



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA**

Helena Lima dos Santos da Silva

**“MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO APLICADOS A PROBLEMAS DE INVERSÃO
DE DADOS DE AVO”.**

**Orientador: Prof. Dr. João dos Santos Protázio
Co-Orientador: Prof. Msc. Rubenvaldo Monteiro Pereira**

**Belém – PA
Março - 2007**

Helena Lima dos Santos da Silva

**“MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO APLICADOS A PROBLEMAS DE INVERSÃO
DE DADOS DE AVO”.**

Dissertação apresentada ao corpo docente do Programa de Pós-Graduação em Matemática e Estatística–PPGME/UFPA, como requisito para a obtenção do grau de Mestre em Matemática.

Área de Concentração:Otimização

Orientador: Prof. Dr. João dos Santos Protázio

Co-Orientador: Prof. Msc. Rubenvaldo Monteiro Pereira

Belém – PA

2007

Helena Lima dos Santos da Silva

**“MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO APLICADOS A PROBLEMAS DE INVERSÃO
DE DADOS DE AVO”.**

Banca Examinadora:

Prof.Dr. João dos Santos Protázio
Universidade Federal do Pará - UFPA
Escola Superior Madre Celeste -ESMAC
Orientador

Prof.Dr. Marcus Pinto da Costa da Rocha
Universidade Federal do Pará - UFPA
Examinador

Prof.Dr. Valcir João da Cunha Farias
Universidade Federal do Pará - UFPA
Examinador

Prof.Dr. Walter Barra Júnior
Universidade Federal do Pará - UFPA
Examinador

- Ao meu Senhor Jesus por tudo.
- A meu saudoso pai **Sebastião Reis dos Santos**, que sonhou este sonho antes de mim.
- A minha mãe, irmãs e irmãos, pela dedicação, orações e conselhos.
- A meu esposo Reginaldo e a meus filhos Raphael e Gabriela, pelas orações, conselhos, dedicação, amor, carinho e paciência.

Agradecimentos

- Ao meu **Senhor Jesus**, minha fortaleza de todas as horas.
- Ao NPI/UFPA que teve um importante papel na realização deste sonho, em especial para as minhas amigas Edna Lima, Leia e Madalena.”*A boca do justo fala da sabedoria; a sua língua fala do que é reto*”. Sl.37:30
- Ao PPGME/UFPA por todo apoio que recebi através de seu corpo docente, técnico e administrativo. Em especial aos meus professores Marcus Rocha, Mauro Santos, Jorge Ferreira e Protázio”*Os passos do homem bom são confirmados pelo Senhor, e ele deleita-se no seu caminho, ainda que caia, não ficará prostrado, pois o SENHOR o sustém com a sua mão*” Sl. 37:23-24
- A Secretaria de Educação do Estado do Pará – SEDUC, pelo apoio dado no decorrer destes anos. “*Uma coisa disse Deus, duas vezes a ouvi: que o poder pertence a Deus*”Sl.62:11.
- Ao meu querido amigo e orientador João dos Santos Protázio que soube ouvir e falar as coisas certas nas horas certas, para que este trabalho fosse concluído. É como a bíblia afirma: “*O homem que tem muitos amigos pode congratular-se, mas há amigo mais chegado do um irmão*” Pv 18:24.
- A meu amigo e co-orientador Rubenvaldo Monteiro Pereira, por todas as colaborações neste trabalho.”*O meu Deus, segundo as suas riquezas, suprirá todas as vossas necessidades em glória, por Cristo Jesus*” Fp 4:19.
- Aos meus colegas de curso: Aubedir, Carlos Alessandro, Ana Paula, Antenor, Silvia, Irazel, Baena, Reiville, Lindomar, Sebastião, Baena, Luiz Antonio, Heleno, Pedro Braga, Rosinha, Hércio, Sâmia, Renato, Gracildo, Marco Pollo, Leandro e Márcio Baía, que muito colaboraram para que este trabalho fosse concluído. “*Muitos propósitos há no coração do homem, mas o conselho do Senhor permanecerá*”. Pv. 19:21
- A minha amiga de infância e Secretária do PPGME Telma Mafra, que sempre torceu por todos nós.”*O Senhor é quem te guarda, O Senhor é a tua sombra a tua direita*” .Sl. 121:5
- Aos membros da banca examinadora, pela paciência em examinar, avaliar, corrigir este trabalho. “*Confia ao Senhor as tuas obras, e teus pensamentos serão estabelecidos*” Pv. 16:3
- A Igreja Batista Nova Esperança que lutou junto comigo esta luta, é como diz o texto “*Mas em todas estas coisas somos mais do que vencedores, por aquele que nos amou primeiro* “ Rm 8:37.
- A meu esposo Reginaldo e a meus filhos Raphael e Gabriela, que souberam suportar as ausências, os desesperos, as lágrimas e agora sorriem juntamente comigo. É como diz a bíblia: “*Os que semeiam em lágrimas segarão com alegria, aquele que leva a preciosa semente, andando e chorando, voltará, sem dúvida, com alegria, trazendo consigo os seus molhos*” – Sl 126: 5-6.

“O Senhor tem estabelecido o seu trono nos céus, e o seu reino domina sobre tudo”. Sl. 103:19

RESUMO

A análise de amplitude versus afastamento fonte-receptor (AVO) constitui-se, atualmente, numa importante ferramenta para a extração de informações litológicas a partir de dados sísmicos, através do uso de contrastes de impedância acústica nas interfaces que separam diferentes litologias. A literatura sísmica é rica em trabalhos sobre este assunto, dada a sua importante contribuição na indústria de prospecção, monitoramento e exploração de hidrocarbonetos. Muitos métodos foram estudados continuamente procurando melhorar, cada vez mais, o desempenho dos procedimentos de inversão de parâmetros físicos e petrofísicos, considerando-se inicialmente modelos acústicos, tão importantes nesta área da Sísmica Aplicada.

Com o advento de novos modelos, incluídos aí, os modelos elásticos isotrópicos e anisotrópicos e de novas tecnologias de aquisição de dados, a análise de AVO tornou-se mais e mais eficiente, exigindo o desenvolvimento de novas abordagens e de novos métodos de inversão dos dados sísmicos. Muitos métodos de otimização foram aplicados recentemente, buscando-se as estimativas de importantes parâmetros elásticos dos meios. A avaliação do desempenho destes métodos é muito importante uma vez que pode servir de guia para que suas aplicações se tornem mais sistemáticas e mais eficientes.

Neste trabalho é proposto um estudo de procedimentos de inversão utilizando alguns métodos de otimização, que são classicamente aplicados em problemas de ajustes não lineares por mínimos quadrados. São utilizados os métodos de Nelder-Mead, de Levenberg-Marquardt e do Algoritmo Genético na solução das inversões, utilizando modelos linearizados a partir das equações generalizadas de Zöeppritz, estendidas para o caso de meios elásticos isotrópicos. Os resultados mostraram-se bastante satisfatórios, confirmando, essencialmente, a eficácia dos métodos aplicados nos procedimentos de inversão de dados de AVO.

PALAVRAS CHAVE: AVO, GENÉTICO, MARQUARDT, GAUSS-NEWTON – NELDER – MEAD, CHRISTOFFEL, ISOITRÓPICO, AMBIGUIDADE, ONDAS REFLETIDAS.

ABSTRACT

The analysis of amplitude versus removal-receiving (AVO) one consists, currently, in an important tool for the extraction of litologicas information from seismic data, through the use of impedence contrasts acoustics in the interfaces that separate different litologias. Seismic literature is rich in works on this subject, given it is importance in the prospection industry, monitory and exploration of hydro-carbons. Many methods had been studied looking for to improve, each time more, the performance of the procedures of inversion of physical and petrophysics parameters, considering initially acoustic models, so important in this applied area of the seismic one.

With the advent of new models, enclosed there, the isotropic and anisotropic elastic models and of new technologies of acquisition of date, the AVO analysis became more and more efficient, demanding the development of new boarding and new methods of inversion of seismic data. Many methods of optimization had been applied recently, searching the estimates of important elastic parameters of the ways. The evaluation of the performance of these methods is very important because it can serve of guide so that it is applications became systematic and more efficient.

In this work of inversion procedures is considered using some methods of optimization, that classically are applied in problems of not linear adjustments for squared minimums. The methods of Nelder-Mead, Levenberg-Marquardt and the Genetic Algorithm in the solution of the inversions are used, using models linearization from the generalized equations of Zöeppritz, extended for the case of half isotropic rubber bands. The results had revealed sufficiently satisfactory, confirming, essentially, the effectiveness of the methods applied in the procedures of data AVO.

SUMÁRIO

DEDICATÓRIA

AGRADECIMENTOS

1.INTRODUÇÃO

2.OS ESPALHAMENTOS EXATO E APROXIMADO DE DADOS DE AVO EM MEIOS ISOTRÓPICOS

2.1.Considerações iniciais	1
2.2.Equações de ondas em meios elásticos homogêneos e isotrópicos	1
2.3.Ondas planas em meios elásticos homogêneos e isotrópicos.....	3
2.3.1.Ondas planas e equações de Christoffel em meio isotrópico	3
2.3.2.Velocidade de grupo em meio isotrópico	5
2.3.3.Propagação de ondas planas em um plano de simetria	5
2.4. A propagação de ondas planas através de interfaces que separam dois meios elásticos homogêneos e isotrópicos.....	7
2.4.1.Propagação de campos de ondas planas	7
2.4.2.Matrizes propagadoras através de camadas	9
2.4.3.Meios efetivos em finas estratificações isotrópicas.....	10
2.4.4.Equações de Zoeppritz generalizadas	11
2.4.5.Expressões analíticas para as amplitudes de ondas P refletidas e convertidas	12
2.4.6.Expressões aproximadas para as amplitudes de ondas P refletidas e convertidas	15
2.5.Considerações finais.....	20

3.ALGUNS MÉTODOS PARA PROBLEMAS DE MÍNIMOS QUADRADOS

GERAIS

3.1.Considerações iniciais	21
3.2.Métodos gerais de solução de problemas de otimização	
3.2.1.Aspectos gerais em problemas de otimização	21
3.2.2.Métodos gerais de otimização baseados no cálculo	24
3.2.3.Métodos de otimização global baseados no processo de busca aleatória	
3.2.3.1.Os métodos de algoritmo genético	30
3.2.3.2.O método simplex de Nelder – Mead	39
3.3.Métodos gerais de solução de problemas de mínimos quadrados	41
3.3.1.A formulação geral de um problema de mínimos quadrados	41
3.3.2.O caso de ajuste linear e o método do SVD	43
3.3.3.O caso não-linear e o método de Gauss-Newton	45
3.3.4.O caso não-linear e o método de Levenberg-Marquardt	46
3.3.5.Considerações finais.....	49

4.EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

4.1.Considerações iniciais.....	50
4.2.Formulação matemática do problema de inversão.....	50
4.3.Modelos usados nos experimentos	52
4.4. Regiões de ambigüidade dos modelos estudados	52

5.CONCLUSÕES.....	78
--------------------------	-----------

6. BIBLIOGRAFIA

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2.1 – Figura ilustrativa do espalhamento de uma onda P incidente, que se desdobra em duas outras na interface; uma onda P refletida (Rpp) e outra onda S convertida.....	7
Figura 2.2 – Coeficientes Rpp e Rsp considerando modelo com velocidade da onda P incidente maior que da onda subjacente.....	14
Figura 2.3 – Coeficientes Rpp e Rsp considerando modelo com velocidade da onda P incidente menor que da onda subjacente.....	14
Figura 2.4 – Coeficientes Rpp exato e aproximados (linear e quadrático), considerando-se modelos com baixos contrastes.....	19
Figura 2.5 – Coeficientes Rsp exato e aproximados (linear e quadrático), considerando-se modelo com baixos contrastes.....	20
Figura 2.6 – Coeficientes Rpp exato e aproximados (linear e quadrático), considerando-se modelo com contrastes moderados.....	20
Figura 2.7 – Coeficientes Rsp exato e aproximados (linear e quadrático), considerando-se modelo com contrastes moderados.....	21
Figura 3.1. Reflexão do triângulo a partir do vértice W	42
Figura 3.2. Extensão do triângulo a partir do vértice. W	43
Figura 3.3. Contração do triângulo BGW.....	43
Figura 3.4. Retração na direção do ponto B	44
Figura 4.1. Curvas de contorno ilustrando a região de ambiguidade dos parâmetros de densidade e impedância ($\delta\rho \times \delta Z$) do Modelo 1 – <u>caso linearizado</u>	57

Figura 4.2. Curvas de contorno ilustrando a região de ambiguidade dos parâmetros de densidade e cisalhamento ($\delta\rho \times \delta\mu$) do Modelo 1 – <u>caso linearizado</u>	58
Figura 4.3. Curvas de contorno ilustrando a região de ambiguidade dos parâmetros de impedância e cisalhamento ($\delta z \times \delta\mu$) do Modelo 1 – <u>caso linearizado</u>	59
Figura 4.4. Curvas de contorno ilustrando a região de ambiguidade dos parâmetros de densidade e impedância do Modelo 1 – <u>caso quadrático</u>	60
Figura 4.5. Curvas de contorno ilustrando a região de ambiguidade dos parâmetros de densidade e cisalhamento do Modelo 1 – <u>caso quadrático</u>	61
Figura 4.6. Curvas de contorno ilustrando a região de ambiguidade dos parâmetros de impedância e cisalhamento do Modelo 1 – <u>caso quadrático</u>	62
Figura 4.7. Curvas de contorno ilustrando a região de ambiguidade dos parâmetros de densidade e impedância do Modelo 2 – <u>caso linearizado</u>	63
Figura 4.8. Curvas de contorno ilustrando a região de ambiguidade dos parâmetros de densidade e cisalhamento do Modelo 2 – <u>caso linearizado</u>	64
Figura 4.9. Curvas de contorno ilustrando a região de ambiguidade dos parâmetros de impedância e cisalhamento do Modelo 2 – <u>caso linearizado</u>	65
Figura 4.10. Curvas de contorno ilustrando a região de ambiguidade dos parâmetros de densidade e impedância do Modelo 2 – <u>caso quadrático</u>	66
Figura 4.11. Curvas de contorno ilustrando a região de ambiguidade dos parâmetros de densidade e cisalhamento do Modelo 2 – <u>caso quadrático</u>	67
Figura 4.12. Curvas de contorno ilustrando a região de ambiguidade dos parâmetros de impedância e cisalhamento do Modelo 2 – <u>caso quadrático</u>	68
Figura 4.13 – A figura acima ilustra os parâmetros estimados pela aplicação do método de Nelder-Mead considerando-se o Modelo 1. Observar que o método é extremamente estável com relação à escolha do ponto inicial do processo.....	70
Figura 4.14 – A figura acima ilustra os parâmetros estimados pela aplicação do método de Levenberg-Marquardt considerando-se o Modelo 1. Observar que o método é	

extremamente estável com relação à escolha do ponto inicial do processo.....71

Figura 4.15 – A figura acima ilustra os parâmetros estimados pela aplicação do método de Algoritmo Genético, considerando-se o Modelo 1. Foram feitas 125 simulações do método e os resultados apresentaram grande variabilidade. Os valores dos parâmetros foram estimados pela média do valores encontrados nas simulações.....71

Figura 4.16 – A figura acima ilustra os parâmetros estimados pela aplicação do método de Nelder-Mead considerando-se o Modelo 2. Observar que o método é extremamente estável com relação à escolha do ponto inicial do processo.....73

Figura 4.17 – A figura acima ilustra os parâmetros estimados pela aplicação do método de Levenberg-Marquardt, considerando-se o Modelo 2. Observar que o método é extremamente estável com relação à escolha do ponto inicial do processo.....74

Figura 4.18 – A figura acima ilustra os parâmetros estimados pela aplicação do método de Algoritmo Genético, considerando-se o Modelo 2. Foram feitas 125 simulações do método e os resultados apresentaram grande variabilidade. Os valores dos parâmetros foram estimados pela média do valores encontrados nas simulações.....74

Figura 4.19 – Gráficos comparativos entre os dados sintéticos e aqueles obtidos a partir dos parâmetros físicos estimados. Obervar um ajuste razoável dentro da faixa proposta no trabalho (Modelo 1).....76

Figura 4.20 – Gráficos comparativos entre os dados sintéticos e aqueles obtidos a partir dos parâmetros físicos estimados. Obervar um ajuste razoável dentro da faixa proposta no trabalho (Modelo 2).....76

2 - OS ESPALHAMENTOS EXATO E APROXIMADO DE DADOS DE AVO EM MEIOS ISOTRÓPICOS

2.1 - CONSIDERAÇÕES INICIAIS

Nesta seção são apresentadas versões exatas e aproximadas das amplitudes de ondas planas espalhadas através de uma interface plano-horizontal que separa dois meios isotrópicos.

Para as versões exatas é utilizado o formalismo estudado em Schoenberg & Protázio (1992), que corresponde a uma extensão, para o caso isotrópico, das conhecidas equações de Zöeppritz aplicadas a problemas de espalhamento através de meios fluidos (Zöeppritz, 1919). Estas equações são expressas explicitamente em termos de matrizes de impedâncias 2x2 de cada meio.

As versões aproximadas são desenvolvidas em termos dos contrastes médios de densidade ($\delta\rho$), de impedância da onda P (δz) e de módulo de cisalhamento ($\delta\mu$) em torno dos contrastes nulos ($\delta\alpha = 0; \delta z = 0; \delta\mu = 0$) e são apresentadas nas versões linearizadas e quadráticas. Exemplos sintéticos são apresentados, visando estabelecer a precisão e os limites de validade destas aproximações.

2.2 – EQUAÇÕES DE ONDAS EM MEIOS ELÁSTICOS HOMOGÊNEOS E ISOTRÓPICOS

Meios elásticos homogêneos são aqueles em que seus parâmetros físicos são invariantes por translações, enquanto meios elásticos isotrópicos são aqueles em que seus atributos físicos são invariantes por rotações. Os parâmetros físicos que caracterizam um meio isotrópico são a sua densidade ρ e os seus parâmetros de Lamé $\lambda + 2\mu$ e μ , que controlam, respectivamente, os comportamentos das ondas longitudinal ou onda P e transversal ou onda S . A sua matriz de rigidez é dada por:

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{bmatrix}. \quad (2.1)$$

As coordenadas do tensor de tração \mathbf{T} associado ao meio são dadas por (Aki & Richards, 1984):

$$\tau_{ij} = \lambda \delta_{ij} \mathbf{Q} + 2\mu \varepsilon_{ij}, \quad (2.2)$$

sendo δ_{ij} o conhecido delta de Kronecker,

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.3)$$

as coordenadas do tensor de deformação \mathbf{E} e

$$\mathbf{Q} = \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \right) \quad (2.4)$$

o primeiro invariante do tensor de tração associado ao meio.

Explicitamente, o tensor de tração pode ser expresso como:

$$\mathbf{T} \equiv \begin{bmatrix} \lambda \nabla \cdot \mathbf{u} + 2\mu \frac{\partial u_1}{\partial x_1} & \mu \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) & \mu \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right) \\ \mu \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) & \lambda \nabla \cdot \mathbf{u} + 2\mu \frac{\partial u_2}{\partial x_2} & \mu \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right) \\ \mu \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right) & \mu \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right) & \lambda \nabla \cdot \mathbf{u} + 2\mu \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \end{bmatrix}. \quad (2.5)$$

Lembrando que as equações do movimento em um meio elástico isotrópico são dadas por (Aki & Richards, 1984):

$$\rho \partial_{tt} u_i = \partial_j \tau_{ij} + \rho f_i, \quad (2.6)$$

sendo u_i e f_i as i -ésimas componentes do campo de deformação e da força de volume externa, respectivamente, e que vale a lei de Hooke generalizada (2.2), a equação (2.6) pode ser descrita por:

$$\rho \partial_{tt} u_i = \mu \partial_{jj} u_i + (\lambda + \mu) \partial_{ji} u_j + \rho f_i. \quad (2.7)$$

Explicitamente:

$$\begin{cases} \rho \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} = \mu \nabla^2 u_1 + \lambda + \mu \frac{\partial}{\partial x_1} \nabla \cdot \mathbf{u} + \rho f_1 \\ \rho \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} = \mu \nabla^2 u_2 + \lambda + \mu \frac{\partial}{\partial x_2} \nabla \cdot \mathbf{u} + \rho f_2 \\ \rho \frac{\partial^2 u_3}{\partial t^2} = \mu \nabla^2 u_3 + \lambda + \mu \frac{\partial}{\partial x_3} \nabla \cdot \mathbf{u} + \rho f_3. \end{cases} \quad (2.8)$$

Ou em termos vetoriais:

$$\rho \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mu \nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + (\lambda + \mu) \nabla \nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \rho \mathbf{f}(\mathbf{x}, t). \quad (2.9)$$

Em problemas de espalhamento através de interfaces plano-horizontais as soluções $u_i(x, t)$ de (2.7) devem satisfazer não apenas as condições iniciais $u_i(x, 0)$ e $\partial_t u_i(x, 0)$, mas também as condições de contorno sobre o deslocamento $u_i(x, t)$ e as componentes normais à interface $\tau_{i3}(x, t)$. Lembrar ainda que, da linearidade da equação da onda, vale o princípio de superposição, que diz que toda solução da equação de onda associada a uma combinação linear de fontes, é ainda uma combinação linear de soluções, cada uma delas solução da equação associada a cada fonte isoladamente.

2.3 – ONDAS PLANAS EM MEIOS ELÁSTICOS HOMOGENÊOS E ISOTRÓPICOS

2.3.1 – ONDAS PLANAS E EQUAÇÕES DE CHRISTOFFEL EM MEIO ISOTRÓPICO

Uma onda plana harmônica e monocromática é toda solução da equação de onda (2.7), com $f_j(x, t) = 0$, representada na forma:

$$u_k(x, t) = A n_k e^{-i\omega(t - s_j \cdot x_j)}, \quad (2.10)$$

sendo A a sua amplitude, n_k o seu vetor de polarização, ω a sua frequência, t o tempo, s_j o vetor de vagarosidade que determina a direção de propagação da frente de onda ou

direção de fase, x_j o vetor posição no instante t e i a unidade complexa que satisfaz $i^2 = -1$.

Existem boas razões para o uso de ondas planas na busca de soluções da equação de onda. Uma delas é que elas constituem boas aproximações no caso de fontes pontuais muito afastadas do ponto de observação. Outra, é que o campo de propagação, no caso de presença de fontes pontuais explosivas, nada mais é que superposição de ondas planas ponderadas pelo fator de espalhamento geométrico da onda propagada (Aki & Richards, 1980).

A substituição de (2.10) em (2.7) determina a seguinte equação algébrica, conhecida como equação de Christoffel:

$$\rho n_k = \mu s_j^2 n_k + (\lambda + \mu) s_j s_k n_j, \quad (2.11)$$

que pode ser escrita, compactamente, como:

$$\left[(\beta^2 \|s\|^2 - 1) \mathbf{I} + \alpha^2 - \beta^2 s s^t \right] \mathbf{n} = \mathbf{0}, \quad (2.12)$$

sendo $\alpha = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}}$ e $\beta = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}$ as respectivas velocidades de propagação das ondas P e S , $\mathbf{s} = (s_1, s_2, s_3)^t$ o vetor de vagarosidade, $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)^t$ a polarização da onda, \mathbf{I} a matriz identidade 3×3 e t a usual transposição de vetores.

A equação (2.12) apresenta algumas propriedades muito interessantes, dentre elas:

1) seu determinante é dado por $\beta^2 \|s\|^2 - 1 \quad \alpha^2 \|s\|^2 - 1$, cujas raízes são $\|s\|^2 = \frac{1}{\alpha^2}$ (simples) e $\|s\|^2 = \frac{1}{\beta^2}$ (dupla).

2) no caso da raiz simples $\|s\|^2 = \frac{1}{\alpha^2}$, o próprio vetor de vagarosidade \mathbf{s} constitui um vetor de polarização. Com efeito: fazendo $\|s\|^2 = \frac{1}{\alpha^2}$ e $\mathbf{n} = \mathbf{s}$ na equação

$$(2.12), \quad \text{obtemos} \quad \left[\left(\frac{\beta^2}{\alpha^2} - 1 \right) \mathbf{I} + \alpha^2 - \beta^2 s s^t \right] \mathbf{s} = \left[\left(\frac{\beta^2}{\alpha^2} - 1 \right) + \left(1 - \frac{\beta^2}{\alpha^2} \right) \right] \mathbf{s} = \mathbf{0}.$$

Logo, \mathbf{s} é uma polarização, significando dizer que esta onda se propaga com

velocidade α , com polarização na direção s de propagação da onda plana, justificando o seu nome de *onda longitudinal* ou *onda P*.

- 3) no caso da raiz dupla $\|s\|^2 = \frac{I}{\beta^2}$, se n é um vetor de polarização, então ele é ortogonal à direção de propagação s da onda. Com efeito: fazendo $\|s\|^2 = \frac{I}{\beta^2}$ na equação (2.12), obtemos $[\alpha^2 - \beta^2 \quad ss^t]n = [\alpha^2 - \beta^2 \quad s]s^t n = 0$. Como $[\alpha^2 - \beta^2 \quad s] \neq 0$, segue-se que $s^t n = 0$. Logo, $s \perp n$, significando dizer que esta onda se propaga com velocidade β , polarizada ortogonalmente à direção de propagação da onda plana, justificando o seu nome de *onda transversal* ou *onda S*.

2.3.2 – VELOCIDADE DE GRUPO EM MEIO ISOTRÓPICO

Um outro atributo muito importante na propagação de ondas planas em meios isotrópicos é a sua velocidade de grupo, que é definida por:

$$\mathbf{v}_g = \frac{\nabla F(s)}{s \cdot \nabla F(s)}, \quad (2.13)$$

sendo $F(s) = \left(\|s\|^2 - \frac{I}{\beta^2}\right)^2 \left(\|s\|^2 - \frac{I}{\alpha^2}\right)$ o determinante da matriz de Christoffel do meio isotrópico. Neste caso, é fácil mostrar que $\mathbf{v}_g = \frac{s}{\|s\|^2}$, o que mostra que a velocidade de grupo de um meio isotrópico coincide com a velocidade da onda propagada, uma vez que $\|\mathbf{v}_g\| = \frac{I}{\|s\|}$. Outra relação importante entre a velocidade de grupo \mathbf{v}_g e a direção de fase s é dada por $\mathbf{v}_g \cdot s = I$, conhecida como *recíproca polar*. A importância da velocidade de grupo \mathbf{v}_g é que ela determina a direção da propagação do raio da onda considerada. Em casos de meios elásticos mais gerais que os isotrópicos, a direção da velocidade de grupo não coincide, em geral, com a sua direção de fase.

