terra (IGRF= International Geomagnetic Reference Field). Tal como na gravimetria que existe uma representação matemática para a atração gravimétrica do elipsóide de referência, existe também na magnetometria a representação matemática da “anomalia regional magnética”. O IGRF é a representação deste campo regional da Terra, ou seja, é a representação matemática do campo principal da Terra. Matematicamente o IGRF representa harmônicos de baixa ordem (de 1 até 10). Geologicamente, acredita-se que o IGRF represente grande parte do campo geomagnético do núcleo da Terra. Então subtraindo-se o IGRF do Campo magnético Total da Terra teremos, em princípio, a anomalia magnética da crosta (anomalia magnética que é de interesse para a prospecção).

Simplificações: Vamos estabelecer como simplificação deste problema que o IGRF pode ser aproximado por um polinômio de ordem 1. Esta simplificação será válida para áreas pequenas onde o campo geomagnético varia linearmente.



Na Figura 1 os pontos representam as N observações geofísicas de y^o . Especificamente, y^o_i representa a i-ésima observação medida na coordenada

x_i . Veja que aproximaremos o dado observado y^o_i por um polinômio de primeira ordem. Este problema é muito simples e representa um problema de regressão linear. A reta ajustada (IGRF) é conhecida como “Regression line” cujo o i-ésimo elemento y^c_i (dado ajustado ou calculado) é definido pela equação

$$y^c_i = ax_i + b \text{ (reta ajustada=IGRF)}$$

então em cada ponto de medida x_i o dado observado (medido) y^o_i deve satisfazer a seguinte equação

$$y^o_i = ax_i + b + \varepsilon_i$$

em que ε_i representa o resíduo no i-ésimo ponto de medida (Figura 2). O resíduo é a distância vertical entre i-ésima observação y^o_i e a i-ésima observação ajustada y^c_i (linha de regressão que neste problema representa o IGRF). O resíduo ε_i também é chamado de desajuste “misfit” ou erro (ruído).

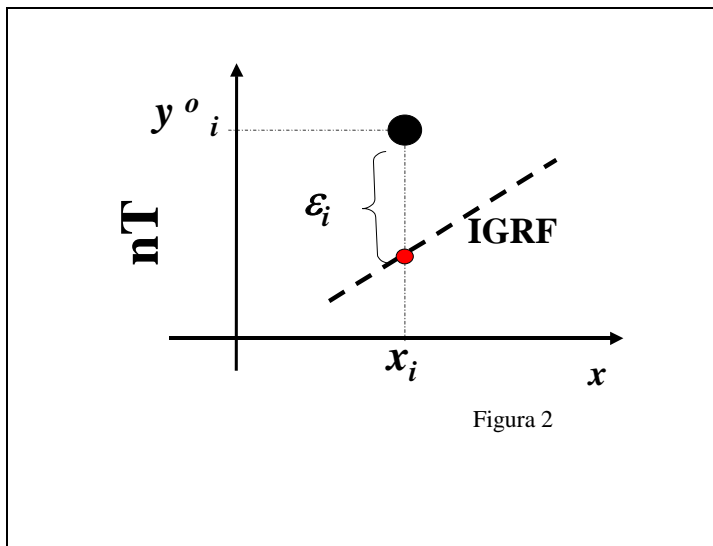


Figura 2

Figura 2

Problema Matemático: veja que se temos apenas uma observação y^o_1 queremos que esta única observação esteja o mais próximo possível do ajuste

$y^c_1 = ax_1 + b$. Em outras palavras, queremos que ε_1 seja mínimo. Este problema em notação matemática é:

$$\text{Minimize } \{ \varepsilon_1 \} = \text{Minimize } \{ y^o_1 - y^c_1 \}$$

Como há N observações de medidas do Campo magnético Total então é necessário uma norma do resíduo seja mínima. Se escolhermos a norma L2 o nosso problema é escrito como:

$$\text{Min } \{ Q \} = \sum_{i=1}^N \left(y^o_i - ax_i - b \right)^2 = \sum_{i=1}^N (\varepsilon_i)^2$$

Ou seja, este problema foi formulado como um problema de estimar os parâmetros a e b tal que a soma dos quadrados dos resíduos seja mínima.

A Construção da solução:

Para a construção elaboraremos um algoritmo de minimização da função acima, que é conhecido como Método dos Mínimos Quadrados. Matematicamente, a condição para que a função Q ter um mínimo no espaço dos parâmetros (a, b) é:

$$\frac{\partial Q}{\partial a} = 0 \text{ e } \frac{\partial Q}{\partial b} = 0$$

$$\frac{\partial Q}{\partial a} = -2 \sum_{i=1}^N \left(y^o_i - ax_i - b \right) x_i$$

$$\frac{\partial Q}{\partial b} = -2 \sum_{i=1}^N \left(y^o_i - ax_i - b \right)$$

Quando igualamos as derivadas acima a zero, não mais temos os parâmetros a e b mas, as estimativas \hat{a} e \hat{b} que são Variáveis aleatórias (v.a.) pois são funções de variáveis aleatórias (os dados observados contém ruído experimental que resulta de uma realização de um fenômeno aleatório) então temos

$$\begin{cases} -2 \sum_{i=1}^N (y^o_i - \hat{a}x_i - \hat{b}) x_i = 0 \\ -2 \sum_{i=1}^N (y^o_i - \hat{a}x_i - \hat{b}) = 0 \end{cases}$$

