7
Método da Regularização

A minimização de funcionais do tipo $Q(\mathbf{p}) = \mathbf{e}^T\mathbf{e}$, com $\mathbf{e} \equiv \mathbf{d} - \mathbf{G}\mathbf{p}$, para estimar uma solução $\hat{\mathbf{p}}$, muitas vezes é associada a "vales alongados"no espaço de parâmetros, indicando que diversas soluções podem ser encontradas a partir de um mesmo conjunto de dados. Isto configura um problema mal-posto, no sentido que a solução procurada não é única e que, quando única, certamente será instável.

O conceito de problema mal-posto foi desenvolvido pelo matemático francês Jacques Hadamard, no início do século XX, ao estudar equações diferenciais que produzem soluções distintas quando suas condições iniciais ou de fronteira são ligeiramente modificadas. Na geofísica, a instabilidade é associada ao ruído existentes nos dados, pois nessa condição a repetição de um experimento (ou levantamento), mesmo reproduzindo as medidas dentro da margem experimental, pode levar a soluções substancialmente diferentes quando invertidas. Como a solução de um problema geofísico constitui uma representação do substrato, a instabilidade num procedimento de inversão faz com que a repetição do levantamento produza diferentes representações do substrato, uma condição incompatível com a noção de repetibilidade inerente a um experimento científico composto por aquisição de dados e obtenção de uma representação. Uma solução particular de problema mal-posto é portanto desprovida de significado.

Uma das maneiras de transformar um problema geofísico mal-posto em bem posto é pela aplicação do *método da regularização*. Este método baseia-se na utilização de um *funcional regularizador*, que restringe o leque de soluções possíveis a partir da introdução de *informação a priori* sobre a solução procurada. Historicamente, o método da regularização foi desenvolvido pelo físico russo Andrei Tikhonov, no esforço de industrialização da União Soviética que exigia a obtenção de recursos minerais usando a prospecção geofísica (Zhadnov & Keller, 1994). Desde então, o método da regularização tem sido utilizado em diversos ramos das ciências aplicadas e da engenharia.

Nesta nota de aula, faremos uma abordagem conceitual do método da regularização, sem detalhar aspectos matemáticos que encontramos nos textos originais. Usando uma representação gráfica, o funcional regularizador pode ser entendido como estando associado a uma forma quadrática que, como tal, força a existência de um ponto de mínimo quando adicionado a um funcional associado a um "vale"(funcional dos dados sem mínimos localizados).

7.1 Funcionais dos Parâmetros

Como discutido anteriormente, a imposição de suavidade na variação espacial de uma propriedade física, representada por parâmetros p_i do vetor $\mathbf{p}$, é implementada minimizando um funcional, Q, do tipo

$$Q(\mathbf{p}) = (\mathbf{d} - \mathbf{Gp})^T(\mathbf{d} - \mathbf{Gp}) + \mu\mathbf{p}^T\mathbf{p} \tag{7.1}$$

sendo μ um número real positivo. Podemos explorar a formulação em 7.1 para obter uma forma mais geral, do tipo

$$Q(\mathbf{p}) = (\mathbf{d} - \mathbf{Gp})^T\mathbf{W}_d(\mathbf{d} - \mathbf{Gp}) + \mu(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0)^T\mathbf{W}_p(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0), \tag{7.2}$$

na qual $\mathbf{W}_d$ e $\mathbf{W}_p$ são matrizes positivo-definidas, de ordens n e m, respectivamente, e $\mathbf{p}_0$ uma solução de referência a priori. A solução $\mathbf{p}_0$ pode representar um modelo delineado previamente a partir da compilação de dados de poços ou inversão de outra base geofísica.

Considerando que o gradiente de Q é

$$\nabla_p[Q(\mathbf{p})] = (-2)\mathbf{G}^T\mathbf{W}_d(\mathbf{d} - \mathbf{Gp}) + 2\mu\mathbf{W}_p(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0), \tag{7.3}$$

obtemos seu ponto de mínimo, $\dot{\mathbf{p}}$, igualando-o a zero. Definindo $\mathbf{r}_0 = \mathbf{d} - \mathbf{Gp}_0$ obtemos