2.3.3 – PROPAGAÇÃO DE ONDAS PLANAS EM UM PLANO DE SIMETRIA

Como se observa, a partir de suas equações de Christoffel, os meios isotrópicos apresentam simetria radial e seu comportamento pode ser explicado apenas pelo seu estudo em algum plano de simetria. Neste trabalho será considerado o plano $x_1 - x_3$ e, neste caso, toma-se $s_2 = 0$ nas componentes do vetor de vazarosidade. Com isto, apenas as componentes do campo u_1 e u_3 serão levadas em conta. As equações de Christoffel tomam a forma:

$$\left[(\beta^2 \|s_H\|^2 - I) \mathbf{I} + \alpha^2 - \beta^2 s_H s_H^t \right] \mathbf{n}_H = 0, \quad (2.14)$$

sendo $s_H = s_1, s_3$ e $n_H = n_1, n_3$ as respectivas projeções dos vetores de vazarosidade e de polarização no plano $x_1 - x_3$ e \mathbf{I} a matriz identidade 2x 2. O seu determinante é dado por $\beta^2 \|s_H\|^2 - I$ e $\alpha^2 \|s_H\|^2 - I$, cujas raízes são $\|s_H\|^2 = \frac{1}{\alpha^2}$ (simples) e $\|s_H\|^2 = \frac{1}{\beta^2}$ (simples).

Explicitamente, o tensor de tração e as equações de onda no plano vertical de simetria de um meio isotrópico ficam sendo, respectivamente:

$$\begin{aligned} \tau_{13} &= \mu \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right) \equiv \rho \beta^2 \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right) \\ \tau_{33} &= \lambda \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + (\lambda + 2\mu) \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \equiv \rho \alpha^2 - 2\beta^2 \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \rho \alpha^2 \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \end{aligned} \quad (2.15)$$

e

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} = \beta^2 \nabla u_1 + \alpha^2 - \beta^2 \left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1 \partial x_3} \right) + f_1 \\ \frac{\partial^2 u_3}{\partial t^2} = \beta^2 \nabla u_3 + \alpha^2 - \beta^2 \left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1 \partial x_3} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_3^2} \right) + f_3, \end{cases} \quad (2.16)$$

resultados obtidos a partir de (2.5) e (2.8) fazendo $\frac{\partial}{\partial x_2} \equiv 0$.

2.4 – A PROPAGAÇÃO DE ONDAS PLANAS ATRAVÉS DE INTERFACES QUE SEPARAM MEIOS ELÁSTICOS HOMOGÊNEOS E ISOTRÓPICOS

2.4.1 – PROPAGAÇÃO DE CAMPOS DE ONDAS PLANAS

Sejam dois meios elásticos isotrópicos separados por uma interface plano-horizontal, com densidade ρ_k , velocidade de onda P α_k e velocidade de onda S β_k , com $k=1$ representando o meio incidente e $k=2$ representando o meio subjacente. Considere-se, ainda, a interface como sendo o plano $x_3=0$, com o eixo x_3 orientado positivamente para baixo. A Figura 2.1 abaixo ilustra o processo de espalhamento de uma onda incidente P , através de interface que separa dois meios elásticos isotrópicos.

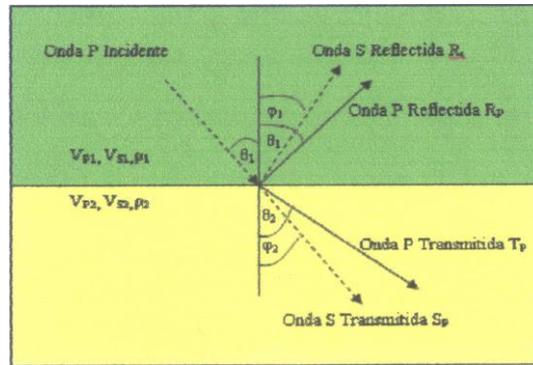


Figura 2.1 – Figura ilustrativa do espalhamento de uma onda P incidente, que se desdobra em duas outras na interface; uma onda P refletida (R_{pp}) e outra onda S convertida (R_{sp}).

O campo de deformação no semi-espaço incidente ($x_3 < 0$) devido às ondas planas harmônicas P e S , incidentes e refletidas, pode ser escrito como (Schoenberg & Protázio, 1992):

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_3 \end{bmatrix} = & i_P \begin{bmatrix} \alpha s_I \\ \alpha s_{3P} \end{bmatrix} e^{-i\omega \tau - s_{3P} x_3} + i_S \begin{bmatrix} \beta s_{3S} \\ -\beta s_I \end{bmatrix} e^{-i\omega \tau - s_{3S} x_3} \\ & + r_P \begin{bmatrix} \alpha s_I \\ -\alpha s_{3P} \end{bmatrix} e^{-i\omega \tau + s_{3P} x_3} + r_S \begin{bmatrix} \beta s_{3S} \\ \beta s_I \end{bmatrix} e^{-i\omega \tau + s_{3S} x_3}, \end{aligned} \quad (2.17)$$

sendo

$\tau = t - s_I x_1$, $s_{3P} = \sqrt{\frac{1}{\alpha^2} - s_I^2}$ e $s_{3S} = \sqrt{\frac{1}{\beta^2} - s_I^2}$. Os coeficientes i_P e i_S são as amplitudes das ondas longitudinais (P) e transversais (S) incidentes, respectivamente, e constituem as duas únicas ondas planas incidentes possíveis, para cada frequência ω e para cada componente horizontal s_I do vetor de vagarosidade. Uma delas ser nula

significa que existe apenas um tipo de onda incidente, P ou S . Os coeficientes r_P e r_S são as amplitudes das ondas refletidas longitudinais (P) e transversais (S), respectivamente.

A partir do campo de deformação assumido, as componentes do campo de tração, calculadas a partir da lei de Hooke, são dadas por (Schoenberg & Protázio, 1992):

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \sigma_{13} \\ \sigma_{33} \end{bmatrix} = & i_P \begin{bmatrix} -2\rho\alpha\beta^2 s_1 s_{3P} \\ -\rho\alpha\mathbf{G} \end{bmatrix} e^{-i\omega \tau - s_{3P}x_3} + i_S \begin{bmatrix} -\rho\beta\mathbf{G} \\ 2\rho\beta^3 s_1 s_{3S} \end{bmatrix} e^{-i\omega \tau - s_{3S}x_3} \\ & + r_P \begin{bmatrix} 2\rho\alpha\beta^2 s_1 s_{3P} \\ -\rho\alpha\mathbf{G} \end{bmatrix} e^{-i\omega \tau + s_{3P}x_3} + r_S \begin{bmatrix} \rho\beta\mathbf{G} \\ 2\rho\beta^3 s_1 s_{3S} \end{bmatrix} e^{-i\omega \tau + s_{3S}x_3}, \end{aligned} \quad (2.18)$$

sendo $\sigma_{13} = -\frac{\tau_{13}}{i\omega}$, $\sigma_{33} = -\frac{\tau_{33}}{i\omega}$ e $\mathbf{G} = 1 - 2\beta^2 s_1^2$.

Esquecendo informalmente o termo $e^{-i\omega\tau}$ que ocorre em (2.17) e (2.18), os campos de deformação e de tração podem ser reordenados na forma:

$$\mathbf{b}_X \quad x_3 = \begin{bmatrix} u_1 \\ \sigma_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_1 s_1 & \beta s_{3S} \\ -\rho\alpha\mathbf{G} & 2\rho\beta^3 s_1 s_{3S} \end{bmatrix} \left\{ \begin{bmatrix} e^{i\omega s_{3P}x_3} & 0 \\ 0 & e^{i\omega s_{3S}x_3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} i_P \\ i_S \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} e^{-i\omega s_{3P}x_3} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega s_{3S}x_3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_P \\ r_S \end{bmatrix} \right\} \quad (2.19)$$

e

$$\mathbf{b}_Y \quad x_3 = \begin{bmatrix} \sigma_{13} \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2\rho\alpha\beta^2 s_1 s_{3P} & -\rho\beta\mathbf{G} \\ \alpha s_{3P} & -\beta s_1 \end{bmatrix} \left\{ \begin{bmatrix} e^{i\omega s_{3P}x_3} & 0 \\ 0 & e^{i\omega s_{3S}x_3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} i_P \\ i_S \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} e^{-i\omega s_{3P}x_3} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega s_{3S}x_3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_P \\ r_S \end{bmatrix} \right\}. \quad (2.20)$$

Definindo:

$$\mathbf{i} = \begin{bmatrix} i_P \\ i_S \end{bmatrix}; \quad \mathbf{r} = \begin{bmatrix} r_P \\ r_S \end{bmatrix}; \quad \mathbf{A} \quad x_3 = \begin{bmatrix} e^{i\omega s_{3P}x_3} & 0 \\ 0 & e^{i\omega s_{3S}x_3} \end{bmatrix} \quad (2.21)$$

e

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \alpha_1 s_1 & \beta s_{3S} \\ -\rho\alpha\mathbf{G} & 2\rho\beta^3 s_1 s_{3S} \end{bmatrix}; \quad \mathbf{Y} = \begin{bmatrix} -2\rho\alpha\beta^2 s_1 s_{3P} & -\rho\beta\mathbf{G} \\ \alpha s_{3P} & -\beta s_1 \end{bmatrix}, \quad (2.22)$$

os campos definidos em (2.19) e (2.20) podem ser re-escritos compactamente como:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_X \ x_3 &= \mathbf{X} \left[\Lambda \ x_3 \ \mathbf{i} + \Lambda^{-1} \ x_3 \ \mathbf{r} \right] \\ \mathbf{b}_Y \ x_3 &= \mathbf{Y} \left[\Lambda \ x_3 \ \mathbf{i} - \Lambda^{-1} \ x_3 \ \mathbf{r} \right]. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Observar que $\det \mathbf{X} = \rho \alpha \beta s_{3S}$ e $\det \mathbf{Y} = \rho \alpha \beta s_{3P}$, o que mostra que a não inversibilidade de \mathbf{X} ou \mathbf{Y} só vai acontecer quando as componentes verticais s_{3P} ou s_{3S} do vetor de vagarosidade de cada tipo de onda se anularem. Isto só acontece em presença de ângulos críticos.

2.4.2 – MATRIZES PROPAGADORAS ATRAVÉS DE CAMADAS

Permitindo que o formalismo acima possa ser aplicado para eventos envolvendo ondas que se propagam para baixo (\mathbf{d}) e para cima (\mathbf{u}) e substituindo \mathbf{i} por \mathbf{d} e \mathbf{r} por \mathbf{u} , os campos definidos em (2.23) podem ser agrupados, produzindo:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{b}_X \ x_3 \\ \mathbf{b}_Y \ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{X} & \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} & -\mathbf{Y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Lambda \ x_3 & 0 \\ 0 & -\Lambda^{-1} \ x_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{d} \\ \mathbf{u} \end{bmatrix} \equiv \mathbf{U} \ x_3 \begin{bmatrix} \mathbf{d} \\ \mathbf{u} \end{bmatrix}. \quad (2.24)$$

Observar ainda que o campo $\begin{bmatrix} \mathbf{b}_X \ x_3 \\ \mathbf{b}_Y \ x_3 \end{bmatrix}$ satisfaz o sistema linear de primeira ordem:

$$\frac{d}{dx_3} \begin{bmatrix} \mathbf{b}_X \\ \mathbf{b}_Y \end{bmatrix} = i\omega \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{XSY}^{-1} \\ \mathbf{YSX}^{-1} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{b}_X \\ \mathbf{b}_Y \end{bmatrix} \equiv i\omega \mathbf{W} \begin{bmatrix} \mathbf{b}_X \\ \mathbf{b}_Y \end{bmatrix}, \quad (2.25)$$

sendo \mathbf{S} a matriz

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} s_{3P} & 0 \\ 0 & s_{3S} \end{bmatrix}, \quad (2.26)$$

e

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{XSY}^{-1} \\ \mathbf{YSX}^{-1} & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.27)$$

A matriz \mathbf{W} desempenha importante papel na propagação de onda através de camadas e toma o nome de *matriz de propagação ou propagadora*. A solução de (2.25) apresenta a forma:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{b}_X(x_3) \\ \mathbf{b}_Y(x_3) \end{bmatrix} = e^{i\omega(x_3 - x_{30})\mathbf{W}} \begin{bmatrix} \mathbf{b}_X(x_{30}) \\ \mathbf{b}_Y(x_{30}) \end{bmatrix} \equiv e^{i\omega h\mathbf{W}} \begin{bmatrix} \mathbf{b}_X(x_{30}) \\ \mathbf{b}_Y(x_{30}) \end{bmatrix}, \quad (2.28)$$

sendo x_{30} um horizonte de referência e $h=x_3-x_{30}$ a distância entre o horizonte de observação e o horizonte de referência. No caso particular de finas camadas ($|h\omega s_3| \ll 1$) têm-se que:

$$\mathbf{W}(h) \approx \begin{bmatrix} \mathbf{I} & i\omega h \mathbf{XSY}^{-1} \\ i\omega h \mathbf{YSX}^{-1} & \mathbf{I} \end{bmatrix}. \quad (2.29)$$

As matrizes \mathbf{XSY}^{-1} e \mathbf{YSX}^{-1} são calculadas implicitamente e dadas por:

$$\mathbf{XSY}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{-1}{\mu} & -s_1 \\ -s_1 & -\rho \end{bmatrix} \quad (2.30)$$

e

$$\mathbf{YSX}^{-1} = \begin{bmatrix} -\rho + \left(\lambda + 2\mu - \frac{\lambda^2}{\lambda + 2\mu} \right) s_1^2 & \frac{-\lambda s_1}{\lambda + 2\mu} \\ \frac{-\lambda s_1}{\lambda + 2\mu} & \frac{-1}{\lambda + 2\mu} \end{bmatrix}. \quad (2.31)$$

2.4.3 – MEIOS EFETIVOS EM ESTRATIFICAÇÕES ISOTRÓPICAS

Considerando-se agora o caso de finas estratificações, tem-se que (Protázio, 1994):

$$\mathbf{W} \ H \approx \begin{bmatrix} \mathbf{I} & i\omega H \langle \mathbf{XSY}^{-1} \rangle \\ i\omega H \langle \mathbf{YSX}^{-1} \rangle & \mathbf{I} \end{bmatrix}, \quad (2.32)$$

sendo $H = \sum_{j=1}^N h_j$ a espessura da estratificação, h_j a espessura da j -ésima camada, e

$\langle \mathbf{x} \rangle = \frac{1}{H} \sum_{j=1}^N h_j \mathbf{x}_j$ a média das quantidades $\mathbf{x} = x_1, \dots, x_N$ ponderada pelas espessuras

das camadas. Em regime de propagação quasi – estática, esta estratificação se comporta efetivamente como um meio elástico caracterizado pelas expressões abaixo:

$$\langle \mathbf{XSY}^{-1} \rangle = \begin{bmatrix} -\left\langle \frac{I}{\mu} \right\rangle^{-1} & -s_I \\ -s_I & -\langle \rho \rangle \end{bmatrix} \quad (2.33)$$

$$\langle \mathbf{YSX}^{-1} \rangle = \begin{bmatrix} -\langle \rho \rangle + \left(\langle \lambda + 2\mu \rangle - \left\langle \frac{\lambda^2}{\lambda + 2\mu} \right\rangle \right) s_I^2 & -\left\langle \frac{\lambda}{\lambda + 2\mu} \right\rangle s_I \\ -\left\langle \frac{\lambda}{\lambda + 2\mu} \right\rangle s_I & -\left\langle \frac{I}{\lambda + 2\mu} \right\rangle \end{bmatrix}.$$

2.4.4 – EQUAÇÕES DE ZÖEPPLITZ GENERALIZADAS

O estudo do espalhamento de ondas planas através da interface $x_3=0$ é aplicado em dois momentos: (1) avaliação do campo definido em (2.24) tomando-se $x_3=-\varepsilon$; (2) avaliação deste mesmo campo tomando-se $x_3=\varepsilon$, sendo $\varepsilon>0$.

No primeiro caso tem-se que:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{b}_X & -\varepsilon \\ \mathbf{b}_Y & -\varepsilon \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1 & \mathbf{X}_1 \\ \mathbf{Y}_1 & -\mathbf{Y}_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{A} & -\varepsilon & 0 \\ 0 & -\mathbf{A}^{-1} & -\varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{i} \\ \mathbf{r} \end{bmatrix}, \quad (2.34)$$

fazendo $\mathbf{d}=\mathbf{i}$ e $\mathbf{u}=\mathbf{r}$. As matrizes \mathbf{X}_1 e \mathbf{Y}_1 correspondem às matrizes definidas em (2.22) considerando-se os atributos pertinentes ao meio incidente 1. No segundo caso tem-se que:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{b}_X & \varepsilon \\ \mathbf{b}_Y & \varepsilon \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_2 & \mathbf{X}_2 \\ \mathbf{Y}_2 & -\mathbf{Y}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \varepsilon & 0 \\ 0 & -\mathbf{A}^{-1} & \varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{t} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2.35)$$

fazendo $\mathbf{d}=\mathbf{t}$ e $\mathbf{u}=0$. As matrizes \mathbf{X}_2 e \mathbf{Y}_2 correspondem às matrizes definidas em (2.22) considerando-se os atributos pertinentes ao meio subjacente 2. Usando a continuidade do campo definido em (2.24), que equivale a igualar (2.34) e (2.35) e fazer $\varepsilon \rightarrow 0$, e lembrando que $\mathbf{A}(0)=\mathbf{I}$, tem-se que:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{X}_1 & \mathbf{X}_1 \\ \mathbf{Y}_1 & -\mathbf{Y}_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{i} \\ \mathbf{r} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_2 & \mathbf{X}_2 \\ \mathbf{Y}_2 & -\mathbf{Y}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{t} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2.36)$$

que é equivalente à solução do sistema matricial abaixo:

$$\begin{cases} \mathbf{X}_1(\mathbf{i} + \mathbf{r}) = \mathbf{X}_2\mathbf{t} \\ \mathbf{Y}_1(\mathbf{i} - \mathbf{r}) = \mathbf{Y}_2\mathbf{t}. \end{cases} \quad (2.37)$$

Supondo possível a inversão das matrizes envolvidas, a obtenção de \mathbf{r} e \mathbf{t} em termos de \mathbf{i} pode ser alcançada através de:

$$\begin{cases} \mathbf{r} = \mathbf{X}_1^{-1}\mathbf{X}_2 - \mathbf{Y}_1^{-1}\mathbf{Y}_2 & \mathbf{X}_1^{-1}\mathbf{X}_2 + \mathbf{Y}_1^{-1}\mathbf{Y}_2^{-1} \mathbf{i} \\ \mathbf{t} = 2 & \mathbf{X}_1^{-1}\mathbf{X}_2 + \mathbf{Y}_1^{-1}\mathbf{Y}_2^{-1} \mathbf{i}. \end{cases} \quad (2.38)$$

A não inversibilidade das matrizes \mathbf{X}_k e/ou $\mathbf{Y}_k, k=1,2$ está associada à presença de ângulos críticos dos meios envolvidos enquanto a não inversibilidade da matriz $\mathbf{X}_1^{-1}\mathbf{X}_2 + \mathbf{Y}_1^{-1}\mathbf{Y}_2$ está associada à presença de ondas de superfície, de Stonley, por exemplo (Aki & Richards, 1980). Outras versões de soluções para \mathbf{r} e \mathbf{t} podem ser determinadas (Protázio, 1994). Observar que as soluções apresentadas em (2.38) constituem generalizações, para o caso isotrópico, das equações de Zöppritz do caso acústico (Zöppritz, 1919).

2.4.5 – EXPRESSÕES ANALÍTICAS PARA AS AMPLITUDES DE ONDAS P REFLETIDAS E CONVERTIDAS

O interesse deste trabalho é estudar as amplitudes da reflexão (R_{PP}) e da conversão (R_{SP}) de uma onda P incidente e unitária, bastando, para isto, tomar $i_P=1$ e $i_S=0$ em (2.21). Estas amplitudes são obtidas pela aplicação de (2.38) e apresentam as seguintes formas:

$$R_{PP} = \frac{A - B}{A + B} \quad (2.39)$$

$$R_{SP} = \frac{-2\alpha_1 s_{3P1} s_1 C}{\beta_1(A + B)},$$

sendo:

$$A = \begin{bmatrix} \rho_2 - 2G s_1^2 & 2 s_{3S1} + \rho_1 \rho_2 + 4G^2 s_{3P2} s_{3S1} s_1^2 & s_{3S2} \end{bmatrix} s_{3P1}$$

$$B = \begin{bmatrix} \rho_1 \rho_2 s_{3S1} + \rho_1 + 2G s_1^2 & 2 s_{3S2} \end{bmatrix} s_{3P2} + \rho_2 - \rho_1 - 2G s_1^2 & s_1^2 \quad (2.40)$$

$$C = \rho_2 - \rho_1 - 2G s_1^2 \quad \rho_2 - 2G s_1^2 + 2G \rho_1 + 2G s_1^2 s_{3P2} s_{3S2},$$

com $G = \rho_2 \beta_2^2 - \rho_1 \beta_1^2 \equiv \mu_2 - \mu_1$.

A incidência dita normal acontece quando $s_1 = 0$ e neste caso temos que:

$$R_{PP} = \frac{\rho_2 \alpha_2 - \rho_1 \alpha_1}{\rho_2 \alpha_2 + \rho_1 \alpha_1} \equiv \frac{z_2 - z_1}{z_2 + z_1} \quad (2.41)$$

$$R_{SP} = 0.$$

A quantidade $z = \rho \alpha$ que aparece na definição de R_{PP} em (2.41) é conhecida como a impedância do meio com relação à onda P e desempenha importante papel na análise de AVO. Portanto, a amplitude da reflexão de uma onda P em incidência normal nada mais é que o contraste médio da impedância dos meios envolvidos. A quantidade $R_{SP} = 0$ indica não haver conversão na incidência normal de uma onda P em meios isotrópicos.

As Figuras 2.2 e 2.3 abaixo ilustram as amplitudes R_{PP} e R_{SP} considerando dois modelos, o primeiro em que a velocidade da onda P do meio incidente é maior que a do meio subjacente, e o segundo, vice-versa. Os modelos são definidos nas Tabelas 1 e 2 abaixo, respectivamente:

	<i>Litologia</i>	ρ (g/cm ³)	α (m/s)	β (m/s)
Meio incidente	Folhelho	2,20	3270	1650
Meio subjacente	Arenito com gás	2.05	3040	2050

Tabela 1 – Modelo com velocidade da onda P incidente maior que da onda subjacente

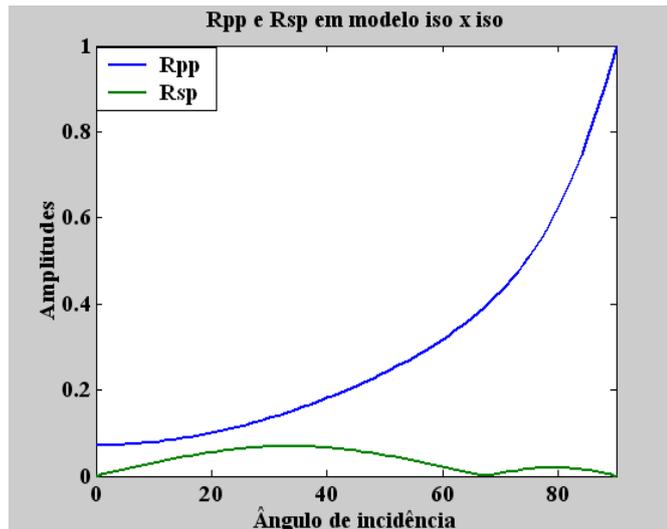


Figura 2.2 – Coeficientes Rpp e Rsp considerando modelo com velocidade da onda P incidente maior que da onda subjacente.

	Litologia	ρ (g/cm ³)	α (m/s)	β (m/s)
Meio incidente	Arenito com gás	2,05	3040	2050
Meio subjacente	Folhelho	2,20	3270	1650

Tabela 2 – Modelo com velocidade da onda P incidente menor que da onda subjacente

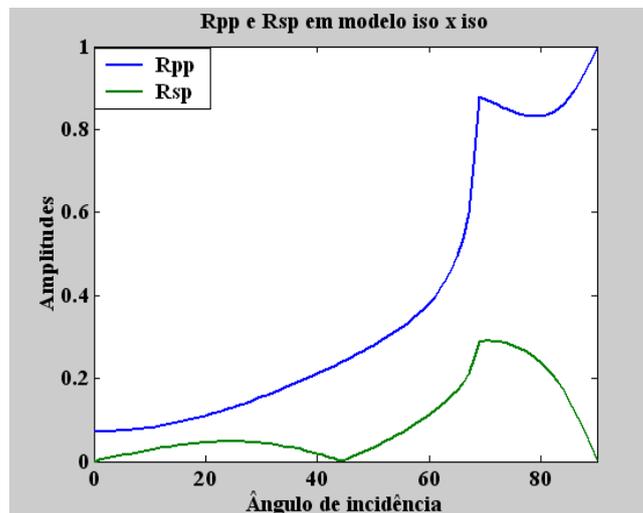


Figura 2.3 – Coeficientes Rpp e Rsp considerando modelo com velocidade da onda P incidente menor que da onda subjacente

Observar, no segundo caso, a ocorrência de um P-ângulo crítico, na altura de 70°.

2.4.6 – EXPRESSÕES APROXIMADAS PARA AS AMPLITUDES DE ONDAS P REFLETIDAS E CONVERTIDAS

Para a obtenção de expressões aproximadas para as amplitudes definidas em (2.39), os meios 1 e 2 do modelo são interpretados como perturbações de um único meio homogêneo. Os parâmetros deste meio são definidos como as médias dos parâmetros físicos dos meios 1 e 2 e são dados por:

$$\bar{\rho} = \frac{\rho_2 + \rho_1}{2}; \quad \bar{\alpha} = \frac{\alpha_2 + \alpha_1}{2} \quad \text{e} \quad \bar{\beta} = \frac{\beta_2 + \beta_1}{2}. \quad (2.42)$$

Por outro lado, os contrastes médios dos parâmetros físicos dos meios são dados por:

$$\Delta\rho = \frac{\rho_2 - \rho_1}{2}; \quad \Delta\alpha = \frac{\alpha_2 - \alpha_1}{2} \quad \text{e} \quad \Delta\beta = \frac{\beta_2 - \beta_1}{2}. \quad (2.43)$$

Usando-se as definições em (2.42) e (2.43), são definidos, então, os contrastes médios relativos dos parâmetros físicos dos meios:

$$\delta\rho = \frac{\Delta\rho}{\bar{\rho}} \equiv \frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_2 + \rho_1}; \quad \delta\alpha = \frac{\Delta\alpha}{\bar{\alpha}} \equiv \frac{\alpha_2 - \alpha_1}{\alpha_2 + \alpha_1} \quad \text{e} \quad \delta\beta = \frac{\Delta\beta}{\bar{\beta}} \equiv \frac{\beta_2 - \beta_1}{\beta_2 + \beta_1}. \quad (2.44)$$

Definindo os contrastes médios de impedância e de módulo de cisalhamento como sendo $\delta z = \delta\rho + \delta\alpha$ e $\delta\mu = \delta\rho + 2\delta\beta$, respectivamente, e como o estudo é feito em torno dos contrastes nulos de densidade, de impedância e de módulo de cisalhamento, as suas relações com os parâmetros físicos dos meios incidente e subjacente são dadas por:

$$\begin{aligned} \rho_1 &= \bar{\rho} (1 - \delta\rho); & \rho_2 &= \bar{\rho} (1 + \delta\rho) \\ \alpha_1 &= \bar{\alpha} (1 - \delta\alpha) \equiv \bar{\alpha} (1 + \delta\rho - \delta z); & \alpha_2 &= \bar{\alpha} (1 + \delta\alpha) \equiv \bar{\alpha} (1 - \delta\rho + \delta z) \\ \beta_1 &= \bar{\beta} (1 - \delta\beta) \equiv \frac{\bar{\beta}}{2} (2 + \delta\rho - \delta\mu); & \beta_2 &= \bar{\beta} (1 + \delta\beta) \equiv \frac{\bar{\beta}}{2} (2 - \delta\rho + \delta\mu). \end{aligned} \quad (2.45)$$

Introduzindo a relação $\kappa = \frac{\bar{\beta}}{\bar{\alpha}}$, conhecida na literatura como relação V_S/V_P , é possível representar as amplitudes R_{PP} e R_{SP} em termos apenas dos parâmetros $\delta\rho, \delta z, \delta\mu$ e κ . Nos casos aqui estudados, o parâmetro κ será mantido fixo, mas convém lembrar que o mesmo pode ser considerado como uma variável das amplitudes.