Dividindo as duas equações por -2 temos

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^N y^o_i x_i - \hat{a} \sum_{i=1}^N x_i^2 - \hat{b} \sum_{i=1}^N x_i = 0 \\ \sum_{i=1}^N y^o_i - \hat{a} \sum_{i=1}^N x_i - \hat{b} N = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \hat{a} \sum_{i=1}^N x_i^2 + \hat{b} \sum_{i=1}^N x_i = \sum_{i=1}^N y^o_i x_i \\ \hat{a} \sum_{i=1}^N x_i + \hat{b} N = \sum_{i=1}^N y^o_i \end{cases}$$

A segunda equação fornece a estimativa do parâmetro b que é

$$\hat{b} = \frac{\sum_{i=1}^N y^o_i - \hat{a} \sum_{i=1}^N x_i}{N}$$

Substituindo a estimativa de b na primeira equação do sistema temos:

$$\hat{a} \sum_{i=1}^N x_i^2 + \left(\frac{\sum_{i=1}^N y^o_i - \hat{a} \sum_{i=1}^N x_i}{N} \right) \sum_{i=1}^N x_i = \sum_{i=1}^N y^o_i x_i$$

$$\hat{a} \left(\sum_{i=1}^N x_i^2 - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \sum_{i=1}^N x_i \right) = \sum_{i=1}^N y^o_i x_i - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y^o_i \sum_{i=1}^N x_i$$

$$\hat{a} = \frac{\sum_{i=1}^N y^o_i x_i - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y^o_i \sum_{i=1}^N x_i}{\sum_{i=1}^N x_i^2 - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \sum_{i=1}^N x_i}$$

$$\hat{a} = \frac{\sum_{i=1}^N y^o_i x_i - \sum_{i=1}^N y^o_i \frac{\sum_{i=1}^N x_i}{N}}{\sum_{i=1}^N x_i^2 - \sum_{i=1}^N x_i \frac{\sum_{i=1}^N x_i}{N}}$$

Chamando $\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^N x_i}{N}$ de média das coordenadas x_i temos:

$$\hat{a} = \frac{\sum_{i=1}^N y^o_i x_i - \sum_{i=1}^N y^o_i \bar{x}}{\sum_{i=1}^N x_i^2 - \sum_{i=1}^N x_i \bar{x}}$$

Vamos somar e diminuir o termo $\sum_{i=1}^N x_i \bar{x}$ no denominador da equação acima

$$\hat{a} = \frac{\sum_{i=1}^N y^o_i x_i - \sum_{i=1}^N y^o_i \bar{x}}{\sum_{i=1}^N x_i^2 - 2 \sum_{i=1}^N x_i \bar{x} + \sum_{i=1}^N x_i \bar{x}}$$

Veja que multiplicando e dividindo o último termo do denominador por N teremos

$\frac{N}{N} \sum_{i=1}^N x_i \bar{x} = N \bar{x}^2$. Substituindo este termo na equação acima obtemos:

$$\hat{a} = \frac{\sum_{i=1}^N y^o_i x_i - \sum_{i=1}^N y^o_i \bar{x}}{\sum_{i=1}^N x_i^2 - 2 \sum_{i=1}^N x_i \bar{x} + N \bar{x}^2}$$

$$\hat{a} = \frac{\sum_{i=1}^N y^o_i x_i - \sum_{i=1}^N y^o_i \bar{x}}{\sum_{i=1}^N x_i^2 - 2 \sum_{i=1}^N x_i \bar{x} + \sum_{i=1}^N \bar{x}^2} = \frac{\sum_{i=1}^N y^o_i (x_i - \bar{x})}{\sum_{i=1}^N x_i^2 - 2 x_i \bar{x} + \bar{x}^2}$$

$$\hat{a} = \frac{\sum_{i=1}^N y^o_i x_i - \sum_{i=1}^N y^o_i \bar{x}}{\sum_{i=1}^N x_i^2 - 2 \sum_{i=1}^N x_i \bar{x} + \sum_{i=1}^N \bar{x}^2}$$

$$\hat{a} = \frac{\sum_{i=1}^N y^o_i (x_i - \bar{x})}{\sum_{i=1}^N x_i^2 - 2 x_i \bar{x} + \bar{x}^2}$$

$$\hat{a} = \frac{\sum_{i=1}^N y^o_i (x_i - \bar{x})}{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$$

Avaliação da solução estimada:

Análise das Limitações: Todo o método de inversão elaborado ou utilizado estabelece premissas. Neste exemplo o método utilizado foi o método dos Mínimos Quadrados (MQ) que apresenta a seguinte limitação: “ a reta ajustada (IGRF) não passará por todos os pontos (dados das observações geofísicas) precisamente. A questão é: Até que ponto esta limitação não interfere na solução do problema geológico ?

Como simplificação deste problema estabeleci que o IGRF pode ser aproximado por um polinômio de ordem 1. Então uma das limitações desta simplificação é que o esta solução será válida para áreas muito pequenas onde o campo geomagnético varia linearmente.

Análise de estabilidade da solução na presença de ruído:

Esta análise pode ser feita via três diferentes formas:

Análise da estabilidade da solução na presença de ruído através da análise da solução analítica dos estimadores:

A análise primeira forma de estudo da estabilidade da solução na presença de ruído consiste em analisar a solução analítica dos estimadores. Veja que o estimador do parâmetro a é

$$\hat{a} = \frac{\sum_{i=1}^N y^o_i (x_i - \bar{x})}{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$$

Note que no numerador temos os dados observados da anomalia de Campo Total (y^o_i). Os dados observados em geofísica contém ruído experimental que resulta de uma realização de um fenômeno aleatório, ou seja, um fenômeno que não há uma lei determinística associada e portanto não pode ser previsto exatamente. Então o numerador do estimador \hat{a} contém as incertezas (ruído) dos dados observados.

