Valéria Cristina F. Barbosa
Observatório Nacional

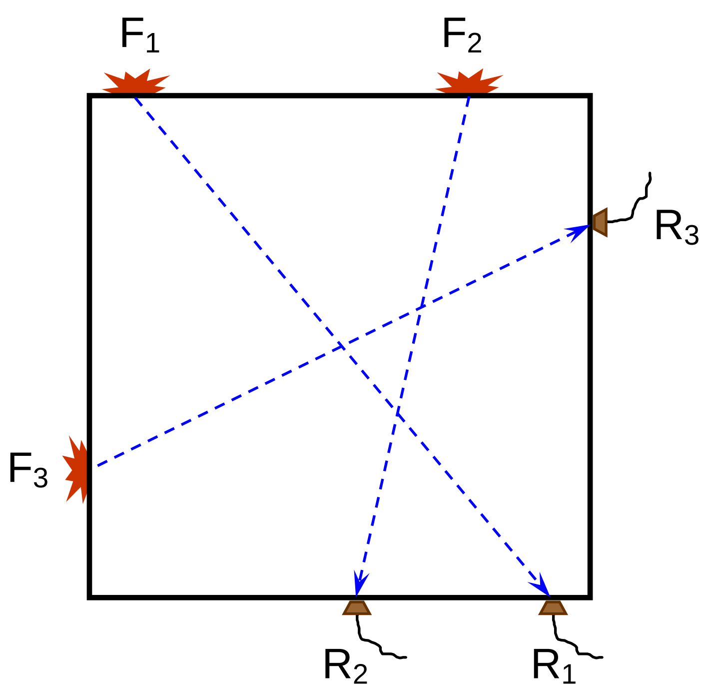
APLICAÇÕES DA TEORIA DA INVERSÃO À INTERPRETAÇÃO GEOFÍSICA

PROJETO: ***TOMOGRAFIA PRÉ-PITAGÓRICA***

1. FORMULAÇÃO

1.1 Problema geológico

Considere uma concepção pré-pitagórica da Terra, cuja seção típica é mostrada na Figura 1. Deseja-se obter informação sobre a estrutura interna da Terra a partir de uma tomografia simplificada. Considere o tempo de trânsito de uma onda elástica, que é gerada por uma fonte F e registrada no receptor R, ambos na superfície. A partir de medidas de tempo de trânsito na superfície, queremos estimar a variação espacial da vagarosidade das ondas sísmicas no interior da Terra.

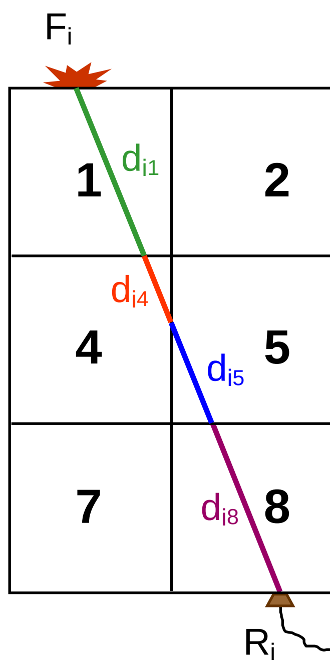


1.2 Simplificações

a) Presume-se que as nove células mostradas na Figura abaixo sejam suficientes para descrever a variação da vagarosidade no interior da Terra.

b) Presume-se que a distribuição da propriedade física (vagarosidade) é constante dentro de uma célula quadrada e que de uma célula para outra a vagarosidade possa variar.

c) Desprezam-se os efeitos de refração do raio ao entrar ou sair de uma determinada célula.



1.3 Relação funcional (modelo direto)

O tempo total de trânsito t_i de uma onda gerada em F_i e registrada em R_i será soma dos tempos gastos pela onda para atravessar cada célula envolvida em sua trajetória. No caso ilustrado na Figura acima teremos:

$$t_i = d_{i1}\, p_1 + d_{i4}\, p_4 + d_{i5}\, p_5 + d_{i8}\, p_8 \qquad (1)$$

em que d_{ij} é a distância que a onda, associada à *i*-ésima observação, percorre dentro da *j*-ésima célula e p_j é a vagarosidade da *j*-ésima célula.