Fazendo $\bar{s}_I = \frac{\text{sen } \theta}{\bar{\alpha}_I}$, sendo θ o ângulo de incidência da onda P , as fórmulas (2.39)

podem ser reescritas em termos dos contrastes:

$$R_{PP} = \frac{\bar{A} - \bar{B}}{\bar{A} + \bar{B}}$$

$$R_{SP} = \frac{-2 \bar{\alpha}_1 \bar{s}_1 s_{3P1} \bar{C}}{\bar{\beta} (\bar{A} + \bar{B})},$$

sendo

$$\bar{A} = \left[\bar{\rho}_2 - 2k^2 \bar{G} \bar{s}_1^2 \bar{s}_{3S1} + \bar{\rho}_1 \bar{\rho}_2 + 4k^3 \bar{G}^2 \bar{s}_{3P2} \bar{s}_{3S1} \bar{s}_1^2 \bar{s}_{3S2} \right] \bar{s}_{3P1}$$

$$\bar{B} = \left[\bar{\rho}_1 \bar{\rho}_2 \bar{s}_{3S1} + \bar{\rho}_1 + 2k^2 \bar{G} \bar{s}_1^2 \bar{s}_{3S2} \right] \bar{s}_{3P2} + k \left[\bar{\rho}_2 - \bar{\rho}_1 - 2k \bar{G} \bar{s}_1^2 \bar{s}_{3S2} \right] \bar{s}_{3P1}$$

$$\bar{C} = \bar{\rho}_2 - \bar{\rho}_1 - 2k \bar{G} \bar{s}_1^2 \bar{s}_{3S2} - \bar{\rho}_2 - 2k \bar{G} \bar{s}_1^2 \bar{s}_{3S2} + 2k \bar{G} \bar{\rho}_1 + 2k \bar{G} \bar{s}_1^2 \bar{s}_{3S2}.$$

2.4.6.1 - Coeficientes R_{PP} e R_{SP} em termos dos contrastes:

Dados: $\delta\rho, \delta z, \delta\mu, k$ sejam

$$\delta\alpha = \delta z - \delta\rho$$

$$\delta\beta = \frac{\delta\mu - \delta z}{2}$$

$$\bar{\rho}_1 = 1 - \delta\rho, \quad \bar{\rho}_2 = 1 + \delta\rho$$

$$\bar{\alpha}_1 = 1 - \delta\alpha, \quad \bar{\alpha}_2 = 1 + \delta\alpha$$

$$\bar{\beta}_1 = 1 - \delta\beta, \quad \bar{\beta}_2 = 1 + \delta\beta$$

$$\bar{G} = \bar{\rho}_2 \bar{\beta}_2^2 - \bar{\rho}_1 \bar{\beta}_1^2,$$

$$\bar{s}_{3P1} = \left[\frac{1}{\bar{\alpha}_1^2} - \bar{s}_1^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad \bar{s}_{3P2} = \left[\frac{1}{\bar{\alpha}_2^2} - \bar{s}_1^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\bar{s}_{3S1} = \left[\frac{1}{\bar{\beta}_1^2} - k^2 \bar{s}_1^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad \bar{s}_{3S2} = \left[\frac{1}{\bar{\beta}_2^2} - k^2 \bar{s}_1^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

São obtidas as seguintes aproximações de R_{PP} e R_{SP} , que são apresentadas em dois níveis:

1) aproximações linearizadas:

$$R_{PP} \cong \mathbf{m}(\theta)^t \delta \mathbf{p} \tag{2.46}$$

$$R_{SP} \cong \mathbf{n}(\theta)^t \delta \mathbf{p},$$

sendo

$$\mathbf{m}(\theta) = -\text{tg}^2\theta, \text{sec}^2\theta, -4\kappa^2 \text{sen}^2\theta \tag{2.47}$$

e

$$\mathbf{n}(\theta) = \left(\frac{-1}{\sqrt{\eta} \theta}, 0, 2\kappa \left(\frac{\kappa \text{sen}^2\theta}{\sqrt{\eta} \theta} - \text{cos}\theta \right) \right)^t \text{sen}\theta \tag{2.48}$$

vetores que carregam informações da geometria de aquisição dos dados e $\delta \mathbf{p} = \delta\rho, \delta z, \delta\mu^t$ o vetor dos parâmetros físicos.

2) aproximações quadráticas:

$$R_{PP} \cong \mathbf{m}(\theta)^t \delta \mathbf{p} + \delta \mathbf{p}^t \mathbf{M}(\theta) \delta \mathbf{p} \quad (2.47)$$

$$R_{SP} \cong \mathbf{n}(\theta)^t \delta \mathbf{p} + \delta \mathbf{p}^t \mathbf{N}(\theta) \delta \mathbf{p},$$

sendo $\mathbf{M}(\theta)$ e $\mathbf{N}(\theta)$ matrizes que carregam informações da geometria de aquisição dos dados, cujos termos são dados por:

$$\begin{aligned} M_{11}(\theta) &= \left(2 - \frac{\kappa \cos^3 \theta}{\sqrt{\eta \theta}} \right) \sec^2 \theta \operatorname{tg}^2 \theta \\ M_{12}(\theta) &= M_{21}(\theta) = -4 \sec^2 \theta \operatorname{tg}^2 \theta \\ M_{13}(\theta) &= M_{31}(\theta) = 4 \kappa^2 \left(2 + \frac{\kappa \operatorname{sen} \theta \operatorname{tg} \theta}{\sqrt{\eta \theta}} \right) \operatorname{sen}^2 \theta \\ M_{22}(\theta) &= 2 \sec^2 \theta \operatorname{tg}^2 \theta \\ M_{23}(\theta) &= M_{32}(\theta) = -8 \kappa^2 \operatorname{sen}^2 \theta \\ M_{33}(\theta) &= 4 \kappa^3 \left(\sqrt{\eta \theta} - \frac{\operatorname{sen}^2 \theta}{\sqrt{\eta \theta}} \right) \operatorname{tg} \theta \operatorname{sen} \theta \end{aligned} \quad (2.48)$$

e

$$\begin{aligned} N_{11}(\theta) &= \left(\sec^2 \theta + \frac{1}{\eta \theta} - \frac{3}{2} \right) \frac{\operatorname{sen} \theta}{\sqrt{\eta \theta}} \\ N_{12}(\theta) &= N_{21}(\theta) = - \left(\operatorname{tg}^2 \theta + \frac{1}{\eta \theta} \right) \frac{\operatorname{sen} \theta}{\sqrt{\eta \theta}} \\ N_{13}(\theta) &= N_{31}(\theta) = \\ &= - \left\{ \kappa \left(\frac{1}{\eta \theta} + 2 \operatorname{tg}^2 \theta - 3 \right) \cos \theta + \frac{1}{\sqrt{\eta \theta}} \left[2 \kappa^2 \left(\frac{1}{\eta \theta} + \operatorname{tg}^2 \theta - \frac{1}{2} \right) \operatorname{sen}^2 \theta + \frac{1}{2} \right] \right\} \operatorname{sen} \theta \\ N_{22}(\theta) &= 0 \\ N_{23}(\theta) &= N_{32}(\theta) = 2 \kappa \left[\sec \theta + \frac{\kappa}{\sqrt{\eta \theta}} \left(1 + \sec^2 \theta + \frac{1}{\eta \theta} \right) \right] \operatorname{sen}^3 \theta \\ N_{33}(\theta) &= \kappa^2 \left[\kappa \left(\frac{1}{\eta \theta} - 8 \right) \cos \theta + \left(8 - \frac{7}{\eta \theta} \right) \sqrt{\eta \theta} \right] \operatorname{sen}^3 \theta, \end{aligned} \quad (2.49)$$

sendo $\eta \theta = 1 - \kappa^2 \sin^2 \theta$.

Observar que as aproximações determinadas em (2.48) e (2.49) levam em conta apenas perturbações dos parâmetros físicos $\delta\rho, \delta z$ e $\delta\mu$ e não do ângulo de incidência. Entretanto, muitas destas fórmulas aproximadas levam em conta perturbações angulares também, aproximações estas conhecidas como quase-normais (Castagna, 1993).

As Figuras 2.4, 2.5, 2.6 e 2.7 ilustram dois casos de aproximações (linear e quadrático), em comparação com as amplitudes exatas: o primeiro (Figuras 3 e 4), considerando modelos com baixos contrastes (Tabela 3) e o segundo (Figuras 5 e 6), modelos com contrastes moderados (Tabela 4).

	$\delta\rho = \frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_2 + \rho_1}$	$\delta\alpha = \frac{\alpha_2 - \alpha_1}{\alpha_2 + \alpha_1}$	$\delta\beta = \frac{\beta_2 - \beta_1}{\beta_2 + \beta_1}$
Contrastes médios	-3,5 %	-3,7 %	10,8 %

Tabela 3 – Modelo com baixo contraste entre as duas camadas

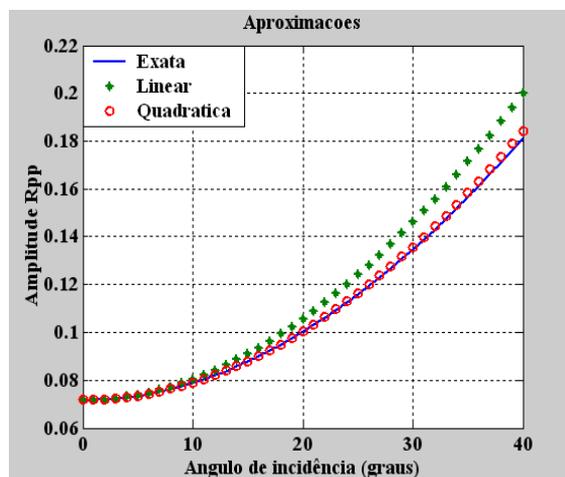


Figura 2.4 – Coeficientes Rpp exato e aproximados (linear e quadrático), considerando-se modelos com baixos contrastes

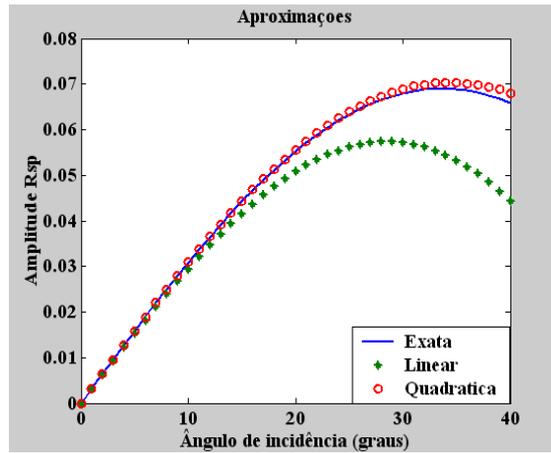


Figura 2.5 – Coeficientes Rsp exato e aproximados (linear e quadrático), considerando-se modelo com baixos contrastes

	$\delta\rho = \frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_2 + \rho_1}$	$\delta\alpha = \frac{\alpha_2 - \alpha_1}{\alpha_2 + \alpha_1}$	$\delta\beta = \frac{\beta_2 - \beta_1}{\beta_2 + \beta_1}$
Contrastes médios	7,5 %	17,1 %	113,0 %

Tabela 4 – Modelo com contrastes moderados entre as duas camadas

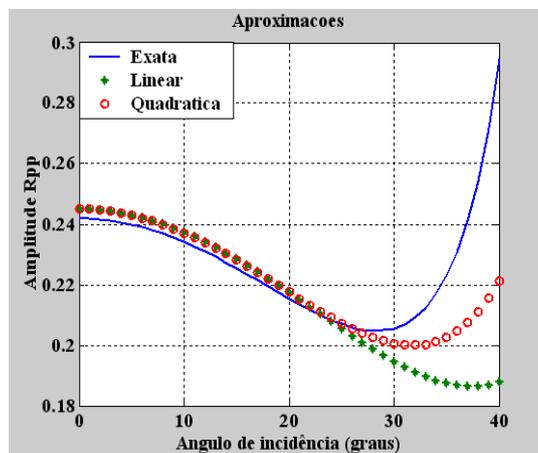


Figura 2.6 – Coeficientes Rpp exato e aproximados (linear e quadrático), considerando-se modelo com contrastes moderados

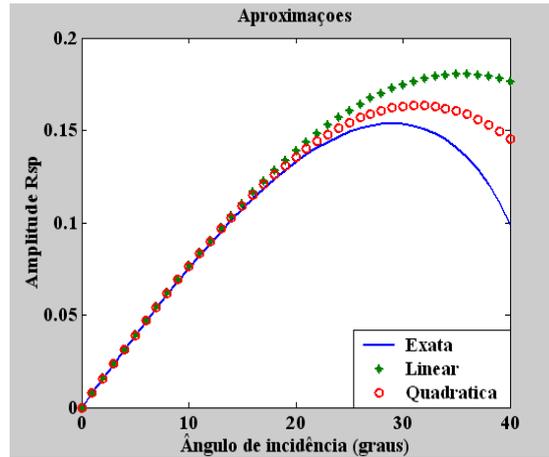


Figura 2.7 – Coeficientes R_{sp} exato e aproximados (linear e quadrático), considerando-se modelo com contrastes moderados

2.5 – CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste capítulo foi apresentado um formalismo que determina as amplitudes de ondas espalhadas através de interfaces plano-horizontais que separam dois meios elásticos isotrópicos. Foram obtidas as amplitudes exatas e aproximadas das amplitudes de refletidas e convertidas de uma onda incidente P. Estas soluções foram alcançadas a partir das continuidades dos campos de deformação e das componentes verticais do tensor de tração e apresentadas como soluções de um sistema de equações matriciais, cujas matrizes são conhecidas como matrizes de Zöppritz e carregam informações sobre os parâmetros físicos dos meios envolvidos e a geometria de aquisição dos dados.

Foram obtidas, também, versões linearizadas e quadráticas dessas amplitudes em termos dos contrastes médios de densidade ($\delta\rho$), de impedância (δz) e do módulo de cisalhamento ($\delta\mu$) entre os dois meios. As fórmulas aqui obtidas levaram em conta apenas as perturbações dos parâmetros físicos em torno da origem e não as dos ângulos de incidência em torno da incidência normal. Gráficos ilustrativos foram obtidos, visando marcar o comportamento das amplitudes das ondas P refletidas (R_{PP}) e convertidas (R_{SP}) e as performances das aproximações aqui obtidas. Os resultados mostraram-se bastante satisfatórios, principalmente no que diz respeito às fórmulas aproximadas, com ênfase plena para as aproximações quadráticas.

3 – ALGUNS MÉTODOS PARA PROBLEMAS DE MÍNIMOS QUADRADOS GERAIS

3.1 - CONSIDERAÇÕES INICIAIS

Nesta seção é apresentada uma breve discussão sobre métodos de otimização sendo aplicados dois importantes tipos destes métodos: (a) aqueles que dependem das derivadas das funções custo envolvidas, como o Método de Newton e seus variantes; e (b) aqueles que não dependem de derivadas, como os métodos tipo Monte Carlo, que têm como paradigmas básicos os conhecido Métodos de Algoritmo Genético.

Problemas de mínimos quadrados constituem variantes especiais de problemas mais gerais de otimização, que nada mais são que a busca de soluções que minimizam ou maximizam, de forma local ou global, certas classes de funcionais que aparecem em uma grande variedade de problemas aplicados.

Os métodos são apresentados nas suas versões algorítmicas, sendo enfatizadas, entretanto, as suas vantagens e limitações. Exemplos ilustrativos da aplicação dos métodos são também apresentados.

3.2 – MÉTODOS GERAIS DE SOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE OTIMIZAÇÃO

3.2.1 – ASPECTOS GERAIS EM PROBLEMAS DE OTIMIZAÇÃO

Um problema de otimização é todo aquele que busca soluções que minimizam ou maximizam, local ou globalmente, algum funcional, linear ou não. Muitos métodos foram desenvolvidos nesta área e uma vasta literatura sobre o assunto encontra-se disponível (Madsen et al, 2004).

De um modo geral, um funcional é toda função F definida em algum espaço de Banach B , assumindo valores em \mathbb{R} . Em geral, os argumentos de F não precisam assumir valores numéricos, necessariamente. Eles podem ser termos definidos em algum espaço extremamente abstrato. Curvas, por exemplo, em problemas isoperimétricos. No presente trabalho serão assumidos os espaços reais \mathbb{R}^n , sendo $n \in \mathbb{N}$. Assim, definitivamente:

$$F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}. \quad (3.1)$$

Definição 3.1 – Um ponto $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ é dito um ponto de *mínimo local* de uma função F se, e somente se, satisfizer:

$$F(\mathbf{x}^*) \leq F(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\| < \delta, \quad (3.2)$$

sendo $\|\cdot\|$ uma norma de \mathbb{R}^n e $\delta > 0$. Se a desigualdade (3.2) for verificada $\forall x \in \mathbb{R}^n$, \mathbf{x}^* é dito *mínimo global*. É claro que todo mínimo global é local, mas a recíproca nem sempre é verificada. As definições de máximos local e global são feitas de forma análoga, apenas trocando \leq por \geq na definição (3.2).

As definições acima levam naturalmente aos seguintes problemas de otimização:

1) problema de minimização local

Dada $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, determinar $\mathbf{x}^* = \min_{\|\mathbf{x}-\mathbf{x}^*\| < \delta} F(\mathbf{x})$.

2) problema de maximização local

Dada $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, determinar $\mathbf{x}^* = \max_{\|\mathbf{x}-\mathbf{x}^*\| < \delta} F(\mathbf{x})$.

3) problema de minimização global

Dada $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, determinar $\mathbf{x}^* = \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} F(\mathbf{x})$.

4) problema de maximização global

Dada $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, determinar $\mathbf{x}^* = \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} F(\mathbf{x})$.

A função F que define problemas de otimização como acima é conhecida como *função objetivo* ou *função custo* do problema. Por outro lado, como $\max F(x) = \min -F(x)$, segue-se que é suficiente estudar apenas problemas de minimização.

Assumindo a função custo F suficientemente suave, a seguinte *expansão de Taylor* pode ser obtida:

$$F(\mathbf{x} + \mathbf{h}) = F(\mathbf{x}) + \nabla F(\mathbf{x})^t \mathbf{h} + \frac{1}{2} \mathbf{h}^t \mathbf{H}(\mathbf{x}) \mathbf{h} + O(\|\mathbf{h}\|^3), \quad (3.3)$$

sendo ∇ o gradiente usual:

$$\nabla F(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial x_1}(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \frac{\partial F}{\partial x_n}(\mathbf{x}) \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

e \mathbf{H} a matriz hessiano de F :

$$\mathbf{H}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 F}{\partial x_1^2}(\mathbf{x}) & \cdots & \frac{\partial^2 F}{\partial x_1 \partial x_n}(\mathbf{x}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 F}{\partial x_1 \partial x_n}(\mathbf{x}) & \cdots & \frac{\partial^2 F}{\partial x_n^2}(\mathbf{x}) \end{bmatrix}. \quad (3.5)$$

Se \mathbf{x}^* for um ponto de mínimo local, temos que $F(\mathbf{x}^* + \mathbf{h}) \geq F(\mathbf{x}^*)$ para todo \mathbf{h} suficientemente pequeno. A combinação deste fato com (3.3), determina a seguinte *condição necessária para um ponto de mínimo local*:

Teorema 3.1 – Se F é diferenciável e \mathbf{x}^* é um ponto de mínimo local, então $\nabla F(\mathbf{x}^*) = 0$.

Para o estudo de condições suficientes, torna-se necessária a introdução do conceito de ponto estacionário.

Definição 3.2 – Um ponto \mathbf{x}_s é dito *estacionário* de uma função F diferenciável se e somente se $\nabla F(\mathbf{x}_s) = 0$.

Observa-se que todo ponto de mínimo local de uma função F diferenciável, é sempre um ponto estacionário, o mesmo acontecendo para todo ponto de máximo local. Entretanto, existe ponto estacionário que não é nem ponto de mínimo nem de máximo local. Tais pontos são conhecidos como *pontos de sela*. Um exemplo simples mas bastante ilustrativo deste caso é o ponto $(0,0) \in \mathbb{R}^2$, que é ponto estacionário da função $f(x, y) = x^2 - y^2$, mas não é nem ponto de mínimo nem de máximo da função.

Se \mathbf{x}_s é um ponto estacionário de uma função suficientemente diferenciável, a expansão de Taylor de F definida em (3.3) fica sendo:

$$F(\mathbf{x}_s + \mathbf{h}) = F(\mathbf{x}_s) + \mathbf{h}^t \mathbf{H}(\mathbf{x}_s) \mathbf{h} + O(\|\mathbf{h}\|^3), \quad (3.6)$$

uma vez que $\nabla F(\mathbf{x}_s) = 0$. Isto garante que quem controla a função numa vizinhança de F é exatamente a matriz hessiano $\mathbf{H}_s = \mathbf{H}(\mathbf{x}_s)$ da função. Portanto, é muito importante estudar propriedades desta matriz para a obtenção de informações sobre o comportamento de F . Inicialmente, sabe-se que a matriz hessiana \mathbf{H}_s é simétrica, para F suficientemente regular, o que garante a realidade de seus autovalores.

Definição 3.3 – Uma matriz real e quadrada é dita positiva definida se e somente seus autovalores são todos reais e positivos.

Definindo $0 < \delta = \min \lambda_1, \dots, \lambda_n$, sendo cada λ_i um autovalor de \mathbf{H}_s , temos a seguinte desigualdade (Madsen, 2004):

$$\mathbf{h}^t \mathbf{H}_s \mathbf{h} > \delta \|\mathbf{h}\|^2. \quad (3.7)$$

Portanto, para todo \mathbf{h} suficientemente pequeno, o termo $\mathbf{h}^t \mathbf{H}_s \mathbf{h}$ presente em (3.6) dominará o termo $O(\|\mathbf{h}\|^3)$, resultando em $F(\mathbf{x}_s + \mathbf{h}) \geq F(\mathbf{x}_s)$, para todo \mathbf{h} suficientemente pequeno. Isto resulta na seguinte condição suficiente para um ponto de mínimo local:

Teorema 3.2 – Se \mathbf{x}_s é um ponto estacionário de uma função suficientemente diferenciável F , e se a sua matriz hessiano \mathbf{H}_s é positiva definida, então \mathbf{x}_s é um ponto de mínimo local.

No caso de \mathbf{H}_s ser uma matriz negativa definida, ou seja, se todos os seus autovalores forem negativos, então o ponto estacionário \mathbf{x}_s é máximo local. No caso extremo em que \mathbf{H}_s apresenta autovalores positivos e negativos, então \mathbf{x}_s é um ponto de sela. Se acontecer de pelo menos um dos autovalores de \mathbf{H}_s ser nulo, a caracterização do ponto estacionário \mathbf{x}_s fica mais complicada.

3.2.2 – MÉTODOS GERAIS DE SOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE OTIMIZAÇÃO BASEADOS NO CÁLCULO

A busca de soluções para problemas de otimização é uma tarefa extremamente

difícil e não existe uma teoria suficientemente unificada que permita sua aplicação de uma forma mais sistemática. Entretanto, existe uma classe muito ampla de métodos que podem ser aplicados com bastante sucesso numa grande quantidade de problemas. O mais emblemático destes métodos é o de Newton uma vez que serve de modelo para o desenvolvimento de uma série de outros métodos.

De um modo geral, os métodos de otimização são iterativos, principalmente no caso da otimização não linear. Isto significa dizer que a partir de uma solução inicial \mathbf{x}_0 , o método produz uma seqüência $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{x}_n, \dots$, que, se espera, seja convergente para alguma solução \mathbf{x}^* do problema. Por conta disto, a maioria dos métodos busca construir esta seqüência satisfazendo a chamada *condição de descida*:

$$F(\mathbf{x}_{k+1}) < F(\mathbf{x}_k). \quad (3.8)$$

Entretanto, alguns problemas podem acontecer na aplicação desses métodos. Um deles é que a seqüência pode convergir para um ponto de máximo local ou global ou, mesmo que menos provável, para um ponto de sela. Outro, é o caso em que existem vários pontos estacionários. A convergência vai depender da escolha do ponto de partida \mathbf{x}_0 . Como, em geral, não se sabe da localização dos pontos estacionários, fica difícil a escolha de \mathbf{x}_0 que convirja para a solução desejável.

Em muitos casos, o método aplicado busca encontrar o ponto de mínimo em dois estágios diferentes. Inicialmente, quando \mathbf{x}_0 encontra-se muito afastado da solução, é desejável que a seqüência realmente se aproxime da solução \mathbf{x}^* . Para isto, basta fazer com que $\|\mathbf{e}_{k+1}\| < \|\mathbf{e}_k\|$, $\forall k > K$, sendo K um inteiro positivo e $\mathbf{e}_k = \mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*$ o erro no k -ésimo passo da iteração. No estágio final, quando \mathbf{x}_k estiver próximo de \mathbf{x}^* , aí aplica-se um acelerador de convergência, que pode ser distinguida entre:

1) convergência linear:

$$\|\mathbf{e}_{k+1}\| \leq \alpha \|\mathbf{e}_k\|, \text{ quando } \|\mathbf{e}_k\| \text{ é pequeno; } 0 < \alpha < 1. \quad (3.9)$$

2) convergência quadrática:

$$\|\mathbf{e}_{k+1}\| \leq \alpha \|\mathbf{e}_k\|^2, \text{ quando } \|\mathbf{e}_k\| \text{ é pequeno.} \quad (3.10)$$

3) convergência superlinear:

$$\|e_{k+1}\| = O \|e_k\|^2, \text{ quando } k \rightarrow \infty. \quad (3.11)$$

No estágio de descida do método, deve-se obedecer aos seguintes procedimentos em cada passo da iteração:

- 1) Encontrar uma direção de descida \mathbf{h} ;
- 2) Encontrar, na direção escolhida \mathbf{h} , um bom decrescimento para os valores de F .