Por outro lado, o denominador do estimador \hat{a} tem o termo $\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2$ que

chamaremos de termo de propagação dos erros. Note que este termo é função do número de observações N e das variáveis independentes x_i que representam a i -ésima coordenada de medida da i -ésima observação. Este termo de propagação do erro pode assumir um valor muito pequeno ou muito grande dependendo da escolha dos x_i ($i=1, \dots, N$). Veja que se os valores dos x_i ($i=1, \dots, N$) forem feitos próximos a \bar{x} (média dos x_i) então o termo $\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2$ será muito pequeno. Consequentemente, este termo $\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2$ funcionará como um AMPLIFICADOR dos erros (ruído experimental) contido nos dados observados em geofísica. Por outro lado, se os valores dos x_i ($i=1, \dots, N$) forem feitos distantes de \bar{x} , então o termo $\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2$ será muito grande. Consequentemente, este termo $\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2$ funcionará como um ATENUADOR dos erros (ruído experimental) contido nas observações em geofísica (y^o_i). Veja a seguir esta interpretação geometricamente através das Figuras 3-5.

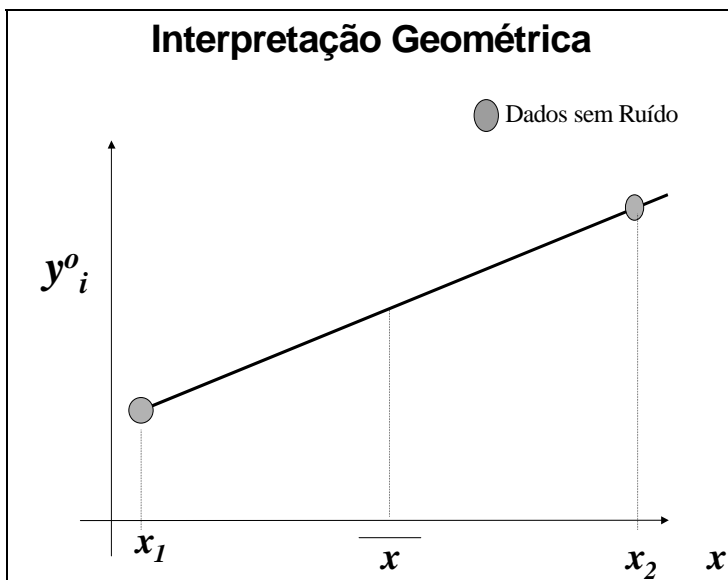


Figura 3

Considere duas observações geofísicas realizadas em x_1 e x_2 . Neste caso em que considero que as observações estão SEM RUÍDO (pontos cinza na Figura 3), a reta ajustada (reta tracejada) que representa o IGRF será coincidente com a reta original (reta contínua).

Agora vamos considerar dois casos distintos ambos com dados observados contaminados por ruído. No primeiro caso as observações com ruído (pontos pretos Figura 4) foram realizadas tendo as duas coordenadas x_1 e x_2 muito distantes de \bar{x} . Notamos que, neste caso (Figura 4) a reta ajustada (reta tracejada) é quase coincidente com a reta original ou teórica (reta contínua considerando os dados sem ruído) e se contaminarmos os dados observados com outra seqüência de variáveis aleatória (seqüência diferente de ruído) constataremos que a reta ajustada será também, neste caso, quase coincidente com a reta original caracterizando a ESTABILIDADE da solução estimada (estimativa dos parâmetros a e b).

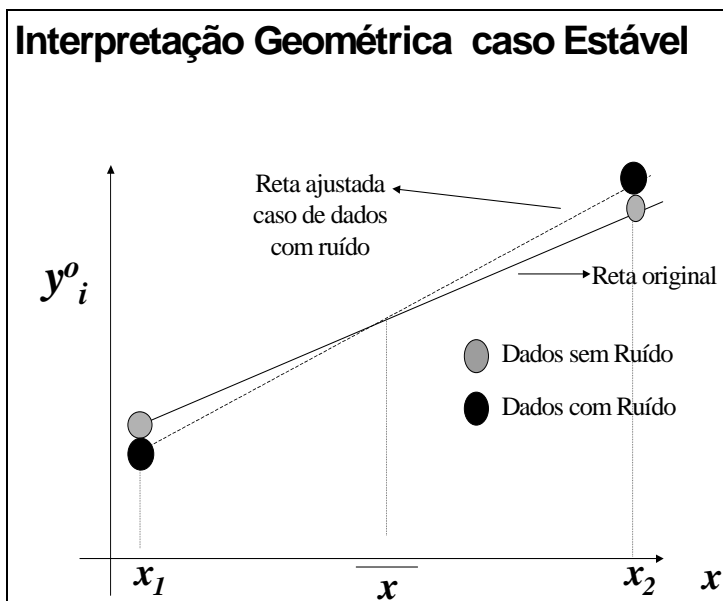


Figura 4

No segundo caso considerando dados observados contaminados com ruído, as observações com ruído (pontos pretos Figura 5) foram realizadas tendo as duas coordenadas x_1 e x_2 muito próximas de \bar{x} . Veja que neste caso (Figura 5) a

reta ajustada (reta tracejada) é completamente distante da reta original ou teórica (reta contínua considerando os dados sem ruído) e se contaminarmos os dados observados com outra seqüência de variáveis aleatória (seqüência diferente de ruído) constataremos que a reta ajustada será também, neste caso, diferente da reta original caracterizando a INSTABILIDADE da solução estimada (estimativa dos parâmetros a e b).