1.4 Problema matemático

Se considerarmos N observações, ou seja, N posições diferentes para o par **Fonte-Receptor**, teremos um sistema de N equações lineares:

$$\begin{bmatrix} \otimes & \otimes & \otimes & \otimes & \otimes & \otimes & \otimes & \otimes & \otimes \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \otimes & \otimes & \otimes & \otimes & \otimes & \otimes & \otimes & \otimes & \otimes \\ d_{i1} & 0 & 0 & d_{i4} & d_{i5} & 0 & 0 & d_{i8} & 0 \\ \otimes & \otimes & \otimes & \otimes & \otimes & \otimes & \otimes & \otimes & \otimes \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \otimes & \otimes & \otimes & \otimes & \otimes & \otimes & \otimes & \otimes & \otimes \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \\ p_4 \\ p_5 \\ p_6 \\ p_7 \\ p_8 \\ p_9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_1 \\ \vdots \\ t_{i-1} \\ t_i \\ t_{i+1} \\ \vdots \\ t_N \end{bmatrix}, \qquad (2)$$

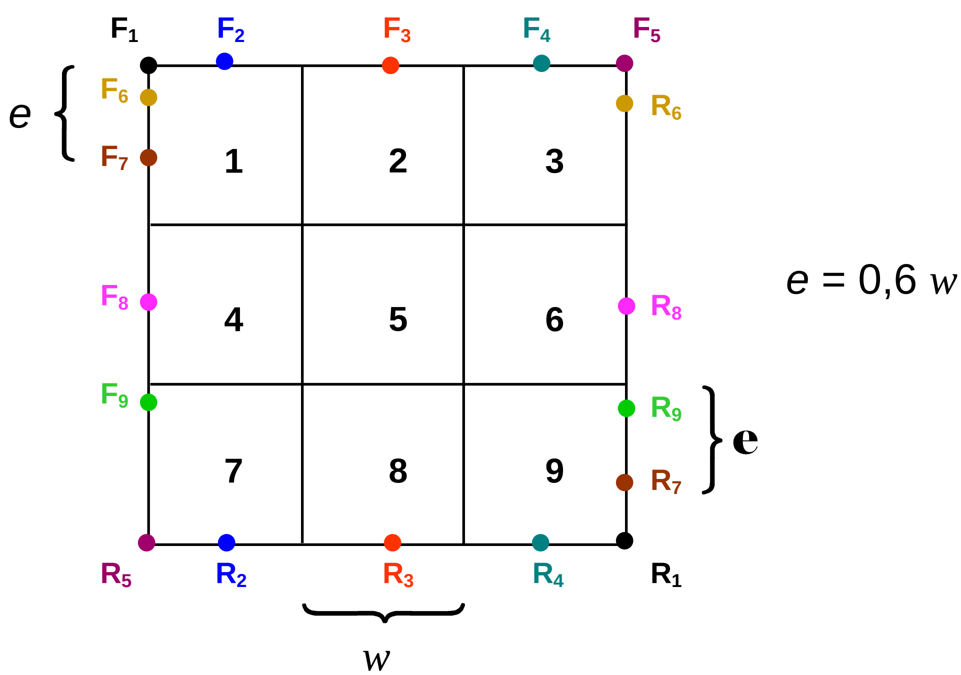
ou, em notação matricial:

$$\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{p} = \mathbf{y}\,. \qquad (3)$$

1.5 Obtenção da matriz A e do vetor de observações sintéticas y:

Obtenha a matriz ***A*** de acordo com a metodologia exemplificada na equação (1), para o caso das nove observações associadas ao layout de transmissores-receptores representados na Figura abaixo

.



em que a largura w da célula é um valor arbitrário.

Obtenha observações sintéticas do seguinte modo:

a) Assinale valores numéricos aos elementos do vetor de parâmetros ***p***. Cada conjunto de nove valores de parâmetros representa um tipo de distribuição de vagarosidade no interior da Terra e constituirá o corpo "real".

b) Para cada vetor ***p*** com elementos especificados de acordo com o item (a), obtenha o vetor de observações sintéticas exatas, $\mathbf{y}$, efetuando o produto ***Ap***.

