Teoria da Inversão

Prof. Giuliano Sant'Anna Marotta

marotta@unb.br

Observatório Sismológico

Instituto de Geociências - Universidade de Brasília

PARTE 1

Introdução

Teoria da inversão

Pode ser definida como a **arte de estimar parâmetros de modelos a partir de dados conhecidos (observações)**. Portanto, **requer** a definição de **modelo** capaz de, por meio dos **parâmetros conhecidos**, **prever os dados** de interesse.

Além da estimativa de parâmetros, a teoria da inversão também pode ser usada para estimar a "**qualidade**" **dos parâmetros** do modelo previsto, **uma vez conhecidas as incertezas dos dados conhecidos**.

Definições Básicas

Problema direto: O processo (matemático) de **predição de dados** com base em algum **modelo físico ou matemático** por meio de um determinado **conjunto de parâmetros** do modelo.

Parâmetros do modelo → Modelo → Dados

Exemplo: O **tempo de percurso** $\boldsymbol{t}$ de uma onda sísmica que passa por $\boldsymbol{M}$ **camadas** de **espessura** $\boldsymbol{h_i}$ e **velocidade** $\boldsymbol{v_i}$ é dado por:

$$\boldsymbol{t} = \sum_{i=1}^{M} \frac{h_i}{v_i}$$

Definições Básicas

Problema inverso: O processo (matemático) de **estimar os valores** numéricos, e **incertezas associadas**, de um **conjunto de parâmetros** presentes um **modelo definido**, baseado em um **conjunto de dados** ou observações.

Dados → Modelo → Parâmetros do modelo

Exemplo: pode-se **inverter o tempo de percurso *t*** e **determinar as velocidades das camadas**. Neste caso seria necessário **conhecer o modelo** (matemático) que **relaciona** o **tempo de percurso** às **informações de espessura e velocidades** das camadas.

$$t = \sum_{i=1}^{M} \frac{h_i}{v_i}$$

Definições Básicas

Dados: São as **observações**, ou medições, feitas na tentativa de **restringir a solução** de algum **problema de interesse**.

Modelo: A **relação** entre os **parâmetros e** os **dados**.

Parâmetros: As **quantidades numéricas**, ou desconhecidas, **que se deseja estimar**.

Exemplo: $\boldsymbol{t}$ é um tipo de dado; somente $\boldsymbol{v_i}$ são consideradas **parâmetros do modelo;** e **pode-se** simplificar o problema e tratá-lo em termos de **vagarosidade** $\boldsymbol{s_i}$, onde:

$$s_i = \frac{1}{\boldsymbol{v_i}} | t = \sum_{i=1}^{M} h_i . \boldsymbol{s_i}$$

Modelos lineares e **não lineares** podem resultar em **diferentes estimativas** de velocidade se os dados contiverem algum ruído.

Nomenclaturas

Vetores: letras **minúsculas em negrito**
Matrizes: letras **maiúsculas em negrito**

Para os **dados**, tem-se: $\boldsymbol{d} = [d_1, d_2, d_3, \dots, d_N]^T$

Para os **parâmetros** do modelo, tem-se: $\boldsymbol{m} = [m_1, m_2, m_3, \dots, d_M]^T$

Em um **modelo explícito**, tem-se: $\boldsymbol{d} = \boldsymbol{Gm}$

$\boldsymbol{d}$ é N-dimensional, $\boldsymbol{m}$ é M-dimensional e $\boldsymbol{G}$, algumas vezes chamada de núcleo, possui dimensão N x M e, no caso de modelo linear, contém apenas coeficientes constantes.

Nomenclaturas

Exemplo de um **modelo explícito linear** (Problema Direto):

$$\begin{matrix} d_1 = 2m_1 + 0m_2 - 4m_3 \\ d_2 = m_1 + 2m_2 + 3m_3 \end{matrix} \quad \text{ou} \quad \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -4 \\ 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{bmatrix}$$

E por simplificação, tem-se:

$$\boldsymbol{d} = \boldsymbol{G}\boldsymbol{m}$$

Onde:

$$\boldsymbol{d} = [d_1, d_2]^T \qquad \boldsymbol{m} = [m_1, m_2, m_3]^T \qquad \boldsymbol{G} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -4 \\ 1 & 2 & 3 \end{bmatrix}$$

Problema inverso

Ao assumir o **problema direto**, conforme já exposto, tem-se:

$$\boldsymbol{d} = \boldsymbol{G}\boldsymbol{m}$$

A **inversão do problema**, direto para estimativa dos parâmetros do modelo, pode ser dada por:

$$\boldsymbol{m} = \boldsymbol{G}^{-1}\,\boldsymbol{d}$$

Um **problema comum**, que depende de **grande esforço**, aparece **quando $\boldsymbol{G}^{-1}$ não existe no sentido matemático**. Ou seja, quando não satisfaz a seguinte relação:

$$\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^{-1} = \boldsymbol{G}^{-1}\boldsymbol{G} = \boldsymbol{I}$$

onde $\boldsymbol{I}$ é a matriz identidade

Método de inversão

Dois vetores mais comuns: **Vetor de erro de dados**, ou de desajuste; e vetor de parâmetros do modelo.