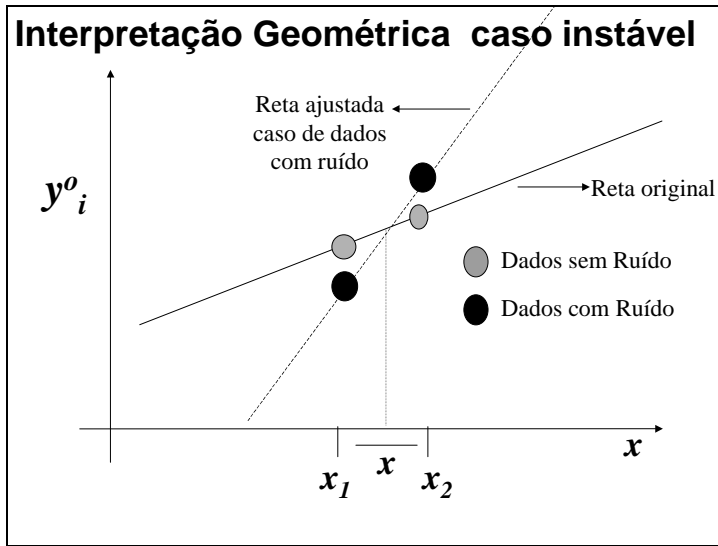


Figura 5

Neste problema inverso particular chegamos as seguintes conclusões:

1) A estabilidade da solução, caracteriza-se pelo ângulo formado entre as retas teórica e ajustada e depende das posições dos pontos x_i que são as coordenadas onde as observações são efetuadas.

2) Este problema inverso permite proceder a um desenho de experimento para tornar as soluções mais estáveis, para tanto as observações (ou seja, as coordenadas x_i onde elas devem estar localizadas) devem ser realizadas o mais distante de \bar{x} (média dos x 's) para que a solução seja a mais estável possível.

Neste exemplo de uma simples regressão linear nota-se que o grau de estabilidade da solução estimada poderia ser medido através do ângulo entre a reta teórica (retas contínuas nas Figuras 4 e 5) e a reta ajustada (retas tracejadas nas Figuras 4 e 5). Note que a reta teórica é formada os parâmetros verdadeiros que são os coeficientes a e b considerando dados perfeitos (livres de ruído) e a reta

ajustada é formada pelas estimativas \hat{a} e \hat{b} considerando dados com ruído experimental. Veja que estamos quantificando o grau de estabilidade via o ângulo formado entre as retas teórica e ajustada. Ressalto, no entanto, que este é um problema inverso controlado (sintético) em que sabemos quem são os parâmetros verdadeiros (os coeficientes a e b que formam a reta teórica). Lembre-se que em uma situação real não sabemos quem são os parâmetros verdadeiros do problema inverso, em outras palavras, nós desconheceríamos a reta teórica das Figuras 4 e 5. Vale ressaltar também, o caráter de extrema simplicidade deste problema inverso em que temos apenas dois parâmetros desconhecidos a serem estimados o que nos possibilitou a obtenção de uma expressão analítica dos estimadores \hat{a} e \hat{b} , e um estudo analítico da estabilidade da solução (termo de propagação do erro já discutido). Esta simplicidade viabilizou a realização de um desenho de experimento objetivando a obtenção de soluções mais estáveis.

Ressalto, no entanto, que em problemas reais trabalhamos com problemas mais complexos: problema envolvendo muitos parâmetros, com uma relação funcional menos simples e com o desconhecimento dos parâmetros verdadeiros do modelo. Em outras palavras, em problemas mais realistas não obtemos uma expressão analítica dos estimadores dos M parâmetros do modelo o que não nos permite operacionalizar o estudo sobre a estabilidade da solução na presença de ruído através da solução analítica dos estimadores. Mesmo nos casos simples como este em que obtemos a solução analítica dos estimadores (\hat{a} e \hat{b}), em uma situação realista nunca conhecemos os parâmetros verdadeiros (reta teórica), então é impossível quantificar a estabilidade da solução usando a solução verdadeira tal como fizemos neste exemplo em que concluímos que a estabilidade da solução caracteriza-se pelo ângulo formado entre as retas teórica e ajustada. Diante desta limitação prática pergunta-se: *Como avaliar e/ou quantificar a estabilidade da solução em problemas inversos mais realista?*

Há duas formas de fazermos esta análise da estabilidade da solução que não requer o conhecimento da solução verdadeira do problema inverso. A primeira

envolve conceitos estatísticos do estimador² $\hat{\mathbf{p}}$ do parâmetro desconhecido $\bar{\mathbf{p}}$, para tanto precisaremos estabelecer algumas premissas estatísticas sob o ruído que contamina os dados observados geofísicos. A segunda forma de análise da estabilidade da solução envolvem um procedimento prático que pode ser aplicado a dados sintéticos e reais.

Análise da estabilidade da solução na presença de ruído através da análise estatística da solução:

O estudo da estabilidade da solução pode ser realizado via uma análise estatística através da variância dos parâmetros. Como o estimador $\hat{\mathbf{p}}$ é uma variável aleatória lembramos que não há uma lei determinística associado a uma v.a. mas uma “lei probabilística” que é a função densidade de probabilidade (fdp). Tal como num fenômeno determinísticos, nos fenômenos aleatórios há parâmetros que podem ser empregados para caracterizar a fdp que são a Esperança e a variância da variável aleatória. Então podemos obter a Esperança de $\hat{\mathbf{p}}$ ($E[\hat{\mathbf{p}}]$) e Variância de $\hat{\mathbf{p}}$ ($V[\hat{\mathbf{p}}]$).