c) Some a cada elemento do vetor $\mathbf{y}$, obtido no item (b), a realização de uma variável aleatória com distribuição uniforme definida no intervalo [-*b*, *b*], sendo $b=|0.02\ y_{MAX}|$, ou seja 2 % do maior elemento de $\mathbf{y}$ em módulo. Desse modo, obtém-se o vetor de observações sintéticas com ruído $\mathbf{y}^{o}$. A realização da variável aleatória acima referida deve ser obtida através de um gerador de números pseudo-aleatórios. Existem várias rotinas em Fortran para gerar esses números e muitos aplicativos atualmente já dispõem de funções internas que operam com números pseudo-aleatórios. Os números pseudo-aleatórios formam seqüências que podem ser reproduzidas sempre que se desejar, ao passo que uma seqüência de números aleatórios nunca se repete. Uma seqüência específica de números pseudo-aleatórios depende apenas de uma "semente", que é um número (em geral inteiro) especificado pelo usuário. Assim, diferentes sementes geram seqüências diferentes de números pseudo-aleatórios, que podem ser reproduzidas exatamente, bastando especificar a mesma semente.
Gere alguns vetores $\mathbf{y}_i^{o}$, i=1, 2,... L, somando aos elementos do vetor exato $\mathbf{y}$, L seqüências diferentes de números pseudo-aleatórios, simulando, por exemplo, a coleta das mesmas observações em tempos distintos. A cada coleta, a seqüência de ruído é diferente, mantendo-se todavia as características estatísticas do ruído. Estes vetores $\mathbf{y}_i^{o}$ serão usados para avaliar se uma determinada solução é ou não estável, como será descrito adiante.

2. CONSTRUÇÃO

A seguir, os seguintes métodos de inversão deverão ser aplicados **separadamente** às observações sintéticas geradas de acordo com o procedimento acima definido:

- "Ridge regression"
- Suavidade global
- Compacidade no entorno do centro da distribuição de propriedade física
- Mínimo momento de inércia

Cada um dos métodos acima deverá ser aplicado a observações geradas por dois conjuntos diferentes de parâmetros verdadeiros (item 1-5 a). Um dos conjuntos deve refletir um ambiente geológico (distribuição particular de propriedade física) em que o método **não seja** adequado, ou, em outras palavras, em que o método não incorpore informação geológica factual. O outro conjunto deve refletir um ambiente geológico em que o método **seja** adequado.

Ao construir os ambientes acima, não é necessário simular uma Terra como ela realmente é. Assim, pode-se supor de modo fictício que a Terra apresenta, por exemplo, distribuições de vagarosidade seguindo direções preferenciais.

O estimador geral para estes quatro métodos é dado por:

$$\hat{\mathbf{p}} = (\mathbf{A}^T\mathbf{A} + \mu_r\mathbf{I} + \mu_s\mathbf{W}_s + \mu_c\mathbf{W}_c + \mu_i\mathbf{W}_i)^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{y}^o\,, \tag{4}$$

em que μ_r, μ_s, μ_c e μ_i são escalares não negativos conhecidos como "Multiplicadores de Lagrange" $\mathbf{I}$ é a matriz identidade e $\boldsymbol{W}_s = \boldsymbol{R}^T \boldsymbol{R}$, em que $\boldsymbol{R}$ é dada por

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},$$

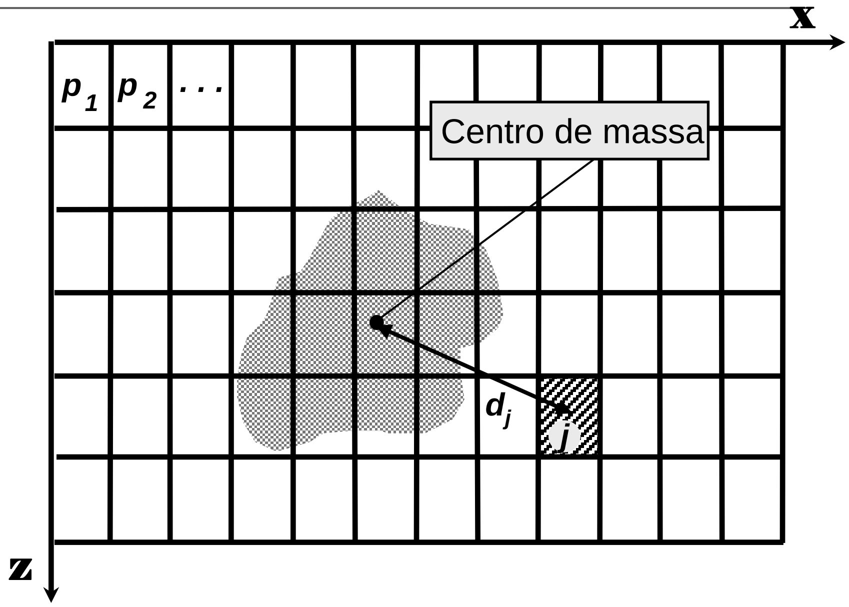
representando o vínculo de proximidade entre todos os parâmetros adjacentes:

$p_1 \leftrightarrow p_2$
$p_2 \leftrightarrow p_3$
$p_4 \leftrightarrow p_5$
$p_5 \leftrightarrow p_6$
$p_7 \leftrightarrow p_8$
$p_8 \leftrightarrow p_9$
$p_1 \leftrightarrow p_4$
$p_2 \leftrightarrow p_5$
$p_3 \leftrightarrow p_6$
$p_4 \leftrightarrow p_7$
$p_5 \leftrightarrow p_8$
$p_6 \leftrightarrow p_9$.