Os **métodos baseados no vetor de erro de dados** dão origem a **soluções clássicas de mínimos quadrados**. Já os **métodos baseados no vetor de parâmetros** do modelo dão origem ao que é conhecido como **soluções de comprimento mínimo**, ou **norma mínima**.

Melhorias sobre soluções de mínimos quadrados e comprimento mínimo **incluem o uso de informações sobre ruído nos dados** e **informações a priori sobre os parâmetros do modelo**, e são conhecidas como **soluções de mínimos quadrados ponderados** ou comprimento mínimo ponderado, respectivamente.

Método dos Mínimos Quadrados (MMQ)

Vetores de erro de dados

Os **vetores de erro de dados $\boldsymbol{e}$** são essenciais no **desenvolvimento de problemas inversos pelo MMQ**. Eles são dados por:

$$\boldsymbol{e} = \boldsymbol{d}^{calc} - \boldsymbol{d}^{obs}$$

A dimensão do vetor de erro $\boldsymbol{e}$ é N x 1.

A aplicação do **MMQ se baseia na aceitação do melhor estimador** de $\boldsymbol{m}$ considerando que:

$$\sum_{i=1}^{N} {e_i}^2 = min \qquad \text{ou} \qquad \boldsymbol{e}^T \boldsymbol{e} = min$$

Método dos Mínimos Quadrados (MMQ)

Considerando a presença de **erro nas observações**, tem-se:

$$\boldsymbol{Gm} = \boldsymbol{d} + \boldsymbol{e}$$
$$\boldsymbol{e} = \boldsymbol{Gm} - \boldsymbol{d}$$

De acordo com as **premissas do MMQ**, tem-se:

$$\boldsymbol{e}^T\boldsymbol{e} = min$$

Então

$$\boldsymbol{e}^T\boldsymbol{e} = (\boldsymbol{Gm} - \boldsymbol{d}\,)^{\boldsymbol{T}}(\boldsymbol{Gm} - \boldsymbol{d}\,) = min$$

Considerando as derivadas parciais de $\boldsymbol{e}^T\boldsymbol{e}$ em relação a $\boldsymbol{m}$, e **definindo-as como zero**, tem-se:

$$\frac{d(\boldsymbol{e}^T\boldsymbol{e})}{d\boldsymbol{m}} = 2\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{Gm} - \boldsymbol{G}^T\boldsymbol{d} - \boldsymbol{G}^T\boldsymbol{d} = \boldsymbol{0} | \boldsymbol{G}^T\boldsymbol{Gm} - \boldsymbol{G}^T\boldsymbol{d} = \boldsymbol{0}$$

Método dos Mínimos Quadrados (MMQ)

Esta última expressão representa o **conjunto de $\boldsymbol{M}$ equações de observação e $\boldsymbol{M}$ incógnitas**.

Quando $\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{G}$ (MxM) é **não singular**, a **solução única** é dada por:

$$\boldsymbol{m} = (\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{G})^{-1}\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{d}$$

Em um caso mais geral, **considerando os pesos** dos dados observados, tem-se:

$$\boldsymbol{e}^T\boldsymbol{W}\boldsymbol{e} = min \qquad \boldsymbol{W} = \sigma_0^2\left(\sum \boldsymbol{d}\right)^{-1}$$

Onde σ_0^2 é um valor de variância a priori e $\sum d$ a matriz covariância dos valores observados.

E, **por solução análoga** à anterior, tem-se:

$$\boldsymbol{m} = (\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{W}\boldsymbol{G})^{-1}\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{W}\boldsymbol{d} \ ; \sigma_{pos}^2 = \frac{\boldsymbol{e}^T\boldsymbol{e}}{N-M} ; \sum \boldsymbol{m} = \sigma_{pos}^2(\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{W}\boldsymbol{G})^{-1}$$

Problemas dos Mínimos Quadrados (MMQ)

Vimos que a solução de mínimos quadrados para $\boldsymbol{d} = \boldsymbol{Gm}$ é dada por:

$$\boldsymbol{m} = [\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{G}]^{-1}\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{d} \quad \text{ou} \quad \boldsymbol{m} = (\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{W}\boldsymbol{G})^{-1}\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{W}\boldsymbol{d}$$

Um **problema** é que a **solução não existe quando $\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{G}$ não tem inversão matemática**.