Mas qual é o significado físico destes dois parâmetros estatísticos? A Esperança de uma v.a. representa o “centro da distribuição de probabilidade” e a Variância de uma v.a. mede a dispersão de uma v.a. em relação ao seu valor esperado. Matematicamente, a Esperança de uma variável aleatória \mathcal{E} discreta com valores ε_i ($i=1, \dots, N$) sendo $P(\varepsilon_i)$ a função de probabilidade em ε_i então a Esperança de \mathcal{E} é :

$$E(\mathcal{E}) = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i P(\varepsilon_i)$$

e a Variância desta variável aleatória \mathcal{E} é:

$$V(\mathcal{E}) = E(\mathcal{E}^2) - [E(\mathcal{E})]^2$$

Já vimos anteriormente que, estatisticamente, um bom estimador $\hat{\mathbf{p}}$ é aquele que o valor esperado do estimador $\hat{\mathbf{p}}$ é igual ao parâmetro $\bar{\mathbf{p}}$ (ou seja, se $E[\hat{\mathbf{p}}] = \bar{\mathbf{p}}$) e adicionalmente seja um estimador com variância pequena. Em outras palavras, à luz

² Estimador $\hat{\mathbf{p}}$ é uma função que é uma variável aleatória porque depende dos dados observados que são

da estatística um bom estimador \hat{p} deve ser não tendencioso e de variância mínima. Então vamos calcular a esperança e variância dos estimadores \hat{a} e \hat{b} deste problema inverso. Para tanto precisamos estabelecer alguma premissas estatísticas sobre o ruído que contamina os dados (Anexo 3) e também sobre as demais variáveis do modelo matemático.

Esperança dos estimadores \hat{a} e \hat{b} :

Considerando as premissas estatísticas estabelecidas na Figura 6

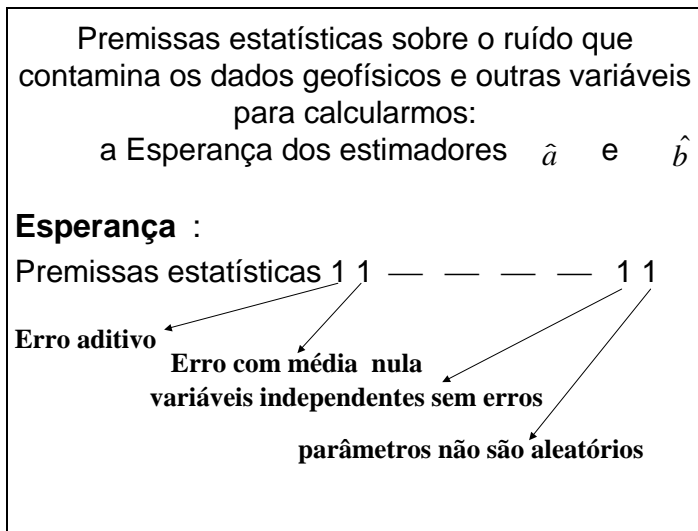


Figura 6

e as propriedades da esperança e variância (Anexo 2), vamos partir do estimador \hat{a}

$$\hat{a} = \frac{\sum_{i=1}^N y^o_i x_i - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y^o_i \sum_{i=1}^N x_i}{\sum_{i=1}^N x_i^2 - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \sum_{i=1}^N x_i}$$

$$\hat{a} = \frac{N \sum_{i=1}^N y^o_i x_i - \sum_{i=1}^N y^o_i \sum_{i=1}^N x_i}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \sum_{i=1}^N x_i \sum_{i=1}^N x_i}$$

v.a. porque contém ruído experimental (v.a.)

$$E[\hat{a}] = E \left[\frac{N \sum_{i=1}^N y^o_i x_i - \sum_{i=1}^N y^o_i \sum_{i=1}^N x_i}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \sum_{i=1}^N x_i \sum_{i=1}^N x_i} \right] = \frac{N E \left[\sum_{i=1}^N y^o_i x_i \right] - E \left[\sum_{i=1}^N y^o_i \sum_{i=1}^N x_i \right]}{N E \left[\sum_{i=1}^N x_i^2 \right] - E \left[\sum_{i=1}^N x_i \sum_{i=1}^N x_i \right]}$$

Usando a premissa 7 que x_i não são v.a.

$$E[\hat{a}] = \frac{N \sum_{i=1}^N x_i E[y^o_i] - \sum_{i=1}^N x_i \sum_{i=1}^N E[y^o_i]}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2}$$

Usando a premissa 1 que os erros são aditivos temos que $y^o_i = ax_i + b + \varepsilon_i$.

Então $E[y^o_i] = E[ax_i] + E[b] + E[\varepsilon_i]$.