A matriz $\boldsymbol{W}_c$ é uma matriz diagonal com elementos diagonais dados por

$$w_{jj} = \frac{d_j^2}{\left|\hat{p}_j\right| + \varepsilon} , \tag{5}$$

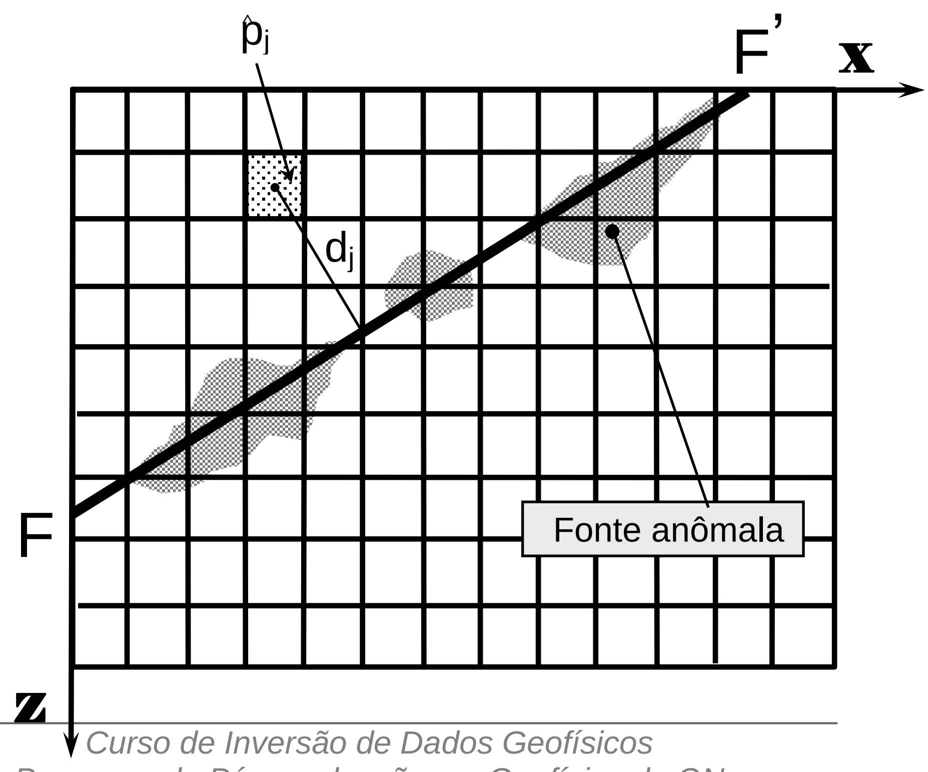
sendo ε um número pequeno (0.00001), $\hat{p}_j$ a estimativa do j-ésimo parâmetro e d_j a distância do centro da j-ésima célula elementar ao centro da distribuição de propriedade física conforme ilustrado na Figura abaixo.



A matriz $\mathbf{W}_i$ é uma matriz diagonal com elementos diagonais dados por

$$w_{jj} = \frac{d_j^2}{|\hat{p}_j| + \varepsilon} \,, \tag{6}$$

sendo ε um número pequeno (0.00001), $\hat{p}_j$ a estimativa do j-ésimo parâmetro e d_j a distância do centro da j-ésima célula elementar ao eixo onde a propriedade física será concentrada conforme ilustrado na Figura abaixo.



Para aplicar o método do "Ridge regression", assinalar valores nulos a μ_s, μ_c e μ_i. O valor a ser assinalado a μ_r deve ser o menor valor que produza soluções estáveis (determine se uma solução é estável ou não pelo procedimento descrito no Apêndice). A razão desta escolha é que a informação a priori introduzida pelo "Ridge regression" raramente reflete uma informação geológica de fato. Ela impõe uma perda de resolução em troca de um aumento de estabilidade. Quanto maior for μ_r , maior será a perda de resolução e maior a estabilidade das soluções. Por essa razão, μ_r deve ser o menor possível ainda produzindo soluções estáveis, de modo a garantir estabilidade com mínima perda de resolução.