Os procedimentos acima podem ser resumidos no seguinte algoritmo (Madsen et al, 2004):

Algoritmo 3.1. Método de descida

início

$k := 1; \mathbf{x} := \mathbf{x}_0; \text{ found} := \text{false}$

while (*not found*) **and** ($k < k_{max}$)

$\mathbf{h}_d := \text{direção de descida}(\mathbf{x})$

if (*no such \mathbf{h}_d exists*)

$\text{found} := \text{verdadeiro}$

então

$\alpha := \text{step_length}(\mathbf{x}, \mathbf{h}_d)$

$\mathbf{x} := \mathbf{x} + \alpha \mathbf{h}_d; k := k + 1$

end

Buscando obter boas direções de descida, é preciso investigar o comportamento da função custo em torno da solução iterativa corrente. Sendo \mathbf{x} o ponto corrente e \mathbf{h} uma possível direção de descida, a expansão de Taylor em (3.3) em torno de \mathbf{x} , ao longo da reta que passa em \mathbf{x} , na direção \mathbf{h} , é dada por:

$$F(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{h}) = F(\mathbf{x}) + \alpha \nabla F(\mathbf{x})^t \mathbf{h} + O(\alpha^2), \quad (3.12)$$

sendo α um real que parametriza a reta. Para α suficientemente pequeno, quem controla o comportamento de F na vizinhança de \mathbf{x} é o termo $\alpha \nabla F(\mathbf{x})^t \mathbf{h}$. A função F vai ser decrescente se e somente se $\alpha \nabla F(\mathbf{x})^t \mathbf{h} < 0$. Esta propriedade sugere a introdução do conceito de direção de descida.

Definição 3.4 – Um vetor \mathbf{h} é dito uma direção de descida de uma função diferenciável F , em torno de um ponto \mathbf{x} se, e somente se, satisfaz a condição $\alpha \nabla F(\mathbf{x})^t \mathbf{h} < 0$.

Na prática, para se calcular o α_c que atende ao procedimento estipulado no algoritmo acima, resolve-se, analítica ou numericamente, o seguinte problema:

$$\alpha_c = \min_{\alpha > 0} F(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{h}) . \quad (3.13)$$

Por conta disto, este processo toma o nome de *busca linear*.

Baseados na idéia de direções de descida, dois métodos gerais são bastante populares, os métodos *de descida por passos ou do gradiente* e *de Newton*. Para descrevê-los seguem algumas definições e alguns resultados.

Definição 3.5 – Dada uma função $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, denomina-se conjunto de nível, num nível $k \in \mathbb{R}$, ao conjunto $S_k = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n / F(\mathbf{x}) = k \}$.

No caso $n=2$ tais conjuntos são conhecidos como *curvas de nível* e no caso $n=3$, *superfícies de nível*. O teorema abaixo determina importante propriedade de ortogonalidade dos conjuntos de nível.

Teorema 3.3 – Para toda função $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ diferenciável e para cada $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, seu gradiente $\nabla F(\mathbf{x})$ é sempre ortogonal a cada superfície de nível S_k .

Sabe-se do Cálculo Avançado que a variação de uma função $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ em torno de um ponto $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ e numa dada direção unitária $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^n$, é calculada pela sua *derivada direcional* $D_{\mathbf{h}} F(\mathbf{x}) = \nabla F(\mathbf{x})^t \mathbf{h} = \|\nabla F(\mathbf{x})\| \cos \theta$, sendo θ o ângulo entre $\nabla F(\mathbf{x})$ e \mathbf{h} . Como $\max \cos \theta = 1$ e $\min \cos \theta = -1$, segue-se que as direções de máxima e mínima variações de F em cada ponto $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ são, respectivamente, $\nabla F(\mathbf{x})$ e $-\nabla F(\mathbf{x})$. Com estes ingredientes o *método de descida passo a passo ou do gradiente* é desenvolvido.

A idéia do método do gradiente é muito simples. Tudo começa com a escolha de um ponto inicial \mathbf{x}_0 . Neste ponto, escolhe-se como direção de descida o vetor

$\mathbf{h} = -\nabla F \mathbf{x}_0$. Ao longo da reta que passa em \mathbf{x}_0 , na direção de \mathbf{h} , resolve-se o problema $\alpha_c = \min_{\alpha > 0} F \mathbf{x}_0 - \alpha \nabla F \mathbf{x}_0$, determinando-se a próxima aproximação $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 - \alpha_c \nabla F \mathbf{x}_0$. O método prossegue até que uma solução aproximada satisfatória seja alcançada. Os procedimentos acima podem ser resumidos no seguinte algoritmo (Madsen et al, 2004):

Algoritmo 3.2. Método do gradiente

```

begin
   $k := 1$ ;  $\mathbf{x} := \mathbf{x}_0$ ;  $found := false$ 
  while (not  $found$ ) and ( $k < k_{max}$ )
     $\mathbf{h}_d := -\nabla F \mathbf{x}$ 
    if (no such  $\mathbf{h}_d$  exists)
       $found := true$ 
    else
       $\alpha_c := \min_{\alpha > 0} F \mathbf{x} - \alpha \nabla F \mathbf{x}$ 
       $\mathbf{x} := \mathbf{x} - \alpha_c \nabla F \mathbf{x}$ ;  $k := k + 1$ 
    end

```

Como se observa, o método do gradiente escolhe $\mathbf{h} = -\nabla F \mathbf{x}_0$ como direção de descida. Métodos deste tipo sempre convergem, mas com convergência linear, circunstância que o torna extremamente lento. Entretanto, eles apresentam excelente performance na fase inicial do processo iterativo.

Diante da dificuldade de convergência do método do gradiente, é conveniente combiná-lo com outros métodos mais rápidos, gerando o que se chama de *métodos híbridos*. Um método que pode muito bem ser combinado com o método do gradiente é o método de Newton.

O método de Newton é aplicado, em geral, para a determinação de raízes de funções do tipo $F : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$. Entretanto, neste trabalho, o interesse é a determinação de pontos estacionários de uma função razoavelmente suave F . Ou seja, é resolver $\nabla F \mathbf{x} = 0$. A expansão de Taylor (3.3) aplicada no gradiente $\nabla F \mathbf{x}$ leva à expressão:

$$\begin{aligned} \nabla F \mathbf{x} + \mathbf{h} &= \nabla F \mathbf{x} + \mathbf{H} \mathbf{x} \mathbf{h} + \mathbf{O} \|\mathbf{h}\|^2 \\ &\cong \nabla F \mathbf{x} + \mathbf{H} \mathbf{x} \mathbf{h}, \end{aligned} \tag{3.14}$$

para $\|\mathbf{h}\|$ suficientemente pequeno. Admitindo $\mathbf{x} + \mathbf{h}$ suficientemente próximo do ponto estacionário, ou seja, que $\nabla F(\mathbf{x} + \mathbf{h}) \cong 0$, (3.14) sugere que o próximo passo da aproximação deve ser obtido pela solução do sistema

$$\mathbf{H}(\mathbf{x}) \mathbf{h} = -\nabla F(\mathbf{x}). \quad (3.15)$$

A atualização se dá fazendo $\mathbf{x} := \mathbf{x} + \mathbf{h}$. O processo prossegue iterativamente, até a obtenção de uma solução aproximada satisfatória para o problema. Admitindo a positividade definida de $\mathbf{H}(\mathbf{x})$ em cada passo do processo e pré-multiplicando (3.15) por \mathbf{h}' , obtém-se que $\mathbf{h}' \nabla F(\mathbf{x}) = -\mathbf{h}' \mathbf{H}(\mathbf{x}) \mathbf{h} < 0$, mostrando que o método de Newton é um método de descida. Por outro lado, a positividade definida da hessiano garante, também, a unicidade de solução do sistema (3.15).

O método de Newton é muito adequado para a etapa final de um método híbrido de otimização, principalmente quando combinado com uma outra vantagem do método que é sua convergência quadrática. Ele funciona como um acelerador de convergência, circunstância desejável em processos híbridos de otimização.

Uma dificuldade inerente ao método é o seu caráter local, dificultando o problema no caso da existência de vários pontos estacionários. Dependendo da proximidade do dado inicial, a seqüência pode convergir para um ponto de mínimo não desejável ou mesmo para um ponto de máximo ou de sela. Uma forma de se evitar isto, é garantir que o processo apresente direções de descidas em todos os seus passos. Além disso, pode ocorrer da hessiano possuir autovalores muito pequenos, mesmo que positivos. Neste caso, o sistema se torna extremamente instável, dificultando a solução plena do problema.

Os procedimentos acima podem ser resumidos no seguinte algoritmo (Madsen et al, 2004):

Algoritmo 3.3. Método de Newton

```

begin
   $k := 1$ ;  $\mathbf{x} := \mathbf{x}_0$ ;  $found := false$ 
  while (not  $found$ ) and ( $k < k_{max}$ )
    solve  $\mathbf{H}(\mathbf{x}) \mathbf{h} = -\nabla F(\mathbf{x})$ 
    if (no such  $\mathbf{h}_d$  exists)
       $found := true$ 
    else
       $\mathbf{x} := \mathbf{x} + \mathbf{h}$ ;  $k := k + 1$ 
  end

```

Um método híbrido pode ser efetivado juntando os métodos do gradiente e o de Newton. Para isto basta inserir no algoritmo principal o seguinte comando:

se $\mathbf{H} \mathbf{x}$ é positiva definida

$\mathbf{h} := \mathbf{h}_n$

então

$\mathbf{h} := \mathbf{h}_{sd}$

$\mathbf{x} := \mathbf{x} + \alpha \mathbf{h}$,

sendo \mathbf{h}_n e \mathbf{h}_{sd} as direções preconizadas nos métodos de Newton e do gradiente, respectivamente. Observar que para o caso do método de Newton, $\alpha = 1$.

Em problemas mais complicados, o cálculo da hessiano $\mathbf{H} \mathbf{x}$ pode se constituir num estorvo ou mesmo ser impossível de se efetivar, pela necessidade de se calcular as derivadas de segunda ordem da função F . Portanto, em vez do método de Newton, busca-se outros métodos alternativos que se baseiam em aproximações mais facilmente computáveis da matriz $\mathbf{H} \mathbf{x}$. Tais métodos são conhecidos como *métodos quasi-Newton* (Madsen et al, 2004).

3.2.3 – MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO GLOBAL BASEADOS NO PROCESSO DE BUSCA ALEATÓRIA

Existem várias circunstâncias que tornam os métodos de otimização baseados no cálculo muitas vezes ineficientes. Dentre elas, as principais são: (a) o caráter local dos métodos, o que dificulta a discriminação do extremante global desejável; (b) a necessidade de se calcular as derivadas da função custo, tarefa, às vezes, muito difícil; (c) o comportamento extremamente lento dos métodos no caso de grande suavidade da função custo na vizinhança do extremante; e (d) as poucas informações sobre o comportamento da função custo do problema. Diante destas dificuldades, torna-se necessário o desenvolvimento de métodos que eliminem estas circunstâncias indesejáveis e torne o método razoavelmente eficiente. Existem dois destes métodos que são amplamente utilizados numa grande variedade de aplicações científicas e tecnológicas: os métodos de algoritmo genético e de Nedell – Mead.

3.2.3.1 – Os métodos de algoritmo genético

Algoritmos genéticos são algoritmos de busca, heurísticos e adaptativos, baseados nas idéias evolucionistas da seleção natural de Darwin e da Genética (Mitchell, 2004). Comparados com os procedimentos tradicionais de busca e de otimização, os algoritmos genéticos são robustos e globais e geralmente mais adequados

de serem aplicados a situações onde existem poucas informações ou mesmo nenhum conhecimento a priori acerca do problema a ser resolvido. Eles não exigem informações sobre derivadas ou estimativas iniciais da solução, além de serem de natureza estocástica. Eles são capazes de buscar a solução no espaço inteiro com muito mais certeza de encontrar o extremante global do problema.

A idéia da *computação evolucionista* foi introduzida em 1960 por I. Rechenberg no seu trabalho pioneiro “Evolution strategies”, que influenciou outros pesquisadores, dentre eles J. Holland. Este autor escreveu o livro “Adaptation in natural and artificial systems”, publicado em 1975, lançando os fundamentos dos *algoritmos genéticos*. Em 1992, J. Koza utilizou algoritmos genéticos para desenvolver programas que resolvessem certas classes de problemas, dando origem à chamada *programação genética*.

Como dito anteriormente, os algoritmos genéticos são baseados nas idéias evolucionistas da seleção natural e da genética. A seguir um pouco dos fundamentos biológicos dessas idéias.

Todos os organismos vivos consistem de *células*. Em cada célula existe o mesmo conjunto de *cromossomos*, que nada mais são que *fitas de DNA* que servem como um modelo de todo o organismo. Cada cromossomo é formado de *genes*, blocos de DNA, que codificam uma proteína particular. Basicamente, pode-se afirmar que cada gen codifica uma característica do organismo, a cor dos olhos, por exemplo, e cada característica particular, como os olhos serem azuis, por exemplo, toma o nome de *alelo*. O conjunto completo de material genético é chamado de *genoma* e um conjunto particular de genes no genoma toma o nome de *genótipo*. Os genótipos, que se desenvolvem após o nascimento, constituem a base do *fenótipo* do organismo, que determina as características físicas e mentais dos organismos, como a cor dos olhos, a inteligência, etc.

No processo de reprodução, são desenvolvidas algumas ações que determinam a seleção dos genes mais capazes. A primeira delas é a *recombinação*, que é determinada pela combinação dos cromossomos pais para a formação de um novo cromossomo. Este novo cromossomo pode ser modificado através de um procedimento de *mutação*, que significa que os elementos do DNA são alterados. Estas alterações podem ser determinadas por falhas nos genes copiados a partir dos pais. O desempenho de um organismo é mensurado pelo sucesso do organismo ao longo de sua vida.

Os algoritmos genéticos usam, na sua estrutura algorítmica, todos estes procedimentos aplicados na Genética, e quem desempenha um papel fundamental, numa boa quantidade de problemas, é a função custo $f(x)$, associada ao problema de otimização a ser resolvido. O argumento x representa cada cromossomo da população.

Os algoritmos começam pela avaliação de um conjunto ou população de soluções. Abaixo, os procedimentos básicos de um algoritmo genético:

1. **[início]** Geração aleatória de população de n cromossomos (soluções aceitáveis do problema).
2. **[avaliação]** Avaliação da função custo $f(x)$ de cada cromossomo x da população.
3. **[nova população]** Criação de nova população pela repetição dos seguintes passos até que nova população seja criada:

[seleção] Seleção de dois cromossomos pais a partir de uma população de acordo com o critério de ajuste estabelecido (melhor ajuste, maior chance de ser selecionado, por exemplo).

[recombinação] Uso de uma probabilidade de recombinação sobre os cromossomos pais para formar cromossomos filhos. Se a recombinação não for possível, repetir novamente as cópias dos pais

[mutação] Uso de uma probabilidade de mutação para alterar o novo cromossomo em cada posição no cromossomo.

[aceitação] Incorporação do novo cromossomo na nova população.

4. **[relocação]** Utilização da nova população para a nova aplicação do algoritmo.
5. **[teste]** Parada do processo se o critério de parada for satisfeito; retomada do algoritmo, se não.
6. **[retorno]** Retorno pra o passo 2.

Como se observa no algoritmo acima, a cada algoritmo genético aplica um conjunto de ações para alcançar a solução do problema. Estas ações chamam-se *operadores do algoritmo genético*. A Figura 3.1 abaixo representa um fluxograma descritivo de um Algoritmo Genético geral:

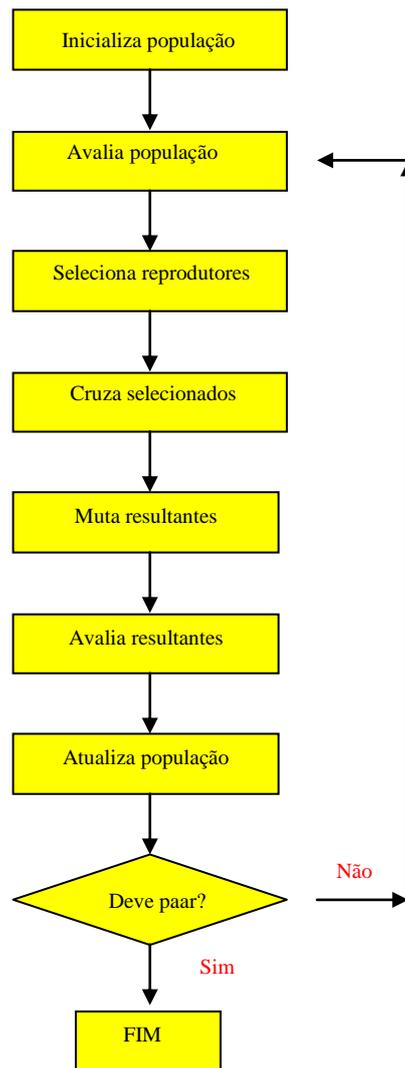


Figura 3.1 – Fluxograma geral de um Algoritmo Genético

A seguir uma descrição sucinta dos atributos de um Algoritmo Genético.

Espaço de busca

Na solução de um problema de otimização, naturalmente se busca alguma solução que será considerada a melhor dentre outras. O espaço de todas as soluções factíveis do problema é chamado de *espaço de busca* ou *espaço de estado*. Cada ponto do espaço corresponde a uma possível solução. Cada ponto do espaço de busca é marcado pelo valor da função custo neste ponto e o objetivo dos algoritmos genéticos é buscar a melhor solução, como um típico problema de otimização.

Seleção

Como se sabe, cromossomos são selecionados em uma população para servirem de pais numa recombinação. Como selecionar estes cromossomos? Segundo a Teoria Evolucionista de Darwin, os melhores sobrevivem para criar novos cromossomos. Abaixo, alguns tipos de seleção empregados em algoritmos genéticos:

a. seleção por roleta

Os parentes são selecionados de acordo com o seu ajuste. Quanto melhores são os cromossomos, mais chances eles têm de serem selecionados. Imagine uma roleta onde todos os cromossomos estão localizados. O tamanho da seção na roleta é proporcional ao valor da função custo em cada cromossomo – maior o seu valor, mais larga a seção. Girando a roleta, o cromossomo onde ela para é escolhido. Claramente, o cromossomo de maior valor será selecionado mais vezes. Este processo obedece ao seguinte algoritmo:

1. **[somatório]** Calcular a soma S das avaliações em todos os cromossomos da população.
2. **[seleção]** Gerar um número aleatório r no intervalo $0, S$.
3. **[retorno]** Percorrer a população e calcular, em cada etapa, a soma s dos cromossomos percorridos. Quando $s > r$, parar e retornar ao cromossomo anterior.

b. seleção por “rank”

A seleção por roleta apresenta problemas quando existem grandes diferenças entre as avaliações dos cromossomos. A seleção por “rank” busca evitar esta circunstância, procedendo da seguinte maneira: todos os cromossomos são avaliados e ordenados em ordem crescente, atribuindo-se os valores $1, 2, \dots, N$, de acordo com os valores de suas avaliações, e aplicar o método da roleta. Observar que todos os cromossomos têm chances de serem selecionados. O problema deste método é que pode se tornar extremamente lento.

c. seleção estacionária

Não existe um método especial de seleção de cromossomos pais. A idéia principal da *seleção estacionária* é que grande parte dos cromossomos deve sobreviver à próxima geração, e trabalha da seguinte maneira: em cada geração apenas poucos cromossomos são selecionados para criar novas gerações. Então

aqueles cromossomos que apresentam baixos valores nas suas avaliações são removidos e trocados novos cromossomos. O resto da população sobrevive à nova geração.

d. seleção por elitismo

Quando são criadas novas populações, existe o risco de se perder os melhores cromossomos. Buscando evitar estas perdas, o método da *seleção por elitismo* copia, inicialmente, os melhores cromossomos. O resto da população pode ser construído usando algum dos métodos anteriores. A sua grande vantagem é que ele previne a perda dos melhores cromossomos.

Codificação

Um cromossomo deve, de alguma forma, conter informações sobre a solução que ele representa. Existem várias formas de representar um cromossomo, que dependem do tipo de problema a ser resolvido. Alguns exemplos são a codificação binária, por números inteiros, reais ou mesmo por permutações, e assim por diante.

a. codificação binária

O mais usual é usar a *codificação binária* para representá-lo. Por exemplo:

Cromossomo 1	1101100100110110
Cromossomo 2	1101111000011110

Entretanto, a codificação binária não é adequada numa série de problemas, por exemplo, o “Knapsack problem”.

b. codificação por permutação

A *codificação por permutação* é aplicada em muitos problemas que exigem ordenações, como o problema do caixeiro viajante. Nesta codificação, cada cromossomo é uma fila de números que representam posições numa seqüência. Por exemplo:

Cromossomo 1	153264798
Cromossomo 2	856723149

c. codificação por valores

A *codificação por valores* é aplicada em muitos problemas em que valores complicados tais como números reais são usados. O uso de codificação binária, por exemplo, pode ser difícil. Podem ser usados outros atributos como letras ou objetos. Por exemplo:

Cromossomo 1	1.2324 5.3243 0.4556 2.3293 2.4545
Cromossomo 2	ABDJEIHGTFDSCVBYTREKIJUHH
Cromossomo 3	(back), (back), (right), (forward), (left)

Um problema onde é muito interessante a aplicação da codificação por valores, é o problema da determinação de pesos em uma rede neural.

Recombinação e mutação

A recombinação e a mutação são dois operadores básicos do algoritmo genético, cuja performance vai depender fundamentalmente deles. Seus tipos e implementações vão depender tanto do problema a ser resolvido quanto da codificação a ser aplicada.

a. **Recombinação usando codificação binária**

- De um único ponto – consideram-se dois cromossomos pais e uma posição comum nas duas filas binárias que representam estes cromossomos. O novo cromossomo pode ser obtido justapondo a parte inicial do primeiro cromossomo à parte final do segundo cromossomo. No exemplo abaixo, foi escolhida a quinta posição:

$$11001011 + 11001111 = 11001111$$

- De dois pontos – consideram-se dois cromossomos pais e duas posições comuns nas duas filas binárias que representam os dois cromossomos. O novo cromossomo pode ser obtido justapondo, nesta ordem, a parte inicial do primeiro à parte central do segundo à parte final do primeiro. No exemplo abaixo, foram escolhidas a segunda e a quinta posição:

$$11001011 + 11011111 = 11011111$$

- Uniforme – os ‘bits’ são copiados aleatoriamente a partir do primeiro ou

do segundo pai:

$$11001011 + 11011101 = 11011111$$

- Aritmético – alguma operação aritmética binária é aplicada entre alguns ‘bits’ dos dois pares de cromossomos:

$$11001011 + 11011101 = 11001001$$

b. Mutação usando codificação binária

- Inversão de ‘bits’. – ‘bits’ selecionados trocam de posições:

$$11001001 \Rightarrow 10001001$$

c. Recombinação usando codificação por permutação

- De um único ponto – neste caso é escolhida uma posição comum nas filas. Toma-se a permutação do primeiro cromossomo até a posição escolhida e compara-se com a correspondente no segundo cromossomo. Se não houver coincidência, ela é adicionada, completando-se com a parte final do primeiro cromossomo devidamente rearranjada, para evitar repetição do primeiro cromossomo:

$$123456789 + 453689721 = 123456897$$

d. Mutação usando codificação por permutação

- Por mudança de ordem – neste caso são escolhidos dois números na fila e posteriormente trocados:

$$123456789 \Rightarrow 123856749$$

e. Recombinação usando codificação por avaliação

- Neste caso pode-se aplicar todos os métodos do caso binário.

f. Mutação usando codificação por avaliação

- Por perturbação – neste caso são introduzidas pequenas perturbações nos

valores selecionados. Exemplo:

1.29 5.68 **2.86 4.11** 5.55 \Rightarrow 1.29 5.68 **2.73 4.22** 5.55

Alguns parâmetros importantes dos algoritmos genéticos

a. Tamanho da população

Quantos cromossomos devem constar de uma população? Se existem poucos, o algoritmo genético apresenta poucas possibilidades de recombinações, e somente parte do espaço de busca é explorada. Por outro lado, se existem muitos, o processo se torna extremamente lento. Na verdade, não existe uma metodologia que diga qual o tamanho adequado para a população no espaço de busca. Pesquisas heurísticas recentes mostram que a partir de certo limite torna-se desnecessário aumentar o tamanho da população por não haver nenhum ganho na velocidade de solução a partir deste limite.

b. Probabilidade de recombinação

A *probabilidade de recombinação* mede o seu desempenho quando da aplicação do algoritmo. Se ela não acontecer, a nova população vai ser uma cópia da população inicial. Se ela acontecer, as novas gerações serão constituídas por parte dos cromossomos pais das gerações anteriores. A recombinação deve ser aplicada presumindo que os novos cromossomos devem conter as partes boas dos cromossomos anteriores e que, portanto, os novos cromossomos serão melhores que os anteriores.

c. Probabilidade de mutação

A *probabilidade de mutação* mede o seu desempenho quando da aplicação do algoritmo. Se ela não acontecer, a nova geração será gerada imediatamente sem nenhuma mudança. Se ela acontecer, uma ou mais partes de um cromossomo será modificada. O resultado prático da aplicação da mutação em todo algoritmo genético é evitar que o mesmo falhe próximo de pontos extremantes.

Algumas recomendações para a aplicação de algoritmos genéticos

Existem algumas recomendações práticas para aqueles que pretendem implementar o seu algoritmo genético. É sabido que não existe uma teoria geral disponível que possa ajudar o usuário de algoritmos genéticos de forma segura e

sistemática. Afinal de contas, na otimização geral, cada problema é um novo problema e deve ser resolvido de acordo com as suas características próprias. O mesmo acontece com os algoritmos genéticos. As recomendações a seguir são resultados de estudos empíricos aplicados particularmente a problemas codificados em binários:

- Probabilidade de recombinação – a probabilidade de recombinação deve ser tomada entre 80% e 95%. Alguns resultados mostram que a escolha em torno de 60% é a melhor para alguns tipos de problemas.
- Probabilidade de mutação – por outro lado, a probabilidade de mutação deve ser muito baixa. Os melhores valores devem ser tomados entre 0.5% e 1%.
- Tamanho da população – Pode ser surpreendente, mas populações muito grandes não melhoram a performance de um algoritmo genético. Boas populações giram em torno da faixa 20 – 30 elementos, mas algumas vezes tamanhos na faixa 50 - 100 elementos são registradas como melhores. Outras pesquisas ainda mostram que o melhor tamanho da população vai depender do tamanho do cromossomo. Isto significa que cromossomos com 32 ‘bits’ vão exigir população com tamanho maior que daqueles com 16 ‘bits’.
- Tipo de seleção – A seleção por roleta pode ser usada, mas algumas vezes a seleção por ‘rank’ apresenta melhor performance. Existem, todavia, outros processos de seleção mais sofisticados, que modificam os parâmetros de seleção durante a aplicação do algoritmo. Eles se comportam de forma semelhante ao conhecido método de busca “simulated annealing”. O método do elitismo pode ser usado se não se dispôr de outros métodos.
- Codificação – A codificação vai depender do problema a ser resolvido e das circunstâncias de sua solução. Não existe uma orientação unificada para a sua aplicação.
- Tipos de recombinação e mutação – A escolha destes operadores depende fundamentalmente do código e do problema.