Usando a premissa 8 que os parâmetros (a, b) não são v.a. e usando a premissa 2

que os erros tem média nula o que implica $E[\varepsilon_i] = 0$ temos que $E[y^o_i] = ax_i + b$.

$$E[\hat{a}] = \frac{N \sum_{i=1}^N x_i (ax_i + b) - \sum_{i=1}^N x_i \sum_{i=1}^N (ax_i + b)}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2}$$

$$E[\hat{a}] = \frac{N \sum_{i=1}^N ax_i^2 + N \sum_{i=1}^N bx_i - \sum_{i=1}^N x_i \sum_{i=1}^N ax_i - \sum_{i=1}^N x_i \sum_{i=1}^N b}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2}$$

$$E[\hat{a}] = \frac{N a \sum_{i=1}^N x_i^2 + Nb \sum_{i=1}^N x_i - a \sum_{i=1}^N x_i \sum_{i=1}^N x_i - Nb \sum_{i=1}^N x_i}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2}$$

$$E[\hat{a}] = \frac{a \left(N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2 \right)}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2}$$

$$E[\hat{a}] = a$$

Agora vamos achar a Esperança do estimador \hat{b} . Para tanto, partiremos do estimador \hat{b}

$$\hat{b} = \frac{\sum_{i=1}^N y_{oi} - \hat{a} \sum_{i=1}^N x_i}{N}$$

$$E[\hat{b}] = E \left[\frac{\sum_{i=1}^N y_{oi} - \hat{a} \sum_{i=1}^N x_i}{N} \right] = \frac{\sum_{i=1}^N E(y_{oi}) - E \left(\hat{a} \sum_{i=1}^N x_i \right)}{E(N)}$$

$$E[\hat{b}] = \frac{\sum_{i=1}^N ax_i + b - E[\hat{a}] \sum_{i=1}^N E(x_i)}{N}$$

$$E[\hat{b}] = \frac{a \sum_{i=1}^N x_i + \sum_{i=1}^N b - a \sum_{i=1}^N x_i}{N} = \frac{bN}{N}$$

$$E[\hat{b}] = b$$

Obtemos que $E[\hat{a}] = a$ e $E[\hat{b}] = b$ então concluímos que os estimadores \hat{a} e \hat{b} são estimadores não tendenciosos.

Variância dos estimadores \hat{a} e \hat{b} :

Consideraremos as premissas estatísticas estabelecidas na Figura 7, as propriedades da esperança e variância (Anexo 2) e partiremos do estimador \hat{a} dado por:

$$\hat{a} = \frac{\sum_{i=1}^N y^o_i (x_i - \bar{x})}{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$$

Considerando a propriedade da variância $V(c\varepsilon) = c^2V(\varepsilon)$ (Anexo 2) em que ε é uma v.a. e c uma constante e a premissa 7 que x_i não são v.a. (são constantes) temos então que

$$V[\hat{a}] = \frac{1}{\left(\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2\right)^2} V\left[\sum_{i=1}^N y^o_i (x_i - \bar{x})\right]$$

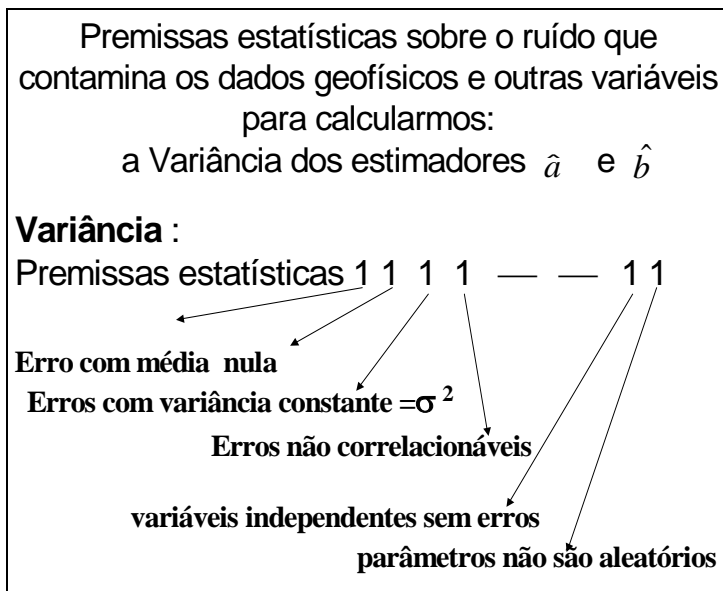


Figura 7

Usando a premissa 1 que os erros são aditivos temos que $y^o_i = ax_i + b + \varepsilon_i$, usando a premissa 7 que x_i não são v.a., usando a premissa 8 que os parâmetros

(a, b) não são v.a. e considerando a propriedade da variância $V(c + \varepsilon) = V(\varepsilon)$ em que ε é uma v.a. e c temos que

$$V(y^o_i) = V(\varepsilon_i)$$

Usando a premissa 3 que os erros com variâncias constantes e igual a σ^2 , ou seja, $V(y^o_i) = V(\varepsilon_i) = \sigma^2 \quad i = 1, \dots, N$ então

$$V[\hat{a}] = \frac{1}{\left(\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \right)^2} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \sigma^2$$

$$V[\hat{a}] = \frac{\sigma^2 \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}{\left(\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \right)^2}$$

$$V[\hat{a}] = \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$$

Agora vamos achar a Variância do estimador \hat{b} . Para tanto, partiremos do estimador \hat{b}

$$\hat{b} = \frac{\sum_{i=1}^N y^o_i - \hat{a} \sum_{i=1}^N x_i}{N}$$

$$V[\hat{b}] = V\left[\frac{\sum_{i=1}^N y^o_i}{N} \right] - V\left[\frac{\hat{a} \sum_{i=1}^N x_i}{N} \right]$$

$$V[\hat{b}] = \frac{\sum_{i=1}^N V(y_i)}{N^2} + (-\bar{x})^2 V[\hat{a}]$$

$$V[\hat{b}] = \frac{\sum_{i=1}^N \sigma^2}{N^2} + (-\bar{x})^2 \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$$