Matematicamente, podemos dizer que o **$\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{G}$ tem um inverso**, e é único, **quando $\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{G}$ tem posto igual a $\boldsymbol{M}$**.

Essencialmente, **se** $\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{G}$ tiver o **posto igual a $\boldsymbol{M}$**, ele **terá informações suficientes para resolver $\boldsymbol{M}$ coisas** (neste caso, parâmetros do modelo).

Problemas dos Mínimos Quadrados (MMQ)

Isso **acontece quando** todas as M **linhas** (ou equivalentemente, desde que $\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{G}$ seja quadrado) **são independentes**.

$G^T G$ terá posto < M se o **número de observações N for menor que M**.

Se $[\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{G}]^{-1}$ não existe, um **número infinito de estimativas irá se ajustar aos dados** igualmente bem. Matematicamente, $\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{G}$ tem posto < M se $|\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{G}|$ = 0, onde $|\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{G}|$ é o determinante do $\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{G}$.

Problemas dos Mínimos Quadrados (MMQ)

Quando $M < N$

Com **mais observações do que incógnitas**, normalmente **não é possível ajustar todos os dados exatamente**. O problema dos **mínimos quadrados se enquadra nessa categoria**. Considere o seguinte exemplo:

$$\begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \\ g_{31} & g_{32} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \end{bmatrix}$$

Se a solução existe, este **caso** é denominado **sobredeterminado**.

Problemas dos Mínimos Quadrados (MMQ)

Exemplo

Problemas dos Mínimos Quadrados (MMQ)

Quando $M < N$

$$1m_1 + 0m_2 = 1$$
$$5m_1 - 1m_2 = 2$$
$$-3m_1 + 1m_2 = 1$$

$$\boldsymbol{d} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{G} = \frac{\partial F(m)}{\partial m} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 5 & -1 \\ -3 & 1 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{m} = \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{d} = \boldsymbol{Gm}$$

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 5 & -1 \\ -3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{m} = (\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{G})^{-1}\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{d} \qquad \boldsymbol{e} = \boldsymbol{Gm} - \boldsymbol{d}$$

Problemas dos Mínimos Quadrados (MMQ)

Quando $M < N$

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 5 & -1 \\ -3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \end{bmatrix}$$

$$W = I$$

$$\boldsymbol{W} = \sigma_0^2 \left(\sum \boldsymbol{d}\right)^{-1} \qquad \boldsymbol{m} = (\boldsymbol{G}^T \boldsymbol{W} \boldsymbol{G})^{-1} \boldsymbol{G}^T \boldsymbol{W} \boldsymbol{d} \qquad \boldsymbol{e} = \boldsymbol{G}\boldsymbol{m} - \boldsymbol{d}$$

$$\sigma_{pos}^2 = \frac{\boldsymbol{e}^T \boldsymbol{W} \boldsymbol{e}}{N - M} \qquad \sigma_m^2 = \sigma_{pos}^2 (\boldsymbol{G}^T \boldsymbol{W} \boldsymbol{G})^{-1}$$

Problemas dos Mínimos Quadrados (MMQ)

Quando $M < N$

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 5 & -1 \\ -3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \end{bmatrix}$$

$$\sum d = \begin{bmatrix} 0{,}01^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0{,}02^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0{,}01^2 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_0^2 = 1$$

$$\boldsymbol{W} = \sigma_0^2 \left(\sum \boldsymbol{d}\right)^{-1} \qquad \boldsymbol{m} = (\boldsymbol{G}^T \boldsymbol{W} \boldsymbol{G})^{-1} \boldsymbol{G}^T \boldsymbol{W} \boldsymbol{d} \qquad \boldsymbol{e} = (\boldsymbol{G}\boldsymbol{m} - \boldsymbol{d})$$

$$\sigma_{pos}^2 = \frac{\boldsymbol{e}^T \boldsymbol{W} \boldsymbol{e}}{N - M} \qquad \sigma_m^2 = \sigma_{pos}^2 (\boldsymbol{G}^T \boldsymbol{W} \boldsymbol{G})^{-1}$$