Uma desvantagem crucial dos algoritmos genéticos, quando comparados com outros métodos de otimização, é que eles são computacionalmente mais lentos e mais

caros. Mas, como eles resolvem, em geral, os problemas propostos, a sua aplicação torna-se extremamente aceitável, principalmente se for levada em conta a presença dos computadores de alta performance da atualidade.

Algumas áreas científicas e tecnológicas utilizam os algoritmos genéticos para resolverem muitos de seus problemas. Abaixo, uma relação de algumas destas áreas:

- Sistemas dinâmicos não-lineares – Predição e análise de dados.
- Redes neurais – pesos e arquiteturas.
- Trajetórias de robots.
- Programação genética.
- Planejamento de estratégias.
- Determinação de formas de moléculas de proteínas.
- Funções para a criação de imagens.

3.2.3.2 – O método simplex de Nelder - Mead

O método de Nelder – Mead é um método simplex que busca a determinação de um mínimo local ou global de uma função de multivariáveis. Sua descoberta é atribuída a J. A. Nelder e R. Mead (Nelder & Mead, 1965). Para o caso de duas variáveis, um simplex é um triângulo, e o método de Nelder – Mead é um método de busca que compara os valores da função nos três vértices do triângulo, e o vértice em que a função assume o maior valor é rejeitado e trocado por um novo vértice. O processo gera uma seqüência de triângulos (que podem apresentar diversas formas e tamanhos) para a qual os valores da função nos vértices dos triângulos se tornam mais e mais pequenos, até atingirem o valor mínimo desejável.

No caso geral o algoritmo é estabelecido usando-se os simplex, que nada mais são que generalizações, para o caso n -dimensional, do triângulo do caso bidimensional, e buscando os valores de mínimo da função nos vértices de cada simplex, até o mínimo desejável ser alcançado. Do ponto de vista computacional, o método é efetivo e extremamente compacto (Mathews & Fink, 2004).

1) Descrição do método no caso bidimensional

Seja $f(x, y)$ uma função de duas variáveis a ser minimizada. Para inicializar o processo, sejam $V_k(x_k, y_k)$, $k=1,2,3$ os três vértices de um triângulo.

➤ A determinação dos vértices B, G e W

A função é avaliada em cada um dos três vértices: $z_k = f(x_k, y_k)$, $k=1,2,3$, que são ordenados tais que: $z_1 \leq z_2 \leq z_3$. Sejam $B = (x_1, y_1)$, $G = (x_2, y_2)$ e $W = (x_3, y_3)$ os vértices de melhor, médio e pior desempenho, respectivamente.

➤ A determinação do ponto médio do melhor lado

Em algum estágio, o processo prossegue determinando-se o ponto médio M dos dois melhores lados B e G :

$$M = \frac{1}{2} B + G = \left(\frac{x_1 + x_2}{2}, \frac{y_1 + y_2}{2} \right).$$

➤ A determinação da reflexão do ponto W

Pela definição dos pontos B, G e W , a função $f(x, y)$ decresce ao longo dos lados WB e WG . Portanto, é natural que se tente buscar o ponto extremante no lado oposto ao triângulo $\triangle BWG$. Uma escolha possível é refletir o triângulo com relação ao lado BG , determinando o vértice R , oposto ao vértice W . Para a sua determinação, é importante a obtenção do ponto médio M . A fórmula para a sua obtenção é dada por:

$$R = 2M - W.$$

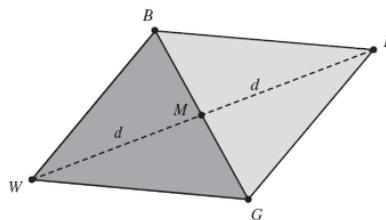


Figura 3.1. Reflexão do triângulo a partir do vértice W

➤ Extensão do triângulo refletido a partir do vértice R

Se o valor da função em R for menor que o seu valor em W , isto significa que a direção de busca está correta, e pode-se, ainda, avançar mais buscando o ponto extremante. Para isto, busca-se determinar um novo ponto E além do ponto R , ao longo da direção MR , formando um triângulo estendido $\triangle BGE$. Se o valor da função neste vértice for menor que o seu valor em R , então E será candidato a extremante no novo triângulo $\triangle BGE$. A Figura 3.2 abaixo ilustra este procedimento geométrico. Uma escolha possível para a determinação de E é dada por:

$$E = 2R - M.$$

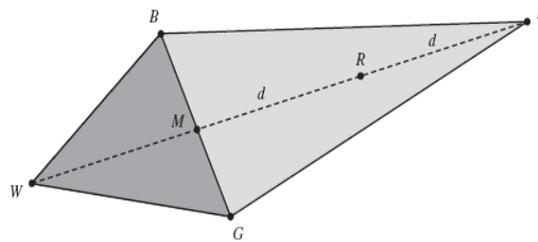


Figura 3.2. Extensão do triângulo a partir do vértice w .

➤ Contração do triângulo

Se os valores em R e W não forem satisfatórios, outro ponto deve ser testado. Provavelmente a função possa ser menor em M mas não se pode trocar W pois, neste caso, $\triangle BMG$ não seria um triângulo. Uma alternativa é tomar os pontos médios C_1 e C_2 de WM e MR , respectivamente. O ponto C que apresentar menor valor da função é escolhido como o novo vértice, determinando o novo triângulo de busca $\triangle BGC$.

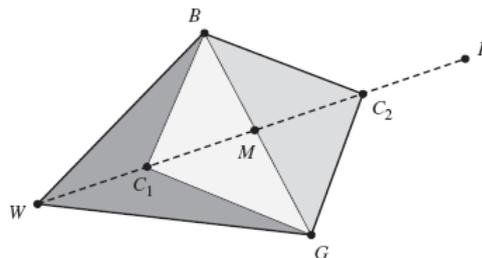


Figura 3.3. Contração do triângulo BGW

➤ Retração na direção do ponto B

No caso do valor da função em C não for menor que o seu valor em W , a estratégia é retrair o triângulo anterior, deixando fixo o ponto B . Para isto, basta trocar o ponto G por \bar{G} , o ponto médio de BG , e W por \bar{W} , o ponto médio de BW , e considerar o triângulo $\triangle B\bar{G}\bar{W}$. O processo prossegue, usando-se os procedimentos anteriores.

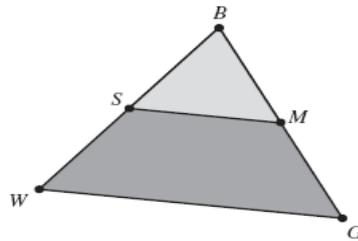


Figura 3.4.- Retração na direção do ponto B

2) Algoritmo do método de Nelder – Mead – caso 2D

IF $f R < f G$, **THEN** aplicar o caso (i) (reflexão ou extensão)

ELSE aplicar o caso (ii) (contração ou retração)

BEGIN {caso i}

IF $f B < f R$ **THEN**

trocar W com R

$$\text{calcular } C = \frac{W + M}{2}$$

ELSE

calcular E e $f E$

IF $f E < f B$ **THEN**

trocar W com E

ELSE

trocar W com R

ENDIF

ENDIF

END {caso i}

BEGIN {caso i}

IF $f R < f W$ **THEN**

trocar W com R

$$\text{ou } C = \frac{R + M}{2} \text{ e } f C$$

IF $f C < f W$ **THEN**

trocar W com C

ELSE

calcular S e $f S$

trocar W com S

trocar G com M

ENDIF

END {caso ii}

3.3 – MÉTODOS GERAIS DE SOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE MÍNIMOS QUADRADOS

3.3.1 – A FORMULAÇÃO GERAL DE UM PROBLEMA DE MÍNIMOS QUADRADOS

O problema geral de mínimos quadrados pode ser apresentado na forma:

Dada uma função vetorial $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, com $m \geq n$, resolver o seguinte problema:

$$\mathbf{x}^* = \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} [F(\mathbf{x})], \quad (3.16)$$

sendo:

$$F(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m f_i(\mathbf{x})^2 = \frac{1}{2} \|\mathbf{f}(\mathbf{x})\|^2, \quad f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}. \quad (3.17)$$

Estes problemas podem ser resolvidos por métodos de otimização gerais, mas existem abordagens específicas que tornam a sua solução mais eficiente.

Admitindo f suficientemente diferenciável, a sua expansão de Taylor é dada por:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x} + \mathbf{h}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \mathbf{J}(\mathbf{x}) \mathbf{h} + O(\|\mathbf{h}\|^2), \quad (3.18)$$

sendo $\mathbf{J}(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a matriz jacobiano definida por:

$$J_{ij}(\mathbf{x}) = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(\mathbf{x}). \quad (3.19)$$

Usando a definição (3.17) para o funcional F , temos que a sua versão para o gradiente é dada por:

$$\nabla F(\mathbf{x}) = \mathbf{J}(\mathbf{x})^t \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad (3.20)$$

$$\text{com } \frac{\partial F}{\partial x_j}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m f_i(\mathbf{x}) \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(\mathbf{x}),$$

e a sua versão para a hessiano por:

$$\mathbf{H}(\mathbf{x}) = \mathbf{J}(\mathbf{x})^t \mathbf{J}(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m f_i(\mathbf{x}) \mathbf{H}_i(\mathbf{x}), \quad (3.21)$$

sendo $\mathbf{H}_i(\mathbf{x})$ a hessiana usual de cada componente f_i calculada em \mathbf{x} .

3.3.2. O CASO LINEAR E O MÉTODO DO SVD

O caso mais simples de problemas de mínimos quadrados é o caso linear e tem a forma:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}, \quad (3.22)$$

sendo \mathbf{A} uma matriz de ordem $m \times n$ e $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$. Temos que, neste caso:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}\|^2 = \frac{1}{2} (\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x})^t (\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}) \quad (3.23)$$

e que:

$$\nabla \mathbf{F}(\mathbf{x}) = -\mathbf{A}^t (\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}). \quad (3.24)$$

O ponto estacionário \mathbf{x}^* do problema ou a sua *estimativa*, como é conhecido na literatura, (3.16) é alcançado pela solução do sistema:

$$\mathbf{A}^t \mathbf{A} \mathbf{x}^* = \mathbf{A}^t \mathbf{b}. \quad (3.25)$$

Se a matriz $\mathbf{A}^t \mathbf{A}$ é inversível, (3.25) pode ser explicitado por:

$$\mathbf{x}^* = \left[\mathbf{A}^t \mathbf{A}^{-1} \mathbf{A}^t \right] \mathbf{b} \equiv \mathbf{A}^+ \mathbf{b}. \quad (3.26)$$

A matriz $\mathbf{A}^+ \equiv \left[\mathbf{A}^t \mathbf{A}^{-1} \mathbf{A}^t \right]$ é conhecida, na literatura, como a *pseudo-inversa* da matriz \mathbf{A} . No caso de \mathbf{A} inversível, ela coincide com a inversa de \mathbf{A} .

Uma outra alternativa de solução é utilizar a chamada *transformação ortogonal* que significa encontrar uma matriz ortogonal \mathbf{Q} que transforma o sistema (3.25) no sistema equivalente:

$$\mathbf{Q}^t \mathbf{A} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} \mathbf{R} \\ 0 \end{bmatrix} \mathbf{b}, \quad (3.27)$$

sendo \mathbf{R} uma matriz triangular superior $n \times n$. Estas transformações são conhecidas como *transformações de Household* e o sistema (3.27) pode facilmente ser resolvido por substituições regressivas.

Entretanto, o método da *decomposição em valores singulares (SVD)* parece ser o mais utilizado para a solução do sistema (3.25). O método consiste em decompor a matriz \mathbf{A} na forma:

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \mathbf{S} \mathbf{V}^t, \quad (3.28)$$

sendo \mathbf{U} e \mathbf{V} matrizes ortogonais de ordens m e n , respectivamente, e

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \sigma_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sigma_n \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \text{ com } \sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_p > \sigma_{p+1} = \cdots = \sigma_n = 0. \text{ Cada } \sigma_i \text{ é conhecido}$$

como um valor singular de \mathbf{A} e corresponde, na verdade, a um auto-valor da matriz $\mathbf{A}^t \mathbf{A}$. A expressão (3.28) constitui a chamada *decomposição SVD* da matriz \mathbf{A} . O número p define o *posto* da matriz \mathbf{A} e corresponde à dimensão do subspaço do \mathbb{R}^n gerado pelas colunas de \mathbf{A} .

As propriedades de ortogonalidade das matrizes \mathbf{U} $u_i u_j = \delta_{ij}$ e \mathbf{V} $v_i v_j = \delta_{ij}$ e o carácter diagonal de \mathbf{S} permitem re-escrever a matriz \mathbf{A} na forma:

$$\mathbf{A} = \sum_{j=1}^p \sigma_j \mathbf{u}_j \mathbf{v}_j^t, \quad (3.29)$$

sendo \mathbf{u}_j e \mathbf{v}_j as j -ésimas colunas de \mathbf{U} e \mathbf{V} , respectivamente. Daí, têm-se que:

$$\mathbf{A} \mathbf{v}_j = \sigma_j \mathbf{u}_j, \quad j=1, \dots, p. \quad (3.30)$$

Por outro lado:

$$\mathbf{b} = \sum_{j=1}^m \beta_j \mathbf{u}_j; \quad \mathbf{x} = \sum_{j=1}^n \xi_j \mathbf{v}_j \equiv \sum_{j=1}^p \xi_j \mathbf{v}_j + \sum_{j=p+1}^n \xi_j \mathbf{v}_j, \quad (3.31)$$

que substituídas em (3.22) determinam:

$$\mathbf{f} \quad \mathbf{x} = \mathbf{b} - \mathbf{Ax} = \sum_{j=1}^p \beta_j - \sigma_j \zeta_j \mathbf{u}_j + \sum_{j=p+1}^n \beta_j \mathbf{u}_j. \quad (3.32)$$

Portanto,

$$F \quad \mathbf{x} = \frac{1}{2} \|\mathbf{b} - \mathbf{Ax}\|^2 = \sum_{j=1}^p \beta_j - \sigma_j \zeta_j^2 + \sum_{j=p+1}^n \beta_j^2, \quad (3.33)$$

que, naturalmente, vai atingir o seu valor mínimo se e somente se:

$$\beta_j - \sigma_j \zeta_j = 0 \Rightarrow \zeta_j = \frac{\beta_j}{\sigma_j}, \quad j=1, \dots, p. \quad (3.34)$$

Logo, a estimativa do problema fica sendo:

$$\mathbf{x}^* = \sum_{j=1}^p \frac{\beta_j}{\sigma_j} \mathbf{v}_j + \sum_{j=p+1}^n \zeta_j \mathbf{v}_j. \quad (3.35)$$

Observar que, se $p < n$, a solução do problema é extremamente ambígua, uma vez que os coeficientes $\zeta_j, j = p+1, \dots, n$ são arbitrários. No caso particular de

$\zeta_j = 0, j = p+1, \dots, n$, a solução $\mathbf{x}^* = \sum_{j=1}^p \frac{\beta_j}{\sigma_j} \mathbf{v}_j$ é conhecida como *solução de norma*

mínima.

O método do SVD, apesar de muito popular, apresenta alguns problemas na sua implementação. Em primeiro lugar, é um método que exige grande esforço computacional para a obtenção dos valores singulares e das matrizes \mathbf{U} e \mathbf{V} . Por outro lado, é extremamente instável quando em presença de valores singulares muito pequenos. Uma alternativa para se obter soluções, neste caso, é cortar do espectro os valores singulares que se considera abaixo de um limite de tolerância. Não existe um critério seguro para a determinação deste limite de corte, ficando o mesmo ao gosto do usuário.

3.3.3. O CASO NÃO LINEAR E O MÉTODO DE GAUSS-NEWTON

O método de Newton, descrito no Algoritmo 3.3, pode ser adaptado a problemas de mínimos quadrados, ajustando-se, naturalmente, os ingredientes especificados na seção 3.3.1 para os termos descritos no citado Algoritmo. Abaixo, um Algoritmo do Método de Gauss – Newton, conforme Madsen et al (2004):

Algoritmo 3.3. Método de Gauss - Newton

```
begin  
   $k:=1; \quad \mathbf{x} := \mathbf{x}_0; \quad found:=false$   
  while (not found) and ( $k < k_{max}$ )  
    solve  $\begin{bmatrix} \mathbf{J} & \mathbf{x}^t \mathbf{J} \end{bmatrix} \mathbf{h}_{gn} = -\mathbf{J} \mathbf{x}^t \mathbf{f} \mathbf{x}$   
    if (no such  $\mathbf{h}_{gn}$  exists)  
      found:=true  
    else  
       $\mathbf{x}:=\mathbf{x} + \mathbf{h}_{gn}; \quad k:=k+1$   
  end
```

Além das dificuldades apontadas na seção 3.3.1, um outro problema que acontece com o método de Gauss-Newton é quando cada função f_j apresenta curvatura suave na vizinhança de \mathbf{x}^* ou $\|f_j \mathbf{x}^*\|$ é muito pequeno. Nestes casos, a convergência deixa de ser quadrática e torna-se linear, tornando o processo iterativo indesejavelmente lento.

3.3.4. O CASO NÃO LINEAR E O MÉTODO DE LEVENBERG – MARQUARDT

Diante das dificuldades do método de Gauss – Newton, Levenberg (1944) e posteriormente Marquardt (1963) sugeriram a introdução de uma perturbação no operador $\mathbf{J}^t \mathbf{J}$ de forma a tornar o método mais estável, procedimento conhecido na literatura como parâmetro de regularização. O termo $\begin{bmatrix} \mathbf{J} & \mathbf{x}^t \mathbf{J} \end{bmatrix} \mathbf{h}_{gn} = -\mathbf{J} \mathbf{x}^t \mathbf{f} \mathbf{x}$ do Algoritmo 3.3 é modificado para:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{J} & \mathbf{x}^t \mathbf{J} \end{bmatrix} \mathbf{h}_{lm} = -\mathbf{J} \mathbf{x}^t \mathbf{f} \mathbf{x} + \mu \mathbf{I} \quad (3.36)$$

sendo μ um termo de “dumping” que controla o comportamento de $\mathbf{J} \mathbf{x}^t \mathbf{J} \mathbf{x} + \mu \mathbf{I}$

de acordo com a sua magnitude:

- 1) para $\mu > 0$, a matriz acima é positiva definida, o que torna \mathbf{h}_{lm} uma direção de descida.
- 2) para valores de μ suficientemente grandes pode-se tomar $\mathbf{h}_{lm} \cong -\frac{1}{\mu} \mathbf{J}^t \mathbf{f}(\mathbf{x})$, o que torna \mathbf{h}_{lm} a direção de descida do método do gradiente, que é adequado no início do processo.
- 3) para valores de μ suficientemente pequenos, $\mathbf{h}_{lm} \cong \mathbf{h}_{gn}$, o que torna \mathbf{h}_{lm} uma direção de descida do método de Gauss – Newton, que é adequado para o final da iteração, isto é, quando \mathbf{x}_k está próximo da solução \mathbf{x}^* .

O método assim descrito é conhecido como *método de Levenberg - Marquardt* e constitui, na verdade, um método adaptativo, que viaja entre o método do gradiente e de Gauss – Newton, de acordo com o comportamento corrente do algoritmo. A escolha do parâmetro de “dumping” inicial μ_0 vai depender da magnitude dos elementos da matriz inicial $\mathbf{B} = \mathbf{J}^t(\mathbf{x}_0) \mathbf{J}(\mathbf{x}_0)$ e é calculado por:

$$\mu_0 = \tau \max_i b_{ii}^{(0)}, \quad (3.37)$$

sendo τ é escolhido pelo usuário, que pode ser tomado como $\tau = 10^{-6}$, por exemplo, se \mathbf{x}_0 for considerada uma boa aproximação da solução. Noutras situações usar $\tau = 10^{-3}$ ou mesmo $\tau = 1$.

Para efeitos computacionais, é introduzido em cada passo o parâmetro:

$$\rho = \frac{2 \left[\mathbf{F}(\mathbf{x}) - \mathbf{F}(\mathbf{x} + \mathbf{h}_{lm}) \right]}{\mathbf{h}_{lm}^t \left[\mu \mathbf{h}_{lm} - \mathbf{J}^t(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \right]}, \quad (3.37)$$

conhecido como *razão de ganho* e que serve para controlar o comportamento de μ durante as iterações. Para valores suficientemente grandes de ρ deve-se diminuir μ passando-se do estágio de Levenberg – Marquardt para o estágio de Gauss – Newton. Para valores suficientemente pequenos de ρ deve-se duplicar o valor de μ para se passar para o estágio do método do gradiente, reduzindo-se naturalmente o valor de α .

As estratégias para estes procedimentos variam, mas existem formas padrões que são recomendadas para o usuário (Madsen, et al, 2004).

Como todo processo iterativo que se preze, o método de Levenberg – Marquardt também apresenta seu critério de parada. O mais simples é dado por:

$$\sup_x \left\| \mathbf{J} \mathbf{x}^t \mathbf{f} \mathbf{x} \right\| < \varepsilon, \quad (3.38)$$

e outro, mais sofisticado, dado por:

$$\left\| \mathbf{x}_{atual} - \mathbf{x}_{anterior} \right\| \leq \varepsilon \left\| \mathbf{x}_{anterior} \right\| + \varepsilon, \quad (3.39)$$

sendo ε uma tolerância escolhida pelo usuário. Por outro lado, é também estabelecido um critério de parada com relação ao número de iterações desejável. Sendo k_{max} este número, que é escolhido pelo usuário, o k -ésimo passo do método deve obedecer $k \leq k_{max}$. Abaixo, um Algoritmo do Método de Gauss – Newton, conforme Madsen et al (2004):

Algoritmo 3.3. Método de Levenberg – Marquardt

else

$$\mathbf{x}_{new} := \mathbf{x} + \mathbf{h}_{lm}$$

$$\rho := \frac{2 \left[F \mathbf{x} - F \mathbf{x}_{new} \right]}{\mathbf{h}_{lm}^t \left[\mu \mathbf{h}_{lm} - \mathbf{J} \mathbf{x}^t \mathbf{f} \mathbf{x} \right]}$$

if $\rho > 0$

$$\mathbf{x} := \mathbf{x}_{new}$$

$$\mathbf{B} := \mathbf{J} \mathbf{x}^t \mathbf{J} \mathbf{x}; \quad \mathbf{g} := \mathbf{J} \mathbf{x}^t \mathbf{f} \mathbf{x}$$

$$found := \left\| \mathbf{g} \right\|_{\infty} \leq \varepsilon_1$$

$$\mu := \mu \max \left\{ \frac{1}{3}, 1 - 2\rho^{-1} \right\}; \quad v = 2$$

else

$$\mu := \mu v; \quad v := 2v$$

end

begin

$k := 1; \quad v := 2; \quad \mathbf{x} := \mathbf{x}_0$

$\mathbf{B} := \mathbf{J} \mathbf{x}^t \mathbf{J} \mathbf{x}; \quad \mathbf{g} := \mathbf{J} \mathbf{x}^t \mathbf{f} \mathbf{x}$

$found := \|\mathbf{g}\|_\infty \leq \varepsilon_1; \quad \mu := \tau \max b_{ii}$

while (**not** found) **and** ($k < k_{max}$)

$k := k + 1; \quad \text{solve } \mathbf{B} + \mu \mathbf{I} \mathbf{h}_{lm} = -\mathbf{g}$

if $\|\mathbf{h}_{lm}\| \leq \varepsilon_2 \|\mathbf{x}\| + \varepsilon_2$

$found := \text{true}$

else

$\mathbf{x}_{new} := \mathbf{x} + \mathbf{h}_{lm}$

$$\rho := \frac{2 \left[\mathbf{F} \mathbf{x} - \mathbf{F} \mathbf{x}_{new} \right]}{\mathbf{h}_{lm}^t \left[\mu \mathbf{h}_{lm} - \mathbf{J} \mathbf{x}^t \mathbf{f} \mathbf{x} \right]}$$

if $\rho > 0$

$\mathbf{x} := \mathbf{x}_{new}$

$\mathbf{B} := \mathbf{J} \mathbf{x}^t \mathbf{J} \mathbf{x}; \quad \mathbf{g} := \mathbf{J} \mathbf{x}^t \mathbf{f} \mathbf{x}$

$found := \|\mathbf{g}\|_\infty \leq \varepsilon_1$

$\mu := \mu \max \left\{ \frac{1}{3}, 1 - \rho^{1/3} \right\}; \quad v = 2$

else

$\mu := \mu v; \quad v := 2v$

end

O método de Levenberg – Marquardt pode ser combinado com outros métodos produzindo diferentes métodos híbridos. Madsen (1968) apresentou um método híbrido que combina o método de Levenberg – Marquardt com um método Quasi – Newton que apresenta convergência superlinear, mesmo quando $\mathbf{F} \mathbf{x}^* \neq 0$. Tais processos podem ser alternativas interessantes, quando os problemas inerentes aos métodos de Levenberg –Marquardt e de Gauss – Newton acontecem.

3.4 - CONSIDERAÇÕES FINAIS

Nesta seção foi apresentada uma visão geral dos principais métodos aplicados a problemas de otimização global ou local. Estes métodos podem ser divididos em dois grupos principais:

- (1) aqueles dependentes do cálculo, cuja aplicação exige, em geral, o cálculo de múltiplas derivadas das funções custo. As dificuldades maiores destes métodos são o seu caráter local, a necessidade do cálculo de derivadas e outras avaliações em cada passo do método e o seu comportamento lento quando em presença de funções extremamente suaves na vizinhança do extremante;
- (2) aqueles que não dependem do cálculo e que possuem características estocásticas. Estes métodos são baseados em buscas aleatórias no espaço de busca do problema e, essencialmente, se baseiam na comparação dos valores da função-custo avaliada nos pontos selecionados. Dois tipos métodos se sobressaem nesta categoria: (a) os métodos de algoritmo genético, cuja busca se baseia nos princípios básicos da seleção natural de Darwin ou da Genética e (b) o método de Nelder – Mead, que se baseia no cálculo de otimização da função-custo restrita aos vértices de um simplex de dimensão n .

4 – EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

4.1 – CONSIDERAÇÕES INICIAIS

O objetivo da inversão de dados de AVO é estimar os contrastes elásticos a partir dos dados obtidos na exploração sísmica. É uma técnica muito utilizada na prospecção pela potencialidade de identificar a litologia bem como avaliar o conteúdo e a saturação de fluidos presentes na formação (Kabir et al, 2000; Regueira & Pena, *apud* Castagna, 2001).