$$V[\hat{b}] = \frac{N \sigma^2}{N^2} + \frac{\bar{x}^2 \sigma^2}{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$$

$$V[\hat{b}] = \frac{\sigma^2}{N} + \frac{\bar{x}^2 \sigma^2}{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$$

$$V[\hat{b}] = \frac{\sigma^2 \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 + N \bar{x}^2 \sigma^2}{N \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$$

$$V[\hat{b}] = \frac{\sigma^2 \sum_{i=1}^N (x_i^2 - 2x_i \bar{x} + \bar{x}^2) + N \sigma^2 \bar{x}^2}{N \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$$

$$V[\hat{b}] = \frac{\sigma^2 \sum_{i=1}^N x_i^2 - \sigma^2 2\bar{x} \sum_{i=1}^N x_i + N \sigma^2 \bar{x}^2 + N \sigma^2 \bar{x}^2}{N \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$$

$$V[\hat{b}] = \frac{\sigma^2 \sum_{i=1}^N x_i^2 - \sigma^2 2\bar{x} \sum_{i=1}^N x_i + 2N \sigma^2 \bar{x}^2}{N \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$$

$$V[\hat{b}] = \frac{\sigma^2 \sum_{i=1}^N x_i^2 - 2\sigma^2 \bar{x} \frac{N \sum_{i=1}^N x_i}{N} + 2N\sigma^2 \bar{x}^2}{N \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$$

$$V[\hat{b}] = \frac{\sigma^2 \sum_{i=1}^N x_i^2 - 2N\sigma^2 \bar{x}^2 + 2N\sigma^2 \bar{x}^2}{N \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$$

$$V[\hat{b}] = \frac{\sigma^2 \sum_{i=1}^N x_i^2}{N \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$$

Interpretações das variâncias de \hat{a} e \hat{b} :

Vimos que

$$V[\hat{a}] = \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2} \quad \text{e} \quad V[\hat{b}] = \frac{\sigma^2 \sum_{i=1}^N x_i^2}{N \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$$

As expressões acima mostram que as variâncias dos parâmetros são compostas de suas parcelas:

1) premissas sobre a variância dos ruídos contidos nas observações (σ^2) que reflete as incertezas dos dados medidos

2) termo de propagação do ruído que no caso da $V[\hat{a}]$ este termo é

$$\frac{1}{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2} \quad \text{e no caso da } V[\hat{b}] \text{ este termo é } \frac{\sum_{i=1}^N x_i^2}{N \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$$

Desejamos que as variâncias de \hat{a} e \hat{b} sejam mínimas para garantia da estabilidade da solução, então o que fazer, neste exemplo simples:

1) Diminuir σ^2 : Significa realizar medidas mais precisas o que é na prática impossível e veremos mais a frente que não é suficiente para garantir a estabilidade.

2) Diminuir o termo de amplificação: Veja que vale a mesma análise realizada anteriormente porque os termos de propagação dependem do número de observações N e das variáveis independentes x_i . Como já dissemos anteriormente, dependendo da escolha dos x_i em relação a \bar{x} os termos de propagação podem amplificar ou atenuar os erros das observações (σ^2). Tal como já discutimos anteriormente, se os valores dos x_i ($i=1, \dots, N$) forem feitos distantes de \bar{x} então o termo $\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2$ será muito grande funcionando como um ATENUADOR dos erros (σ^2) o que implicará numa variância pequena de \hat{a} e \hat{b} (ESTABILIDADE DA SOLUÇÃO). Caso contrário, se os valores dos x_i ($i=1, \dots, N$) forem feitos próximos de \bar{x} então o termo $\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2$ será muito pequeno funcionando como um AMPLIFICADOR dos erros (σ^2) o que implicará numa variância grande de \hat{a} e \hat{b} (INSTABILIDADE DA SOLUÇÃO)

Análise da estabilidade da solução na presença de ruído através de um procedimento prático

Na prática existe um eficiente meio de analisarmos se uma solução é estável que pode ser usado para observações sintéticas (dados geofísicos simulados) e para observações reais (dados geofísicos medidos) que consiste das seguintes etapas:

- 1) contamine as suas observações com uma determinada sequência de números pseudo-aleatórios (veja comentários no Anexo 4);
- 2) aplique o estimador (neste caso são os estimadores \hat{a} e \hat{b}) e visualize a solução estimada;
- 3) modifique a semente do gerador de números pseudo-aleatórios;

- 4) aplique novamente o mesmo estimador, visualize a nova solução estimada e;
- 5) compare as soluções estimadas nas etapas (2) e (4). Se elas estiverem “próximas” entre si, o problema inverso formulado é bem posto e a solução é estável. Caso contrário o problema é mal-posto pois a solução é instável.

Como decidir se as soluções estão “próximas” entre si (solução é estável) ?