Da mesma forma para aplicar o método da Suavidade global, assinalar valores nulos a μ_r, μ_c e μ_i um valor a μ_s determinado pelo procedimento descrito acima.

Para a "Compacidade no entorno do centro da distribuição de propriedade física" ou o "Mínimo momento de inércia", assinalar valores nulos a μ_r, μ_s e μ_i ou μ_r, μ_s e μ_c, respectivamente, e determinar os valores de μ_c e μ_i da seguinte maneira. Partindo do pressuposto que sejam confiáveis as informações a priori que a fonte anômala é isométrica (no caso da "Compacidade no entorno do centro da distribuição de propriedade física") e alongada segundo uma direção (no caso do "Mínimo momento de inércia"), então μ_c e μ_i devem ser os maiores valores ainda produzindo um ajuste aceitável aos dados geofísicos. Para determinar esses valores, comece com valores pequenos de μ_c e μ_i , aumentando-os gradativamente. Para cada valor atribuído a μ_c ou μ_i verifique se os dados são ajustados dentro da precisão experimental

NOTA IMPORTANTE:

A equação (4) não pode ser usada para estimar diretamente o vetor de parâmetros **p** no caso da Compacidade e do Mínimo momento de inércia porque as matrizes $\mathbf{W_c}$ e $\mathbf{W_i}$, nestes casos são funções de **p**, de modo que $\hat{\mathbf{p}}$ deve ser obtido iterativamente. Inicia-se com $\mathbf{W_c}$ (ou $\mathbf{W_i}$) igual à matriz identidade na equação (4), obtendo-se $\hat{\mathbf{p}}^{(1)}$, a estimativa de **p** na primeira iteração. Esta estimativa é introduzida na equação (5) no caso da Compacidade ou na equação (6) no caso do Mínimo momento de inércia, a fim de produzir $\mathbf{W}^{(1)}$, a aproximação da matriz $\mathbf{W_c}$ (ou $\mathbf{W_i}$) na primeira iteração. Esta, por sua vez, é usada na equação (4) para produzir $\hat{\mathbf{p}}^{(2)}$, e assim sucessivamente. Este processo iterativo favorece soluções exibindo concentração de valores altos de contraste de propriedade física ao longo do eixo especificado. Se, durante alguma iteração, a estimativa do contraste de propriedade física de alguma célula exceder os limites: inferior (zero) ou superior (igual ao contraste de propriedade física do corpo, conhecido a priori), a estimativa nessa célula é fixada no valor da borda violada e um valor alto é atribuído ao elemento diagonal de $\mathbf{W_c}$ (ou $\mathbf{W_i}$) correspondente a essa célula. Na prática esse valor não precisa ser tão alto assim: 5 ou 10 são valores razoáveis. Concomitantemente, a resposta teórica produzida por essa célula com contraste de propriedade física igual ao valor da borda violada é removida das observações.

Este procedimento de “congelar” as estimativas nas bordas leva a uma redistribuição em que o contraste de propriedade física do corpo tenderá a ser homogêneo e igual ao valor máximo estabelecido a priori pelo usuário. As estimativas finais em cada célula tenderão a zero ou ao valor presumido para o contraste, produzindo uma melhor definição dos contornos do corpo anômalo. O processo iterativo acima descrito é interrompido quando a máxima propriedade física estimada nas células não ultrapassa um percentual (tipicamente entre 10 % e 20 %) do contraste de propriedade física estabelecido pelo intérprete como sendo o contraste mais próximo do verdadeiro.

Havendo dificuldade na implementação do processo iterativo de congelamento acima descrito, uma alternativa mais simples, mas que produz resultados inferiores, é definir as matrizes $\mathbf{W_c}$ e $\mathbf{W_i}$ como matrizes diagonais com elementos diagonais dados por:

$$w_{ii} = \frac{1}{q^2 + \varepsilon},$$

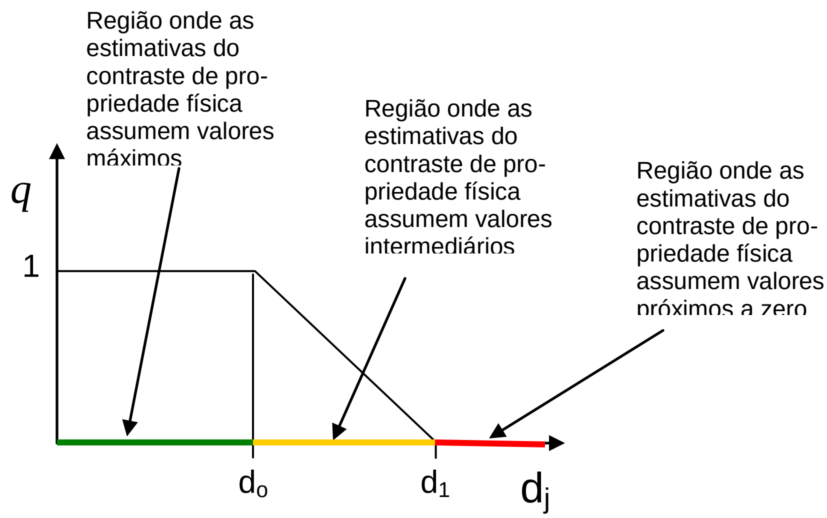
em que q pode assumir os seguintes valores:

$q = 1$ se $d_j < d_o$

$q = \dfrac{d_o + d_1 - d_j}{d_1}$, se $d_o \le d_j < d_o + d_1$

$q = 0$, se $d_j \ge d_o + d_1$

sendo d_j a mesma grandeza definida junto às equações (5) e (6). A Figura abaixo ilustra graficamente o comportamento de q am função de d_j.



Os valores de d_o e d_1 dependerão da unidade da malha que compõe o modelo interpretativo e de quão intensamente o usuário quer concentrar o contraste de propriedade física ao longo do eixo

Um relatório sucinto, mas substanciado, deve ser elaborado descrevendo os resultados obtidos em decorrência das aplicações dos quatro métodos acima descritos. Por "*substanciado*" entende-se a comprovação (com gráficos, tabelas, etc.) das asserções mais relevantes, por exemplo: "a solução é estável com tal multiplicador de Lagrange" ou O método X não funciona bem em tal ambiente geológico. Resultados gráficos devem ser preferencialmente adotados ao invés de dados tabulados. Uma listagem do código-fonte usado nestas aplicações deve acompanhar o relatório como um apêndice.

APÊNDICE

Procedimento para determinar se uma solução é estável:

a) atribua um valor não nulo a um multiplicador de Lagrange μ_t, $t = r$, s, c ou i; todos os outros devem ser nulos, ou seja, apenas um tipo de vínculo é usado de cada vez;

b) contamine as observações com uma determinada seqüência de números pseudo-aleatórios de acordo com as instruções da seção 1.5 -c;

c) aplique o estimador dado na equação (4) e visualize a solução;

d) modifique a semente do gerador de números pseudo-aleatórios;

e) Aplique novamente o estimador dado pela equação (4) e visualize a nova solução;

f) compare as soluções obtidas em (c) e (e). Se elas estiverem "próximas" entre si, o problema formulado é estável. Caso contrário ele é instável.

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, 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. Por exemplo, o usuário estabelece a priori que o máximo erro permitido para a determinação das espessuras é 1 m. Suponha que em três inversões usando diferentes seqüências de números pseudo-aleatórios que contaminam as observações, os valores das estimativas do i-ésimo parâmetro são 50.4 m, 49.7 m e 51.3 m. O desvio padrão amostral dessas três estimativas é dado por

$$s = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{L}(\hat{h}_i - \bar{h})^2}{L-1}} ,$$

em que L é o número de estimativas (3 nesse exemplo), $\hat{h}_i$ é a i-ésima estimativa e $\bar{h}_i$ é a média amostral das estimativas. Para o exemplo acima o valor de *s* é 0.8. Assim, a solução é considerada estável em relação à determinação do i-ésimo parâmetro. Esse mesmo procedimento pode ser aplicado a todos os outros parâmetros ou a grupos selecionados de parâmetros, dependendo sempre do interesse do usuário.

A decisão se uma solução é estável é portanto subjetiva e depende de como o usuário conceitua estabilidade. Estabilidade não é uma grandeza objetiva como unicidade em que só há duas possibilidades: ou a solução é única ou não. Estabilidade é uma grandeza semiquantitativa. Só podemos afirmar objetivamente que uma solução é mais (ou menos) estável que outra. Qualquer tentativa de caracterizar estabilidade em termos absolutos (afirmar que uma solução é ou não estável) depende da conceituação prévia do usuário sobre o limiar de erro nas estimativas dos parâmetros, a partir do qual o usuário considera uma solução instável.