Nos testes a serem aplicados serão usados dados sintéticos das amplitudes da onda refletida obtidos a partir de (2.39), sem ruídos e representadas por $R_{PP}^{(obs)}$. O método a ser aplicado é dos mínimos quadrados, considerando-se apenas modelos linearizados. Os experimentos serão aplicados em dois modelos distintos: (a) um, com baixos contrastes e (b) outro com contrastes moderados.

4.2 – FORMULAÇÃO MATEMÁTICA GERAL DO PROBLEMA DE INVERSÃO DE DADOS DE AVO

No geral, a inversão de dados de AVO consiste em estimar o vetor de parâmetros $\delta \mathbf{p} = \delta \rho, \delta z, \delta \mu^t$ a partir de dados sintéticos $R_{PP}^{(obs)}$ e $R_{SP}^{(obs)}$, resolvendo um dos seguintes problemas de mínimos quadrados:

(a) casos linearizados:

(a.1) apenas dados de $R_{PP}^{(obs)}$:

$$\min_{\delta \mathbf{p}} \sum_{k=1}^N \left| R_{PP}^{(obs)} \theta_k - m \theta_k^t \delta \mathbf{p} \right|^2$$

(a.2) apenas dados de $R_{SP}^{(obs)}$:

$$\min_{\delta \mathbf{p}} \sum_{k=1}^N \left| R_{SP}^{(obs)} \theta_k - n \theta_k^t \delta \mathbf{p} \right|^2$$

(a.3) dados combinados de $R_{PP}^{(obs)}$ e $R_{SP}^{(obs)}$:

$$\min_{\delta \mathbf{p}} \left\{ \sum_{k=1}^N \left| R_{PP}^{(obs)} \theta_k - \mathbf{m} \theta_k^t \delta \mathbf{p} \right|^2 + \sum_{k=1}^N \left| R_{SP}^{(obs)} \theta_k - \mathbf{n} \theta_k^t \delta \mathbf{p} \right|^2 \right\}.$$

sendo $\mathbf{m}(\theta_k)$ e $\mathbf{n}(\theta_k)$ os vetores definidos em (2.47) e (2.48), respectivamente, e calculados em cada ângulo de incidência θ_k , $k=1, \dots, N_{obs}$, com N_{obs} representando o número de observações.

(b) casos quadráticos:

(b.1) apenas dados de $R_{PP}^{(obs)}$:

$$\min_{\delta \mathbf{p}} \sum_{k=1}^N \left| R_{PP}^{(obs)} \theta_k - \mathbf{m} \theta_k^t \delta \mathbf{p} - \delta \mathbf{p}^t \mathbf{M} \theta_k \delta \mathbf{p} \right|^2$$

(b.2) apenas dados de $R_{SP}^{(obs)}$:

$$\min_{\delta \mathbf{p}} \sum_{k=1}^N \left| R_{SP}^{(obs)} \theta_k - \mathbf{n} \theta_k^t \delta \mathbf{p} - \delta \mathbf{p}^t \mathbf{N} \theta_k \delta \mathbf{p} \right|^2$$

(b.3) dados combinados de $R_{PP}^{(obs)}$ e $R_{SP}^{(obs)}$:

$$\min_{\delta \mathbf{p}} \sum_{k=1}^N \left(\left| R_{PP}^{(obs)} \theta_k - \mathbf{m} \theta_k^t \delta \mathbf{p} - \delta \mathbf{p}^t \mathbf{M} \theta_k \delta \mathbf{p} \right|^2 + \left| R_{SP}^{(obs)} \theta_k - \mathbf{n} \theta_k^t \delta \mathbf{p} - \delta \mathbf{p}^t \mathbf{N} \theta_k \delta \mathbf{p} \right|^2 \right),$$

sendo $\mathbf{M}(\theta_k)$ e $\mathbf{N}(\theta_k)$ as matrizes definidas em (2.48) e (2.49), respectivamente.

Obsevar que os problema (a.1) e (b.1) levam em conta apenas os dados das amplitudes $R_{PP}^{(obs)}$, os problemas (a.2) e (b.2) apenas os dados das amplitudes $R_{SP}^{(obs)}$ e os problemas (a.3) e (b.3) os dados $R_{PP}^{(obs)}$ e $R_{SP}^{(obs)}$ combinados. A idéia de se considerar os três casos é investigar o comportamento dos procedimentos de inversão quanto às questões de robustez e estabilidade. Como já referenciado, neste trabalho serão usados apenas dados $R_{PP}^{(obs)}$.

4.3 – MODELOS USADOS NOS EXPERIMENTO

Neste trabalho serão considerados dois modelos, um apresentando baixos contrastes, e outro com contrastes moderados. As Tabelas 4.1 e 4.2 abaixo apresentam os parâmetros físicos que definem os modelos, bem como os seus respectivos contrastes. Em cada modelo o primeiro material corresponde aos parâmetros do meio incidente e o segundo aos parâmetros do meio subjacente.:

Tabela 4.1 Parâmetros físicos para o cálculo das amplitudes dos coeficientes de reflexão e de sua convertida

Modelos	Material	ρ (g/cm ³)	α (m/s)	β (m/s)
Modelo 1	Folhelho	2,20	3270	1650
	Arenito com gás	2,05	3040	2050
Modelo 2	Anidrito	2,95	6095	3770
	Arenito	2,65	3780	2360

Tabela 4.2 Contrastes médios dos modelos apresentados na Tabela 4.1

Modelos	$\kappa = \bar{\alpha}/\bar{\beta}$	$\bar{\delta\rho}$	$\bar{\delta z} = \bar{\delta\rho} + \bar{\delta\alpha}$	$\bar{\delta\mu} = \bar{\delta\rho} + 2\bar{\delta\beta}$
Modelo 1	0,5864	-0,0353	-0,0717	0,1809
Modelo 2	0,6208	-0,0536	-0,2880	-0,5136

O Modelo 1 é um dos tipos mais comuns de contato de interfaces de rochas selante/reservatório tendo muitas ocorrências em depósitos de turbiditos e seus dados foram retirados de Drufuca & Mazzotti (1995). Já o Modelo 2 apresenta como meio incidente um anidrito, que é uma das melhores rochas selantes, constituindo-se num bom exemplo de rochas selante/reservatório. Seus dados foram retirados de Wang (1999).

4.4 – REGIÕES DE AMBIGUIDADE DOS MODELOS ESTUDADOS

Uma das principais questões pertinentes a problemas de inversão de dados de AVO é que eles são, em geral, mal-postos, devido principalmente ao seu alto grau de ambigüidade. Os gráficos abaixo ilustram, em 2D, as regiões de ambigüidade dos modelos em estudo e o ponto preto em cada imagem posiciona o valor exato dos parâmetros considerados. Como os problemas são 3D, a apresentação é feita fixando-se um dos parâmetros, deixando-se os outros dois livres:

QUADRO 1 – Curvas de contorno ilustrando a região de ambigüidade dos parâmetros de densidade e impedância ($\delta\rho \times \delta Z$) do Modelo 1 – caso linearizado

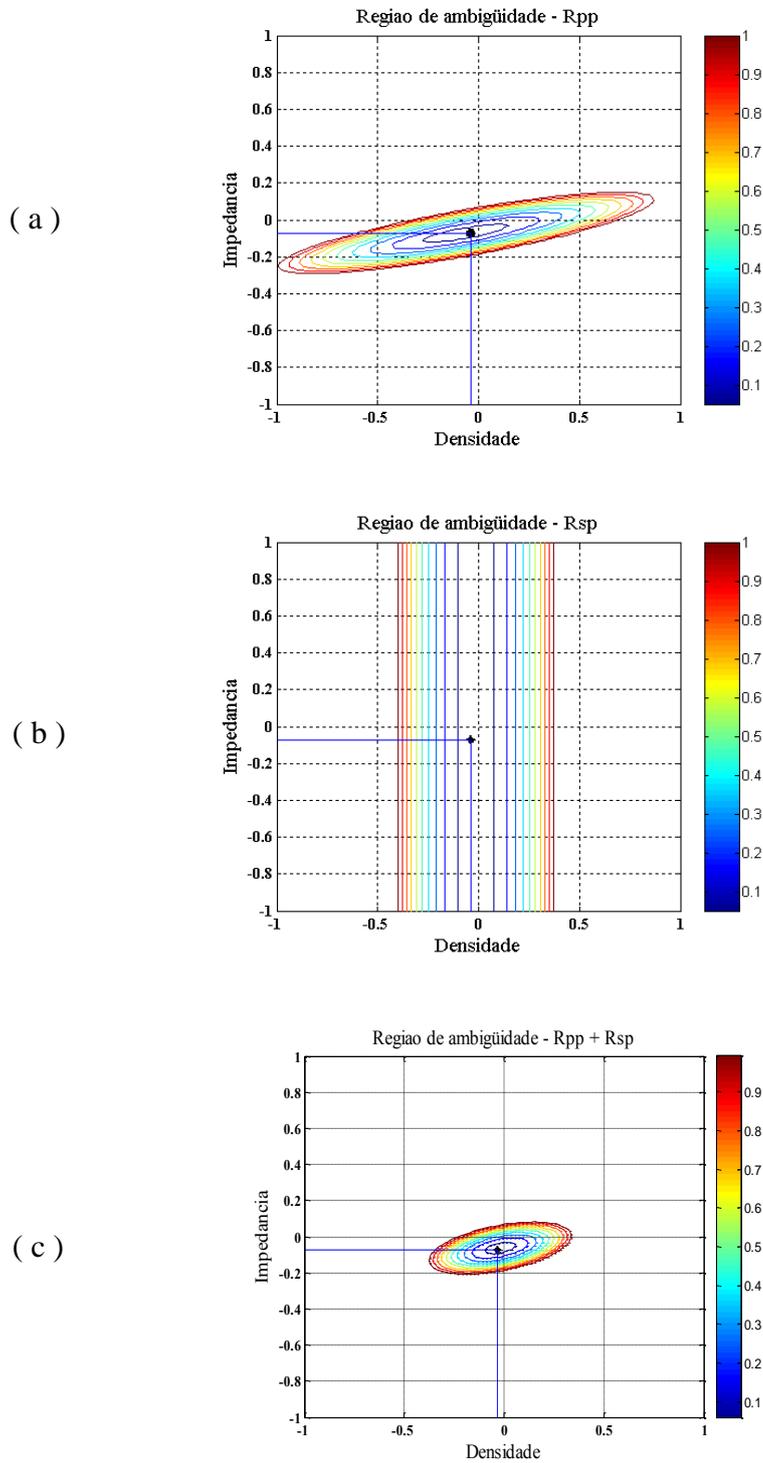


Figura 4.1 – Observa-se boa resolução do parâmetro δZ no caso R_{PP} (a), péssima no caso R_{SP} (b) e muito boa no caso combinado (c).

QUADRO 2 – Curvas de contorno ilustrando a região de ambigüidade dos parâmetros de densidade e cisalhamento ($\delta\rho \times \delta\mu$) do Modelo 1 – caso linearizado

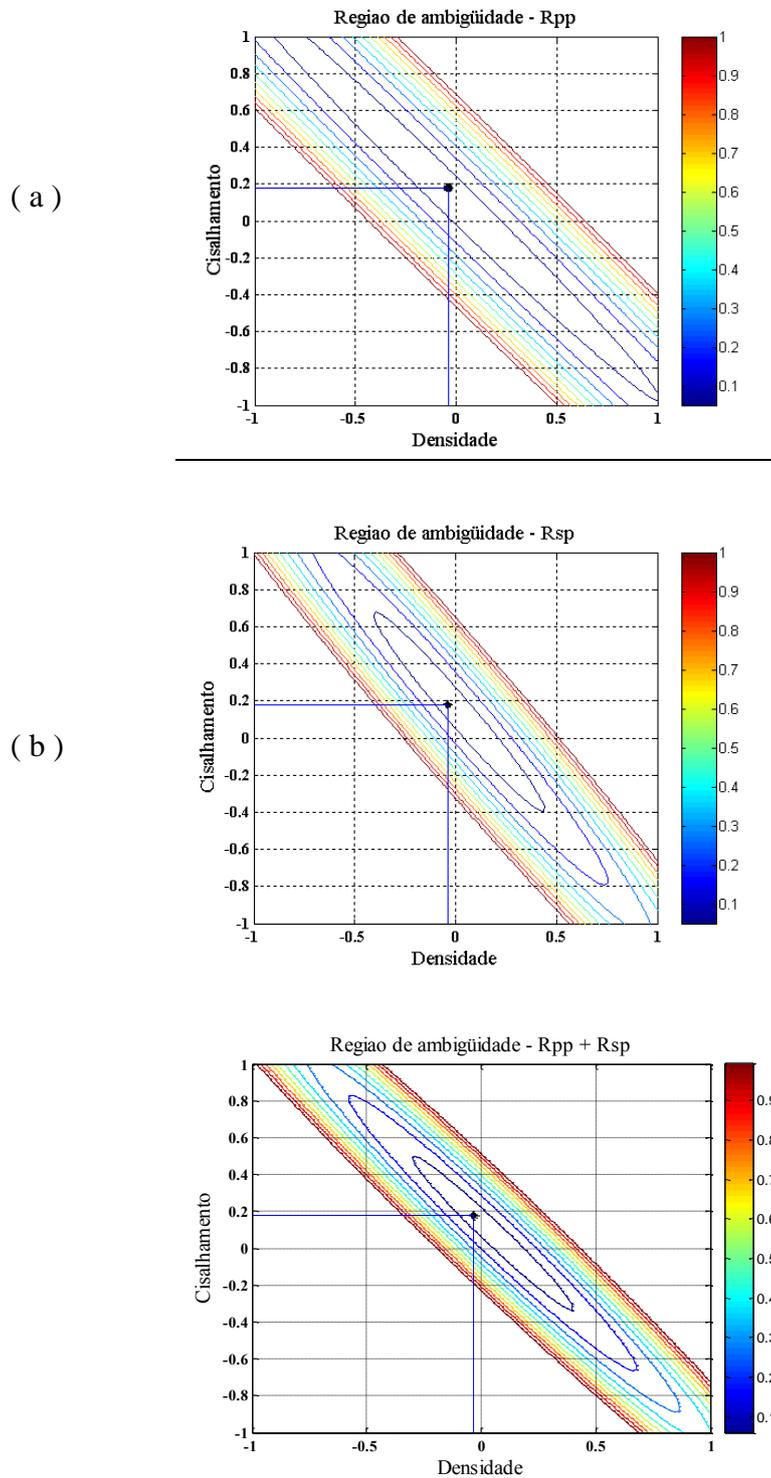


Figura 4.2 – Observa-se que os parâmetros $\delta\rho$ e $\delta\mu$ são mal resolvidos nos casos R_{PP} (a), R_{SP} (b) e combinado (c).

QUADRO 3 – Curvas de contorno ilustrando a região de ambiguidade dos parâmetros de impedância e cisalhamento ($\delta z \times \delta \mu$) do Modelo 1 – caso linearizado

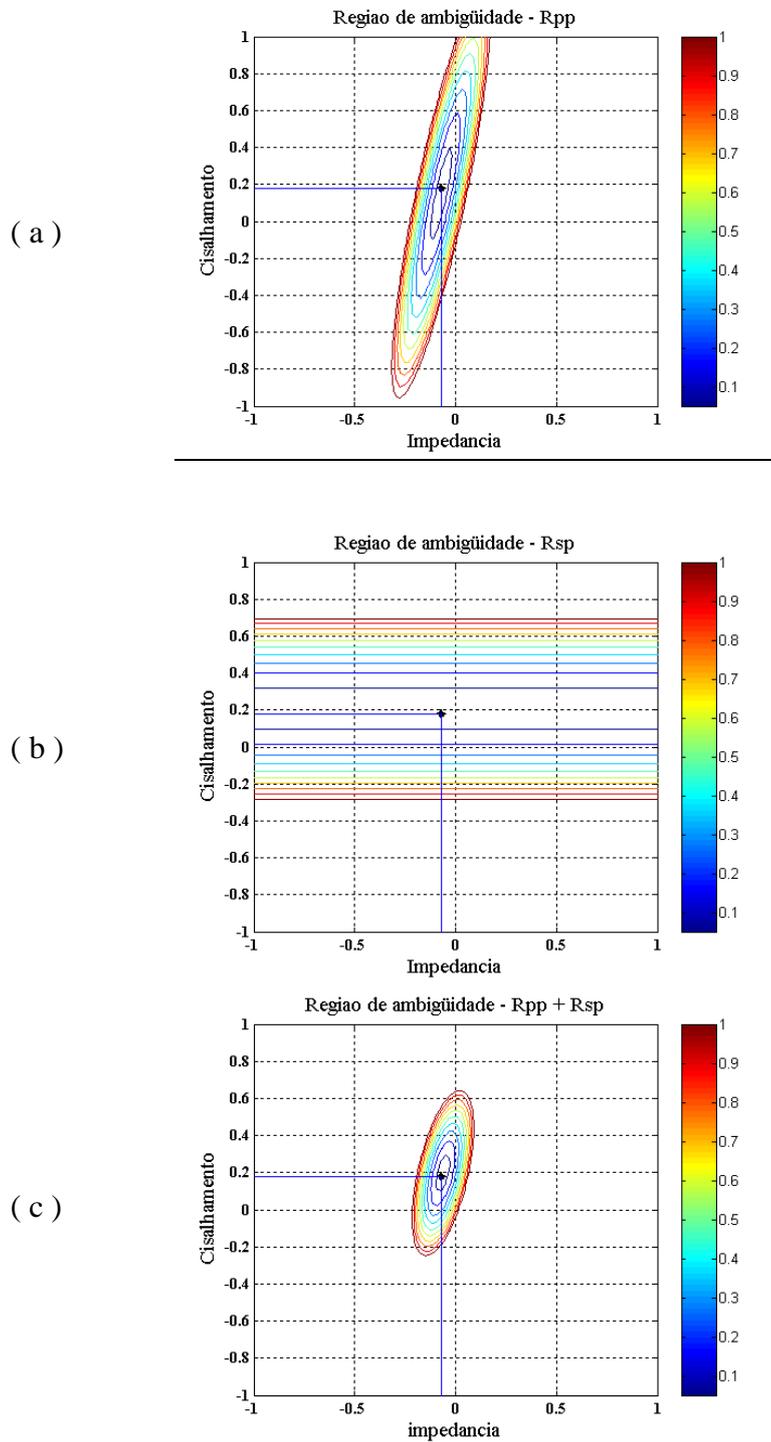


Figura 4.3 – Observa-se boa resolução do parâmetro δz no caso R_{PP} (a), péssima no caso R_{SP} (b) e muito boa no caso combinado (c) combinado.

QUADRO 4 – Curvas de contorno ilustrando a região de ambigüidade dos parâmetros de densidade e impedância do Modelo 1 – caso quadrático

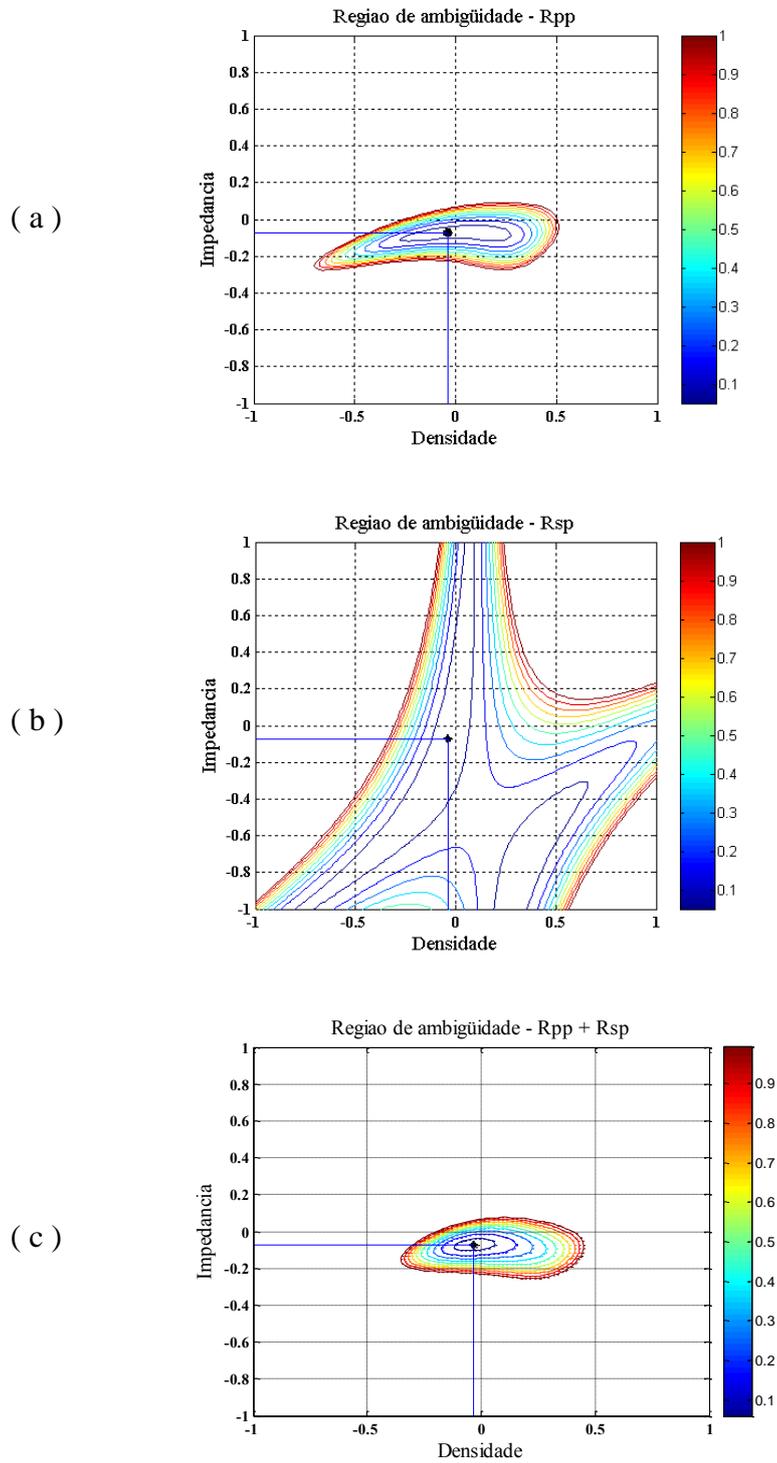


Figura 4.4 – Observa-se boa resolução do parâmetro z , Figura (a), e redução razoável na região de ambigüidade, Figura (c), caso combinado.

QUADRO 5 – Curvas de contorno ilustrando a região de ambigüidade dos parâmetros de densidade e cisalhamento do Modelo 1 – caso quadrático

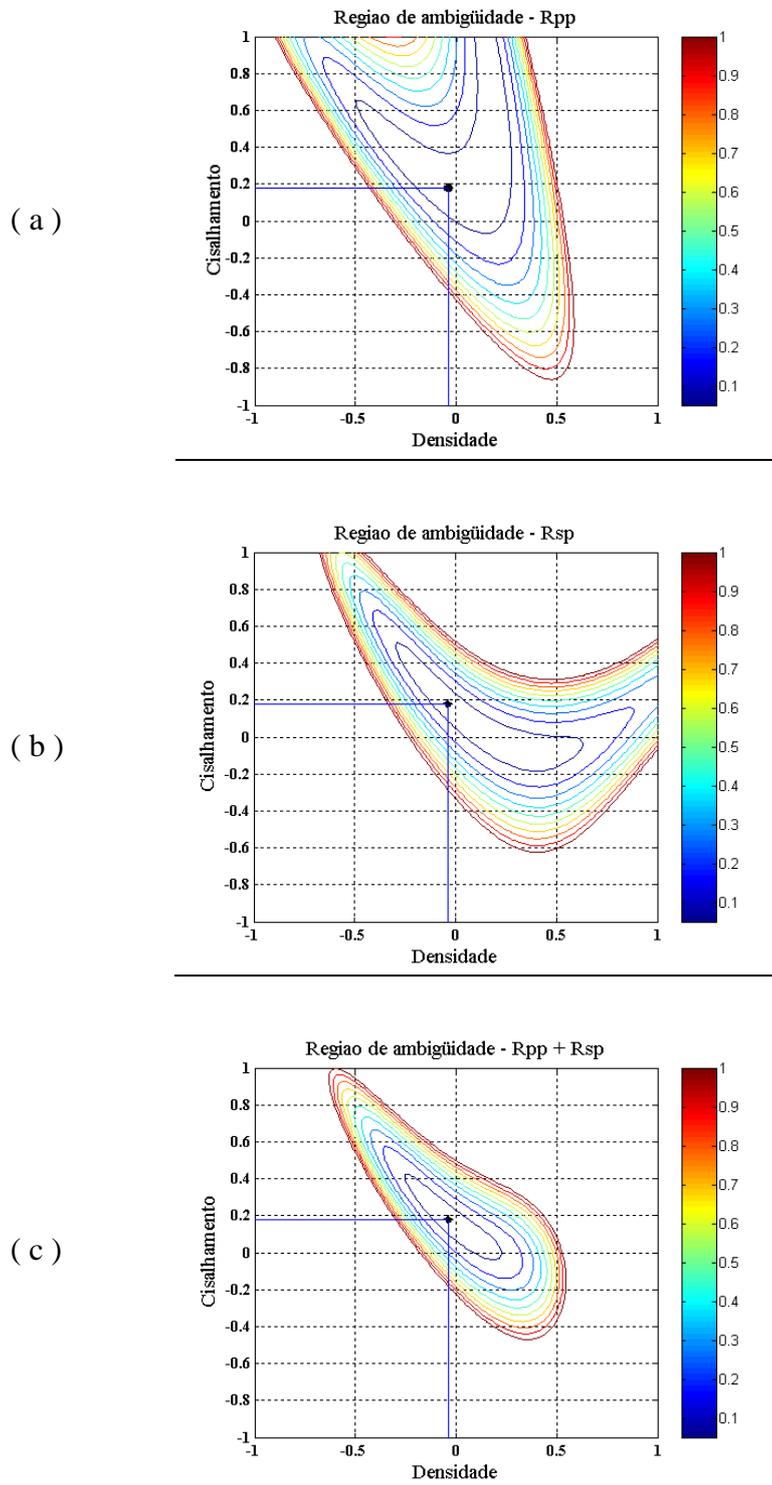


Figura 4.5 – Observa-se que todos os parâmetros são mal resolvidos, neste caso.