O grau de proximidade entre as soluções obtidas do modo acima descrito é estabelecido pelo usuário e depende da incerteza que ele admite para a solução em decorrência de ruído nos dados. Ao gerar um certo número de soluções (10 ou mais), cada uma com uma seqüência de ruído diferente (como explicamos no Anexo 4), o usuário pode inspecionar graficamente essas soluções e avaliar se elas estão dentro da margem de erro aceitável. Alternativamente, ele pode armazenar todas as estimativas obtidas para todos os parâmetros e fazer uma análise estatística, computando o desvio padrão amostral de cada parâmetro e verificando se eles estão dentro do limite de incerteza aceitável estabelecido pelo usuário. Então temos que primeiro estabelecer a priori um limiar aceitável para a incertezas dos parâmetros. Este limiar é o erro máximo permitido para a determinação de cada parâmetro. Em seguida, contamine os dados observados com L seqüências diferentes de números pseudo-aleatórios com as mesmas características estatísticas, mudando-se apenas as L sementes. Desta forma teremos L vetores de observações com ruído aditivo

$\bar{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}^k}$, $k=1,2,\dots,L$. Posteriormente, para cada um dos L vetores

$\bar{\mathbf{y}}^{\mathbf{o}^k}$ ($k=1,2,\dots,L$), aplique o mesmo estimador obtendo-se, assim, L vetores

estimativas $\hat{\mathbf{p}}^k$ ($k=1,2,\dots,L$) e compute para a estimativa de cada parâmetro o desvio padrão amostral. Assim, para o j-ésimo parâmetro P_j o desvio amostral

$S(\hat{p}_j)$ é:

$$s(\hat{p}_j) = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^L \left(\hat{p}_j^k - \bar{p}_j^k \right)^2}{L - 1}}$$

em que \hat{p}_j^k é a j-ésima estimativa do k-ésimo vetor de estimativas dos parâmetros $(\hat{\mathbf{p}}^k)$, \bar{p}_j^k é a média amostras das estimativas de \hat{p}_j^k , $(k = 1, 2, \dots, L)$. Finalmente, compare se o valor do desvio padrão amostral $s(\hat{p}_j)$ para o j-ésimo parâmetro é menor ou igual ao valor o valor estabelecido a priori do limiar aceitável para a incertezas dos parâmetros. Se for menor, a solução é considerável estável em relação a determinação do i-ésimo parâmetro. Esse mesmo procedimento pode se aplicado a todos os M parâmetros ou a grupos selecionados de parâmetros (dependendo do interesse).

Assim por exemplo, se todos os nossos parâmetros são M vagarosidades no interior da Terra poderíamos estabelecer que o máximo erro permitido para a determinação de cada uma das M vagarosidades é 0.01 s/m. Suponha que usamos 3 seqüências (L= 3) diferentes de números pseudos-aleatórios, temos portanto 3 vetores de observações com ruído aditivo $\bar{\mathbf{y}}^{0^k}$ ($k=1,2,3$). Suponha que em 3 inversões usando $\bar{\mathbf{y}}^{0^k}$ ($k=1,2,3$) os valores das estimativas do j-ésimo parâmetro são $\hat{p}_j^1 = 0.504 \text{ s / m}$, $\hat{p}_j^2 = 0.497 \text{ s / m}$ e $\hat{p}_j^3 = 0.513 \text{ s / m}$. O desvio padrão amostral $s(\hat{p}_j)$ para o j-ésimo parâmetro P_j é 0.0080 s/m.

Assim, a solução é considerada estável em relação à determinação do j-ésimo parâmetro uma vez que $s(\hat{p}_j) = 0.008 \text{ s / m} < 0.01 \text{ s / m}$

Análise da Unicidade da solução:

Como vimos anteriormente, a estabilidade não é uma grandeza objetiva e sim uma grandeza semiquantitativa. Portanto, só podemos dizer que uma solução é mais (ou menos) estável que outra. Qualquer tentativa de caracterizar a estabilidade em termos absolutos (afirmar que uma solução é ou não estável) depende da conceituação prévia sobre o limiar de erro nas estimativas dos parâmetros, a partir do qual consideramos a solução estável. Diferentemente, a unicidade é um conceito matemático em que só há duas possibilidades: ou a solução é única ou não.

Vamos neste problema fazer esta análise da unicidade da solução diretamente via a expressão analítica dos estimadores. Veja que o estimador do parâmetro a é

$$\hat{a} = \frac{\sum_{i=1}^N y^o_i (x_i - \bar{x})}{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$$

Note que se temos apenas uma observação ($N=1$) o denominador do estimador do parâmetro a é zero o que implica na existência de infinitas possíveis soluções (infinitas retas ajustantes) que minimizam o funcional Q no sentido dos mínimos quadrados (Figura 8). Neste caso temos a não unicidade da solução.

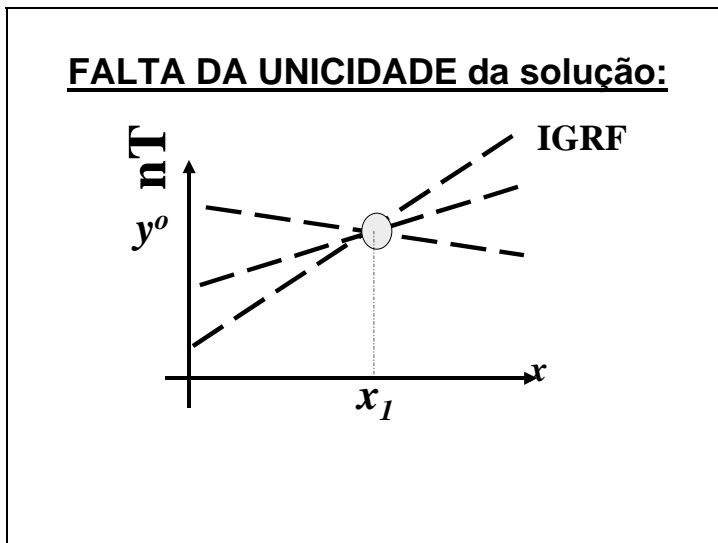


Figura 8