QUADRO 6 – Curvas de contorno ilustrando a região de ambigüidade dos parâmetros de impedância e cisalhamento do Modelo 1 – caso quadrático

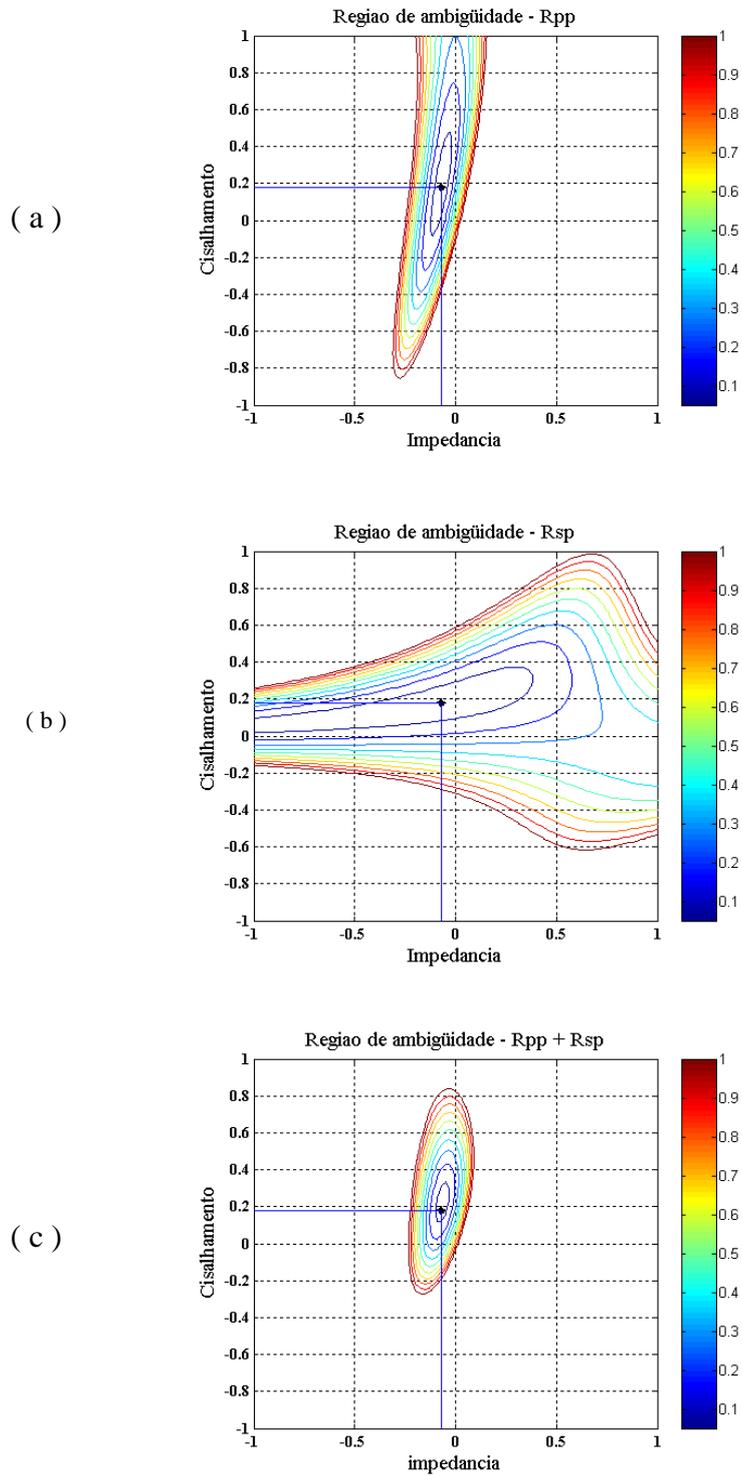


Figura 4.6 – Observa-se boa resolução do parâmetro z □ , Figura (a), e redução moderada na região de ambigüidade, Figura (c), no caso combinado.

QUADRO 7 – Curvas de contorno ilustrando a região de ambigüidade dos parâmetros de densidade e impedância do Modelo 2 – caso linearizado

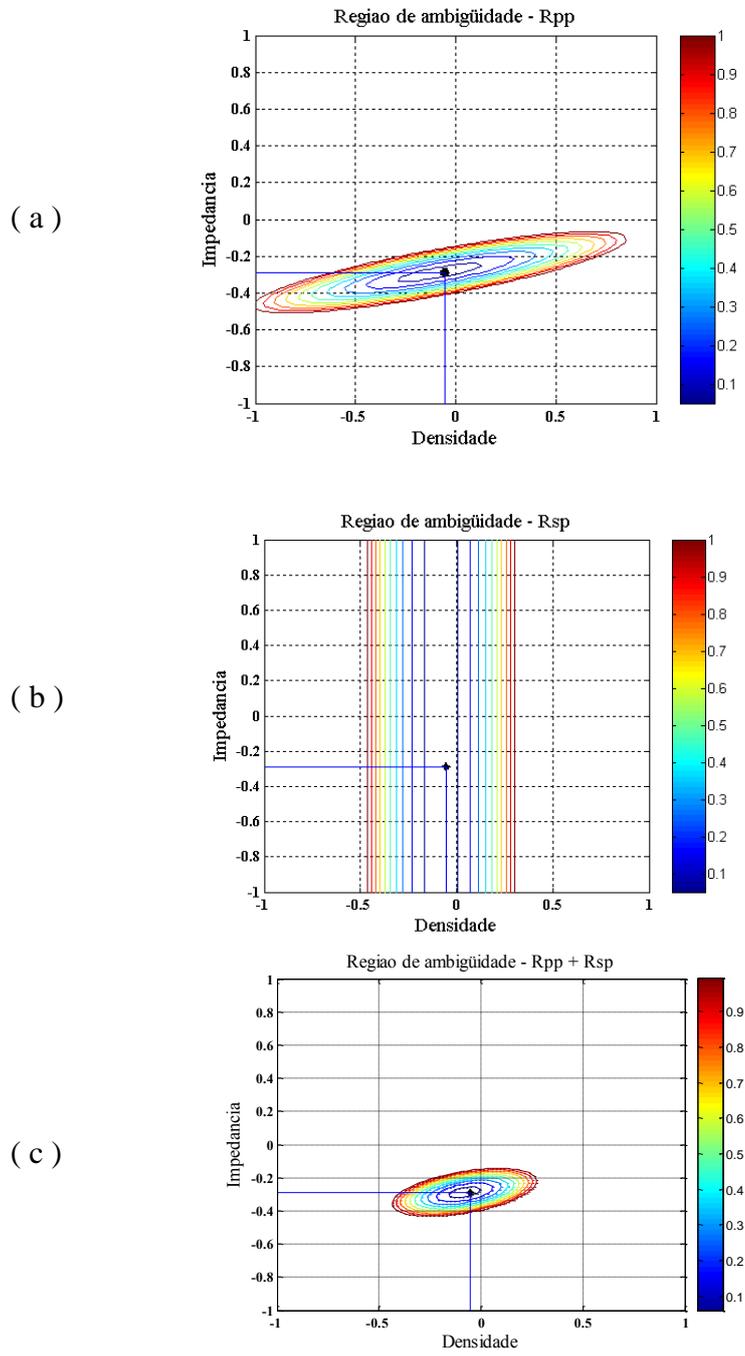


Figura 4.7 – Observa-se boa resolução do parâmetro z , Figura (a), e boa redução na região de ambigüidade, Figura (c), no caso combinado.

QUADRO 8 – Curvas de contorno ilustrando a região de ambigüidade dos parâmetros de densidade e cisalhamento do Modelo 2 – caso linearizado

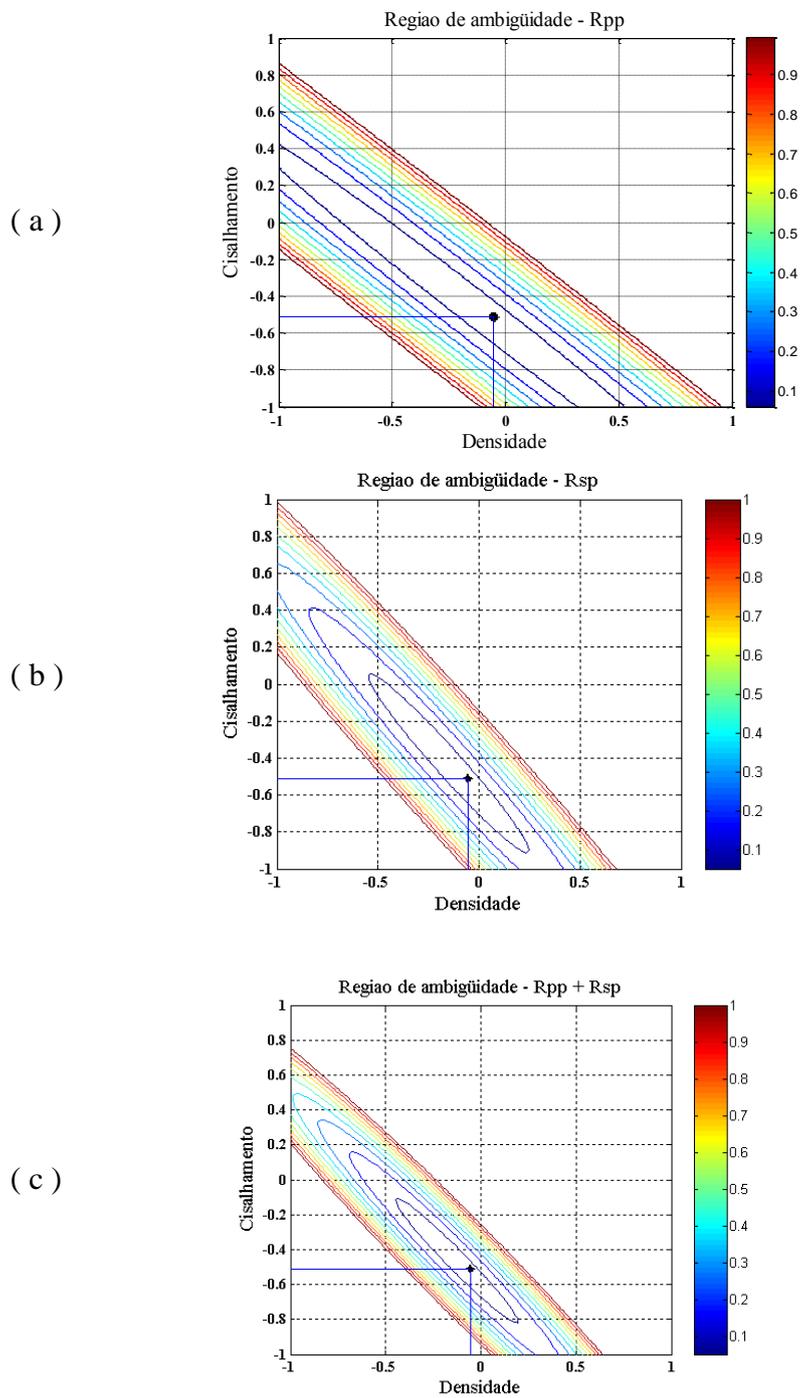


Figura 4.8 – Observa-se que todos os parâmetros são mal resolvidos neste caso.

QUADRO 9 – Curvas de contorno ilustrando a região de ambiguidade dos parâmetros de impedância e cisalhamento do Modelo 2 – caso linearizado

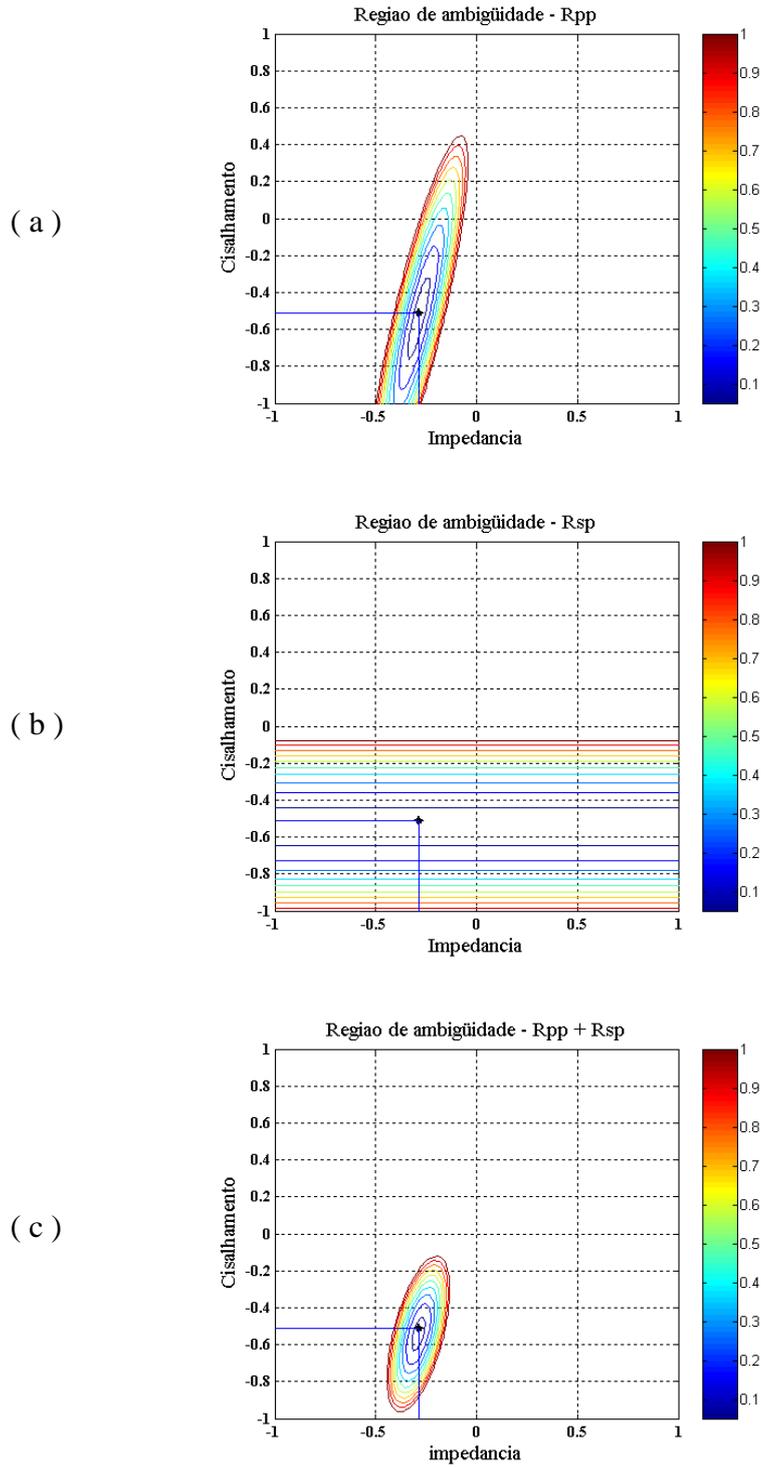


Figura 4.9 – Observa-se boa resolução do parâmetro z □ , Figura (a), e razoável redução na região de ambiguidade, Figura (c), no caso combinado.

QUADRO 10 – Curvas de contorno ilustrando a região de ambigüidade dos parâmetros de densidade e impedância do Modelo 2 – caso quadrático

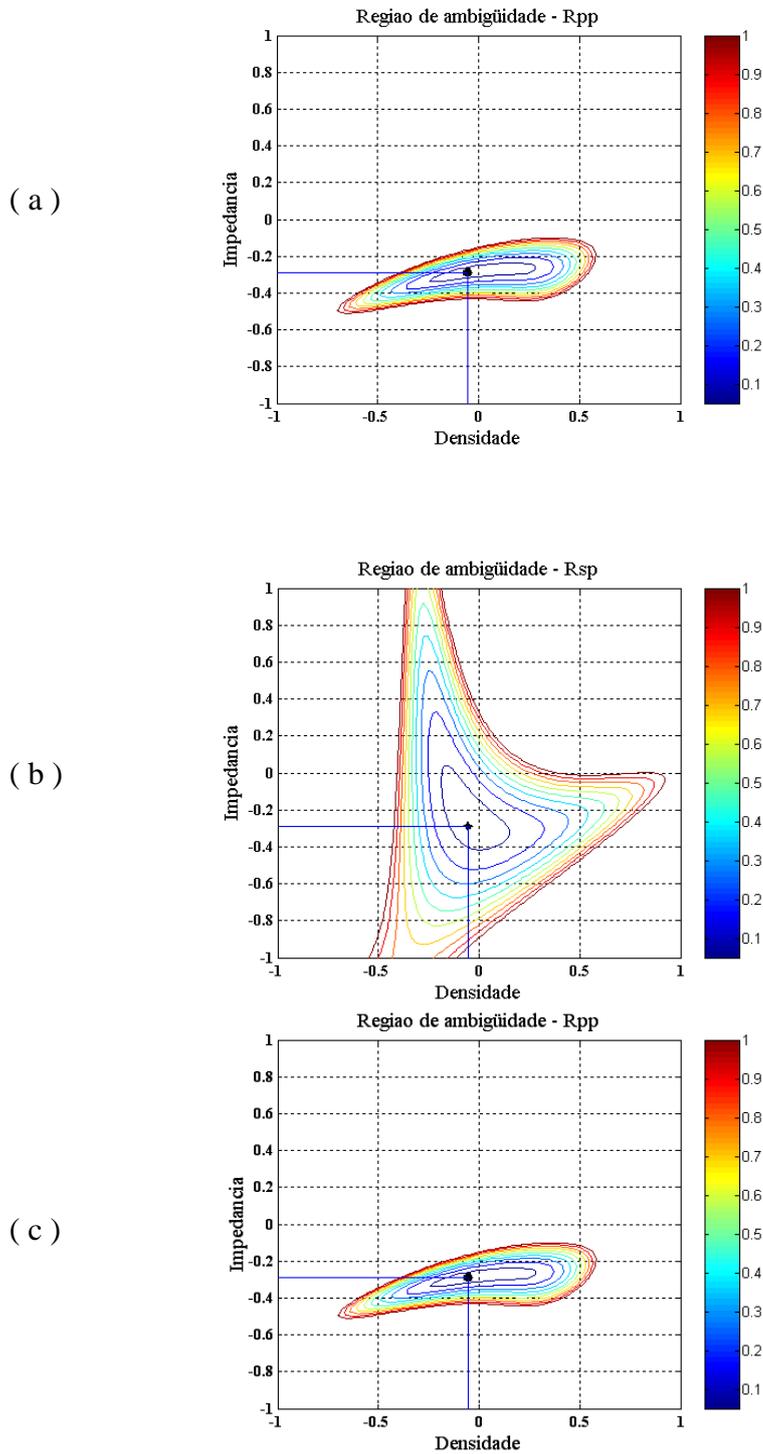


Figura 4.10 – Observa-se boa resolução do parâmetro z □ , Figura (a), e boa redução na região de ambigüidade, Figura (c), no caso combinado.

QUADRO 11 – Curvas de contorno ilustrando a região de ambiguidade dos parâmetros de densidade e cisalhamento do Modelo 2 – caso quadrático

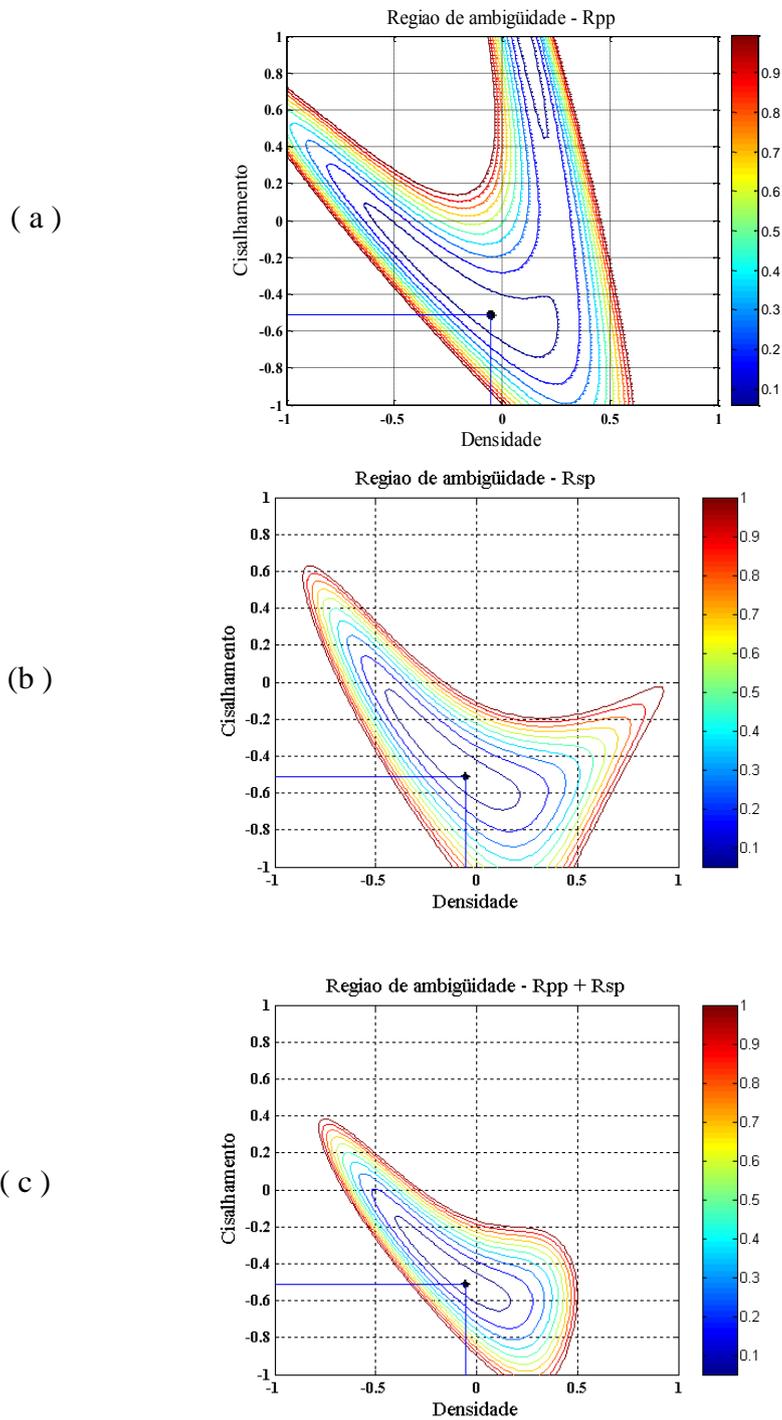


Figura 4.11 – Observa-se que todos os parâmetros são mal resolvidos, neste caso.

QUADRO 12 – Curvas de contorno ilustrando a região de ambigüidade dos parâmetros de impedância e cisalhamento do Modelo 2– caso quadrático

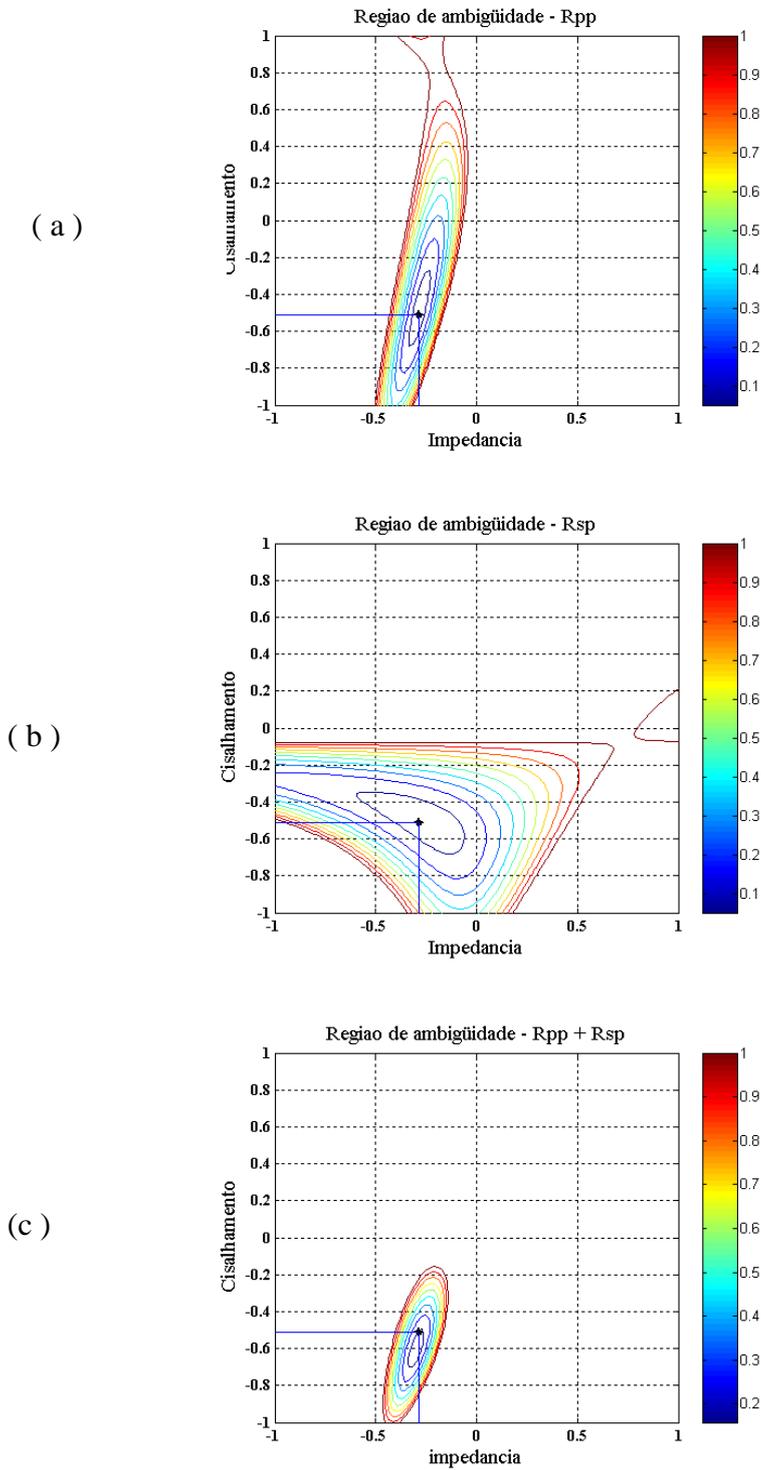


Figura 4.12 – Observa-se boa resolução do parâmetro $z \square$, Figura (a), e redução moderada na região de ambigüidade, Figura (c), no caso combinado.

4.5 – ESTIMATIVAS DE DADOS SINTÉTICOS DE AVO A UTILIZANDO-SE OS MÉTODOS DE NELDER-MEAD, LEVENBERG-MARQUARDT E ALGORITMO GENÉTICO

Para a estimativa dos parâmetros físicos dos modelos estipulados na proposta do trabalho, foram utilizados os seguintes programas, constantes do aplicativo MATLAB 7.0: *fminsearch(F, X, X₀, OPTIONS)*, *lsqnonlin(F_k, X, X₀, OPTIONS)* e *GA(@F, n, OPTIONSGA)*. O programa *fminsearch(F, X, X₀, OPTIONS)*, é um programa que determina o mínimo de uma função $F(X)$, dependente de uma multivariável X , definida em subconjuntos de algum multi-espço, com determinação inicial definida por X_0 . O comando *OPTIONS* define recursos especiais definidos pelo usuário do programa. Este programa faz uso do método de Nelder-Mead para estimar o ponto minimizante da função. Já o programa *lsqnonlin(F_k, X, X₀, OPTIONS)* é um programa que resolve especificamente problemas de mínimos quadrados não lineares, caracterizado por uma função vetorial $(F_1(x), \dots, F_n(X))$, dependente de uma multivariável X , definida em subconjuntos de algum multi-espço, com determinação inicial definida por X_0 . Como no caso anterior, o comando *OPTIONS* define recursos especiais definidos pelo usuário do programa. Este programa faz uso do método de Levenberg-Marquardt para estimar o ponto minimizante da função. Finalmente, *GA(@F, n, OPTIONSGA)* constitui um programa de Algoritmo Genético que busca determinar o minimizante de uma função F dependente de uma multivariável X , definida em subconjuntos de algum multi-espço de dimensão n . O comando *OPTIONSGA* define alguns atributos necessários para a efetiva aplicação do programa. O subprograma de trabalho que aplica o método é apresentado no Anexo A.

Os resultados obtidos pelos experimentos aplicados aos dois meios propostos no trabalho são apresentados a seguir. Para a sua obtenção tomou-se o cubo $C = -1,1 \times -1,1 \times -1,1$ de definição dos parâmetros dos modelos e procedeu-se uma partição uniforme com passo de .5 unidades em cada direção. Os pontos desta partição, num total de 125, foram tomados como pontos iniciais do modelo para aplicação dos métodos de Nelder-Mead e Levenberg-Marquardt. A idéia deste procedimento é avaliar a estabilidade dos dois métodos com relação aos pontos iniciais aplicados aos algoritmos. Esta mesma partição é utilizada para ao caso da aplicação do Algoritmo Genético, entretanto apenas como um contador, já que a escolha da população inicial deste algoritmo é feita de forma aleatória no interior do programa. Os valores estimados dos parâmetros físicos são calculados pelas média dos valores estimados em cada rodada dos programas.

1) Resultados correspondentes ao Modelo 1:

Os parâmetros estimados, neste caso, são apresentados na Tabela 4.3 e ilustrados nas Figuras 4.13, 4.14 e 4.15:

Tabela 4.3 – Tabela dos parâmetros físicos estimados no caso do Modelo 1

Modelo 1	$\delta\rho$ (densidade)	δz (impedância)	$\delta\mu$ (cisalhamento)
Nelder-Mead	-0,0318	-0,0716	0,1450
Levenberg-Marquardt	-0,0318	-0,0716	0,1450
Algoritmo Genético	-0,0278	-0,0717	0,1412
Exato	-0,0353	-0,0717	0,1809

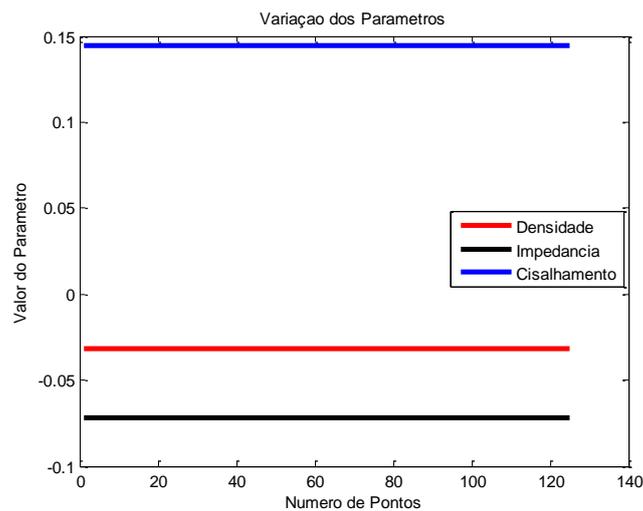


Figura 4.13 – A figura acima ilustra os parâmetros estimados pela aplicação do método de Nelder-Mead considerando-se o Modelo 1. Observar que o método é extremamente estável com relação à escolha do ponto inicial do processo.

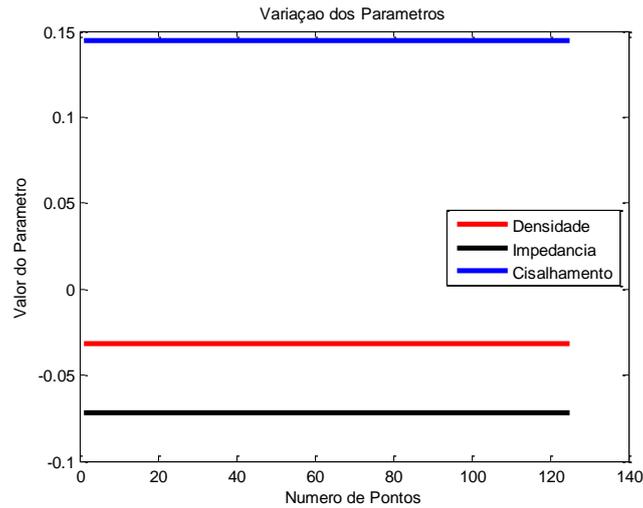


Figura 4.14 – A figura acima ilustra os parâmetros estimados pela aplicação do método de Levenberg-Marquardt considerando-se o Modelo 1. Observar que o método é extremamente estável com relação à escolha do ponto inicial do processo.

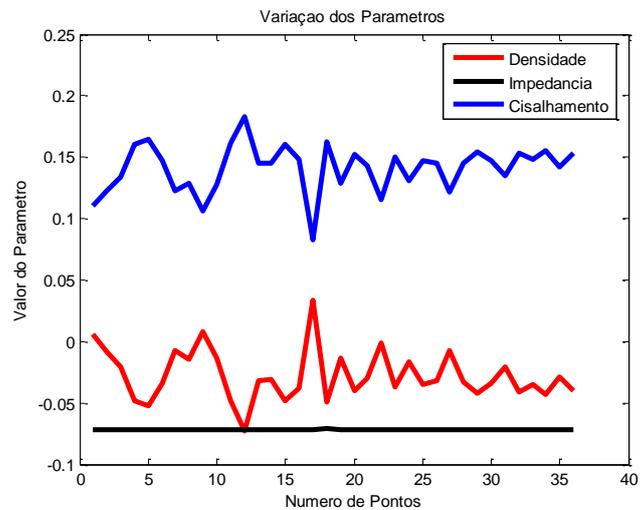


Figura 4.15 – A figura acima ilustra os parâmetros estimados pela aplicação do método de Algoritmo Genético, considerando-se o Modelo 1. Foram feitas 125 simulações do método e os resultados apresentaram grande variabilidade. Os valores dos parâmetros foram estimados pela média dos valores encontrados nas simulações.

4.5.1.-.ANÁLISE DOS RESULTADO OBTIDOS

Analisando os resultados obtidos nos procedimentos de inversão deste caso, observa-se, a partir das tabela de valores e dos gráficos apresentados, algumas feições bastante relevantes:

a) a extrema estabilidade alcançada na estimativa do parâmetro δz . Fisicamente, isto pode ser explicado pelo fato do experimento estar levando em consideração apenas dados sintéticos de ondas P incidentes. O parâmetro físico que controla o processo de reflexão de ondas P é exatamente o parâmetro δz ;

b) a extrema estabilidade dos métodos de Nelder-Mead e de Levenberg-Marquardt com relação à escolha dos pontos iniciais. Isto pode ser explicado pela regularidade da função custo, uma vez que não houve incorporação de ruídos no modelo;

c) a significativa competitividade entre os métodos de Nelder-Mead e Levenberg-Marquardt, que conseguem obter as mesmas estimativas dos parâmetros físicos;

d) com relação ao tempo de execução, o método de Levenberg-Marquardt apresenta-se muito mais rápido que o de Nelder-Mead. Em média, para a avaliação utilizando uma busca de 125 pontos do “grid”, o metotodo de Nelder-Mead gastou 20 segundos, enquanto o método de Marquardt gastou 1.1 segundo. Isto pode ser explicado pelo fato do método de Levenberg-Marquardt avaliar a função-custo apenas uma vez em cada iteração, enquanto o método de Nelder Mead precisa avaliá-la quatro vezes;

d) a grande variabilidade do método de Algoritmo Genético, o que justifica a necessidade de se proceder uma certa quantidade de simulações na aplicação do método, no sentido de se obter uma boa amostragem dos parâmetros estimados e calcular a estimativa de cada parâmetro pela média dos parâmetros estimados na simulações;

e) o parâmetro de densidade $\delta \rho$ é muito melhor estimado que o parâmetro de cisalhamento $\delta \mu$, neste caso de baixos contrastes. Isto pode ser explicado pelo fato de que, em baixos contrastes, a energia de ondas convertidas é muito baixa, carregando, portanto, muito pouca informação sobre o estado cisalhante dos meios;

4.5.2 – RESULTADOS CORRESPONDENTES AO MODELO 2

4.5.2.1 – Resultados estimados no caso do modelo 2

Os parâmetros estimados, neste caso, são apresentados na Tabela 4.4 e ilustrados nas Figuras 4.16, 4.17 e 4.18:

Tabela 4.4 – Tabela dos parâmetros físicos estimados no caso do Modelo 2

Método (Modelo 2)	$\delta\rho$ (densidade)	δz (impedância)	$\delta\mu$ (cisalhamento)
Nelder-Mead	-0,1401	-0,2844	-0,4435
Levenberg-Marquardt	-0,1401	-0,2844	-0,4435
Algoritmo Genético	-0,1474	-0,2844	-0,4374
Exato	-0,0536	-0,2880	-0,5136

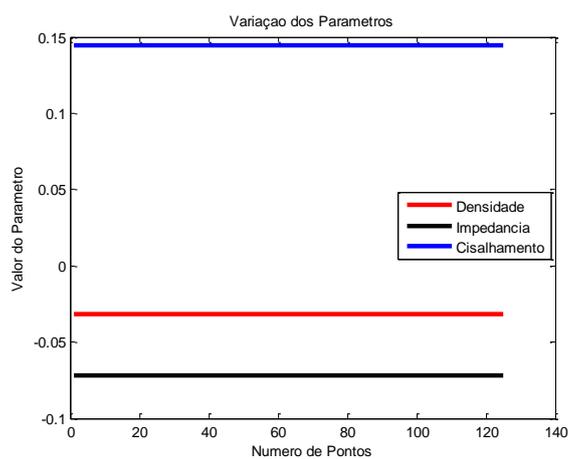


Figura 4.16 – A figura acima ilustra os parâmetros estimados pela aplicação do método de Nelder-Mead considerando-se o Modelo 2. Observar que o método é extremamente estável com relação à escolha do ponto inicial do processo.

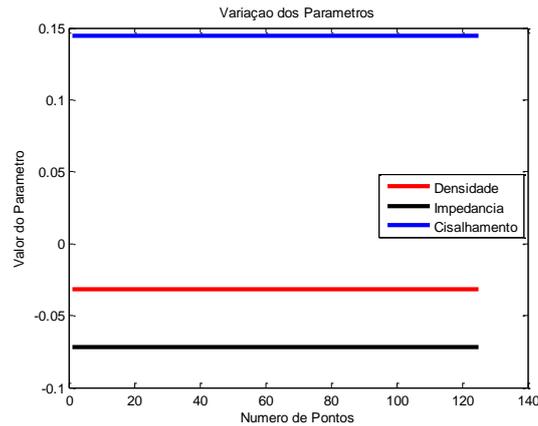


Figura 4.17 – A figura acima ilustra os parâmetros estimados pela aplicação do método de Levenberg-Marquardt, considerando-se o Modelo 2. Observar que o método é extremamente estável com relação à escolha do ponto inicial do processo.

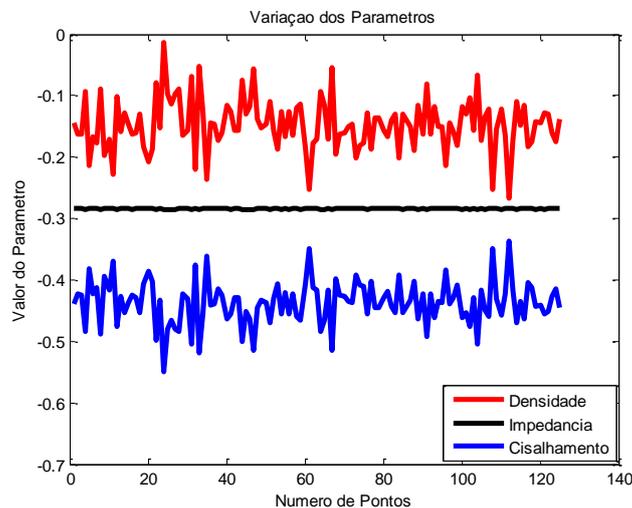


Figura 4.18 – A figura acima ilustra os parâmetros estimados pela aplicação do método de Algoritmo Genético, considerando-se o Modelo 2. Foram feitas 125 simulações do método e os resultados apresentaram grande variabilidade. Os valores dos parâmetros foram estimados pela média dos valores encontrados nas simulações.

4.5.2.2 – Análise dos resultados obtidos

Analisando os resultados obtidos nos procedimentos de inversão deste caso, observa-se, a partir das tabelas de valores e dos gráficos apresentados, algumas feições bastante relevantes:

- a) como no caso anterior, a extrema estabilidade alcançada na estimativa do parâmetro δz . Fisicamente, isto pode ser explicado pelo fato do experimento estar levando em consideração apenas dados sintéticos de ondas P incidentes. O parâmetro físico que controla o processo de reflexão de ondas P é exatamente o parâmetro δz ;

b) novamente, como no caso anterior, a extrema estabilidade dos métodos de Nelder-Mead e de Levenberg-Marquardt com relação à escolha dos pontos iniciais. Isto pode ser explicado pela regularidade da função custo, uma vez que não houve incorporação de ruídos no modelo;

c) novamente a significativa competitividade entre os métodos de Nelder-Mead e Levenberg-Marquardt, que conseguem obter as mesmas estimativas dos parâmetros físicos;

d) ainda aqui, com relação ao tempo de execução, o método de Levenberg-Marquardt apresenta-se muito mais rápido que o de Nelder-Mead. Em média, para a avaliação utilizando uma busca de 125 pontos do “grid”, o método de Nelder-Mead gastou 20,6 segundos, enquanto o método de Marquardt gastou 1.06 segundo. Isto pode ser explicado pelo fato do método de Levenberg-Marquardt avaliar a função-custo apenas uma vez em cada iteração, enquanto o método de Nelder Mead precisa avaliá-la quatro vezes;

e) novamente, como no caso anterior, a grande variabilidade do método de Algoritmo Genético, o que justifica a necessidade de se proceder uma certa quantidade de simulações na aplicação do método, no sentido de se obter uma boa amostragem dos parâmetros estimados e calcular a estimativa de cada parâmetro pela média dos parâmetros estimados na simulações;

f) entretanto, aqui ocorre uma significativa diferença com o caso anterior. O parâmetro de cisalhamento $\delta\mu$ é que é melhor estimado, em detrimento do parâmetro de densidade $\delta\rho$. Neste caso, a energia das ondas convertidas são bastante realçadas, aumentando, deste modo, o nível de informações do estado cisalhante dos meios;

4.5.3 – GRÁFICOS COMPARATIVOS ENTRE OS DADOS SINTÉTICOS E OS OBTIDOS A PARTIR DOS PARÂMETROS ESTIMADOS

Concluído todo o processo de inversão dos dados sintéticos, torna-se necessária uma apresentação comparativa entre os gráficos que descrevem os dados sintéticos do problema e os gráficos dos dados obtidos a partir dos parâmetros estimados, dentro dos limite de observação. As Figuras 4.19 e 4.20 abaixo ilustram estes aspectos:

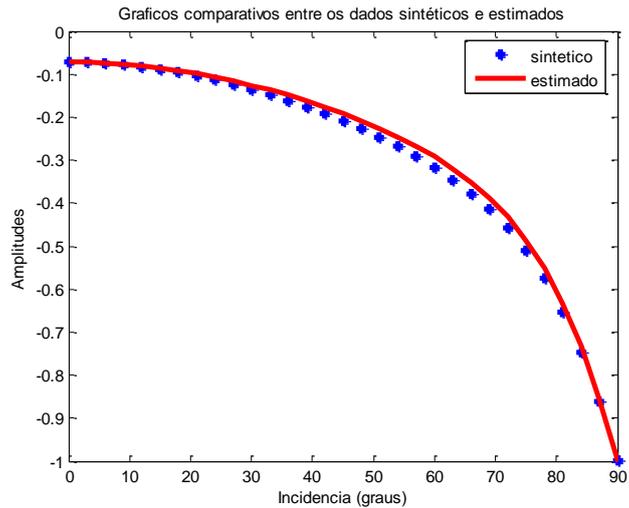


Figura 4.19 – Gráficos comparativos entre os dados sintéticos e aqueles obtidos a partir dos parâmetros físicos estimados. Observar um ajuste razoável dentro da faixa proposta no trabalho (Modelo 1)

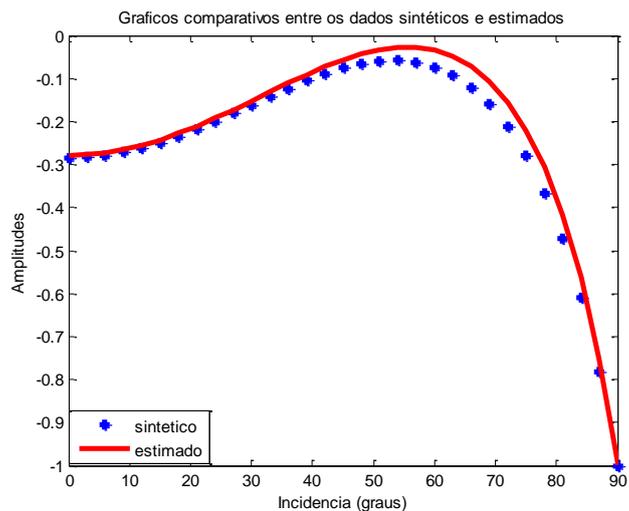


Figura 4.20 – Gráficos comparativos entre os dados sintéticos e aqueles obtidos a partir dos parâmetros físicos estimados. Observar um ajuste razoável dentro da faixa proposta no trabalho (Modelo 2)

Observa-se, nos gráficos acima, um razoável ajuste, dentro da faixa de observações $[0,30^\circ]$ estipulada no estudo, confirmando a robustez dos métodos aplicados.

4.6 - CONSIDERAÇÕES FINAIS

Nesta seção, foram estabelecidos procedimentos de inversão de dados sintéticos de AVO, a partir de dados calculados a partir das equações exatas que determinam as amplitudes dos coeficientes refletidos de uma onda incidente P. Foram estudados dois modelos, um com baixos contrastes e outro com contrastes moderados, visando um estudo preliminar e comparativo entre as duas circunstâncias. O modelo matemático aplicado foi o modelo linearizado.

Os métodos utilizados nestes procedimentos foram os de Nelder-Mead, Levenberg-Marquard e de Algoritmo Genético, considerando-se apenas o caso dos coeficientes de reflexão R_{pp} . Não foi considerada a presença de ruídos.

Os resultados mostraram-se extremamente satisfatórios e apontam algumas considerações muito interessantes:

- a) a invariância da convergência das soluções com relação aos dados iniciais por parte dos métodos de Nelder-Mead e Levenberg-Marquardt;
- b) a boa performance da estimativa do parâmetro de impedância, em todos os métodos aplicados;
- c) o melhor desempenho, em termos de tempo de CPU, por parte do método de Levenberg-Marquardt, explicado pelo fato do Método de Marquardt fazer apenas uma avaliação em cada iteração enquanto o de Nelder-Mead gasta quatro (04) avaliações;
- d) os diferentes comportamentos dos parâmetros de densidade e de cisalhamento, quanto aos tipos de modelos utilizados, de baixo ou de altos contrastes.

É claro que este estudo deve ser amplificado para levar em consideração outros aspectos importantes no instigante processo de inversão de dados de AVO. A inclusão de ruídos nos modelos e a incorporação de dados de ondas convertidas deve ser considerada em futuros estudos. É importante também especular sobre a incorporação de modelos quadráticos em estudos futuros.

6 - CONCLUSÕES

Neste trabalho foi apresentado um estudo sobre processos de inversão aplicados na estimativa de dados de AVO, obtidos sinteticamente a partir das conhecidas equações que definem as amplitudes da reflexão de uma onda P incidente. O método utilizado foi o dos mínimos quadrados e os ajustes aplicados consideraram um modelo linearizado das amplitudes destas ondas. Os experimentos não consideraram a presença de ruídos nos dados sintéticos e foram formulados considerando-se dois tipos de modelos; um, com baixos contrastes e outro, com contrastes moderados.

Os métodos de otimização aplicados na inversão foram os de Nelder-Mead, de Levenberg-Marquardt e de Algoritmo Genético. Mesmo considerando apenas um modelo linearizado, os parâmetros físicos do problema, no caso os contrastes relativos de densidade, impedância e cisalhamento, foram estimados satisfatoriamente, mostrando a robustez e a estabilidade dos métodos aplicados. É claro, que por conta da extrema ambigüidade inerente a este tipo de problema, alguns dos parâmetros estimados não alcançaram os valores estipulados no modelo estudado. Entretanto, os resultados obtidos apontam para alguns direcionamentos metodológicos que podem contribuir bastante no importante problema de inverter dados de AVO com eficiência e robustez.

No desenvolvimento deste trabalho, foi apresentado, inicialmente, um estudo da Teoria Elástica de um meio isotrópico homogêneo, sendo descritas as equações que definem as amplitudes das ondas refletidas e convertidas, de uma onda incidente P, através de uma interface plana horizontal que separa dois meios elásticos, isotrópicos. Posteriormente, foram obtidas aproximações linearizadas e quadráticas destas amplitudes, em termos dos contraste médios relativos entre os dois meios. Gráficos, comparando as amplitudes exatas e aproximadas foram apresentados, visando delimitar os limites de validade destas aproximações. Observou-se que estas aproximações, pelo menos considerando os modelos propostos, são satisfatórias dentro da abertura angular de 0 a 30°, que acabou sendo o intervalo de referência no trabalho.

Posteriormente, foi feito um estudo dos principais métodos aplicados a problemas de otimização não linear, particularmente no caso específico dos ajustes de dados por mínimos quadrados. Optou-se pela aplicação dos métodos de Nelder-Mead, Levenberg-Marquardt e Algoritmo Genético pela eficiência, popularidade e robustez que os mesmos apresentam. Os resultados finais mostraram as virtudes e as deficiências de cada um destes métodos. Por exemplo, os métodos de Nelder-Mead e Levenberg-Marquardt mostraram-se extremamente estáveis com relação aos dados iniciais, mostrando que é possível a inversão de dados de AVO a partir de apenas um dado inicial conveniente. Com relação ao tempo de CPU, ou seja, de eficiência computacional, o método de Levenberg-Marquardt foi, disparado, o mais eficaz. Quanto ao método de Algoritmo Genético, o mesmo apresentou, naturalmente, a sua característica básica de ser mais lento que os demais, entretanto, ele conseguiu estimar

os parâmetros do modelo com muita eficácia.

Alguns desdobramentos podem ser apontados a partir dos resultados obtidos neste trabalho. Dentre eles:

- a) a incorporação de ruídos nos dados, simulando situações mais realistas e checando a robustez e a estabilidade dos métodos aplicados;
- b) a incorporação de dados referentes às ondas convertidas, buscando melhorar as estimativas dos parâmetros de cisalhamento, que controla, fisicamente, as ondas S;
- c) experimentos considerando-se modelos com aproximações quadráticas, visando comparar o seu desempenho com os experimentos feitos com aproximações lineares;
- d) estender esta metodologia para se trabalhar modelos além do isotrópico, transversalmente isotrópico, por exemplo;
- e) fazer análise de sensibilidade dos parâmetros físicos do modelo, buscando entender o porque da eficiência de uns e da ineficiência de outros nos procedimentos de inversão.

BIBLIOGRAFIA

BATISTA, J.B.C. 2003. *Teoria da Inversão I*. Geofísica/CG/UFPA. Notas de aula.

CASTAGNA, J.P. 1993. AVO analysis – Tutorial and review. In CASTAGNA, J.P. & BACKUS, M.M. (Eds.). Offset – dependent reflectivity – Theory and practice in AVO analysis: SEG: p.3 – 35.

CASTAGNA, J.P., 2001. Recent advances in seismic lithologic analysis. **Geophysics**, 66: 42-46.

CRISTO, H.P., 1999, *Programação em Linguagem Fortran*. Consulta em 08/10/2002. Disponível em: <file://C:\\WINDOWS\\TEMP\\Programação em Linguagem FORTRAN.htm>.

DRUFUCA, g. & MAZZOTTI, A., 1995. Ambiguities in AVO inversion of reflections from a gas-sand. **Geophysics**. 60: 134-141.

GOLUB, G.H. & VAN LOAN, C.F., 1989, *Matrix computation*. Second Edition. The Johns University Press.

HÄMMERLIN, G. & HOFFMANN, K.H., 1989, *Numerical mathematics*. Spring Verlag.

HOLLAND, J.H., 1992, *Adaptation in natural and artificial systems*. The MIT Press.

KABIR, N., LAVAUD, B. & CHAVENT, G., 2000. Estimation of the density contrast by AVO inversion beyond the linearized approximation: an indicator of gas saturation. In: ANNUAL MEETING SEG, 2000, Calgary. Anais eletrônicos. Disponível em: <http://www.seg.org>. Acesso: 21/03/2001.

LUPTON, R., 1993, *Statistics in theory and practice*. Princeton University Press.

MADSEN, K., NIELSEN, H.B. & TINGLEFF, O., 2004, *Methods for non-linear least squares problems*. Technical University of Denmark.

MARQUARDT, W.J., 1963, *An algorithm for least squares estimation of non-linear parameter*. Geophysical Data Analyses: 11, 431 – 441.

MATHEWS, J.H. & FINK, K.D. 2004. *Numerical methods using MATLAB*. 4th Edition. Prentice – Hall Inc. Upper – Saddle River, New Jersey, USA.

MITCHELL, M., 1996, *An introduction to genetic algorithms*. The MIT Press.

NELDER, J.A. & MEAD, R. 1965. *A simplex method for function minimization*. Computer Journal. V. 7, 301 – 313.

NOBLE, B. & DANIEL, J.W., 1988, *Applied linear algebra*. Prentice – Hall.

OSTRANDER, W.J., 1984, *Plane wave reflection coefficients for gas at no normal angles of incidence*. **Geophysics**, 49:1637 - 1648.

SCHOENBERG, M. & PROTÁZIO, J.S., 1992, *Zöeppritz rationalized and generalized to anisotropy*. **Journal of Seismic Exploration**, 1: 125 – 144.

TARANTOLA, A., 1987, *Inverse problem theory – Methods for data fitting and model parameter estimation*. Elsevier.

WANG, Y., 1999. Approximation to the Zöeppritz equations and their use in AVO analysis. **Geophysics**. 64(6): 1920-1927.

WU, Y., 2000, *Estimation of gas saturation using P to S converted waves*. Annual Meeting SEG/Calgary 2000.

ZÖEPPRITZ, K. 1919. *Über Reflexion und Durchgang seismischer Wellen durch Unstetigkeitsflächen: Über Erdbebenwellen VIIB*. Berlin. 57 –84 (Nachrichten der Königlichen Gesellschaften der Wissenschaften zu Göttingen, math – phys. K1).