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^T\mathbf{W}_d\mathbf{r}_0 &= \mathbf{G}^T\mathbf{W}_d\mathbf{G}(\dot{\mathbf{p}} - \mathbf{p}_0) + \mu\mathbf{W}_p(\dot{\mathbf{p}} - \mathbf{p}_0) \\ &= (\mathbf{G}^T\mathbf{W}_d\mathbf{G} + \mu\mathbf{W}_p)(\dot{\mathbf{p}} - \mathbf{p}_0) \end{aligned} \tag{7.4}$$

ou explicitamente que

$$\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{p}_0 + (\mathbf{G}^T\mathbf{W}_d\mathbf{G} + \mu\mathbf{W}_p)^{-1}\mathbf{G}^T\mathbf{W}_d\mathbf{r}_0. \tag{7.5}$$

Considerando a identidade

$$(\mathbf{CA}^{-1}\mathbf{C}^T + \mathbf{D})^{-1}\mathbf{CA}^{-1} \equiv \mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}(\mathbf{C}^T\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C} + \mathbf{A})^{-1} \tag{7.6}$$

e fazendo $\mathbf{C} = \mathbf{G}^T$, $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{W}_d$ e $\mathbf{D} = \mu\mathbf{W}_p$ podemos escrever 7.5 como

$$\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{p}_0 + \mathbf{W}_p^{-1}\mathbf{G}^T(\mathbf{G}\mathbf{W}_p^{-1}\mathbf{G}^T + \mu\mathbf{W}_d^{-1})^{-1}\mathbf{r}_0. \tag{7.7}$$

As soluções em 7.5 e 7.7 são equivalentes, mostrando que sob a condição de regularização, as formulações sub e sobredeterminada são equivalentes. Em termos de implementação computacional é conveniente adotar a solução que inverte uma matriz com a menor dimensão, no caso igual ao mínimo de n e m.

A definição da matriz de peso, $\mathbf{W}_p$, e atribuição de um valor adequado para o parâmetro μ regularizam a obtenção dos parâmetros desconhecidos mas, ao mesmo tempo, definem a forma da solução encontrada. A seguir discutiremos a construção de algumas matrizes de peso $\mathbf{W}_p$ e a natureza da informação que cada uma carrega.

7.2 Compacidade Máxima

O funcional de compacidade máxima foi proposto por Last & Kubik (1983), com a introdução de uma matriz diagonal de pesos, $\mathbf{W}_p$, com elementos w_{ii} tais que

$$w_{ii} = \frac{1}{p_i^2 + \epsilon^2}, \tag{7.8}$$

sendo ϵ um escalar real "suficientemente"pequeno. Nessas condições, o funcional dos parâmetros a ser minimizado torna-se

$$\mathbf{p}^T \mathbf{W}_p \mathbf{p} = \sum_{i=1}^{m} \frac{p_i^2}{p_i^2 + \epsilon^2}, \tag{7.9}$$

que tem ponto de mínimo quando a maioria dos elementos p_i forem nulos. Uma solução com maioria de parâmetros nulos delineia corpos isolados (em gravimetria e magnetometria, especialmente), surgindo daí a noção de *solução compacta*. Conceitualmente, a noção de compacidade informa que a solução verdadeira é menor que o volume discretizado e que, portanto, deve possuir diversos valores nulos.

Como a matriz $\mathbf{W}_p$ depende de uma estimativa $\mathbf{p}$ previamente obtida, um procedimento iterativo deve ser implementado na obtenção computacional de uma solução compacta. O problema obrigatoriamente torna-se não-linear.

A imposição de compacidade requer a introdução de um valor máximo aceitável (outro tipo de informação a priori) pois, caso contrário, valores muito elevados (sem significado físico) são obtidos.

7.3 Momento de Inércia Mínimo

O funcional de momento de inércia mínimo foi desenvolvido por Guillen & Menichetti (1984). A matriz $\mathbf{W}_p$ correspondente é formada por elementos

$$w_i = \frac{c_i^2 + k_i^2}{|p_i| + \epsilon}, \tag{7.10}$$

sendo ϵ um escalar positivo "suficientemente pequeno", c_i a distância do centro da i-ésima cela, em relação a uma reta previamente definida. O funcional a ser minimizado torna-se

$$\mathbf{p}^T \mathbf{W}_p \mathbf{p} = \sum_{i=1}^{m} p_i^2 \frac{c_i^2 + k_i^2}{|p_i| + \epsilon}. \tag{7.11}$$

A minimização de 7.11 delineia uma solução com duas características marcantes. Primeira, é semelhante ao estimador de compacidade máxima, pois assume ponto de mínimo quando muitos elementos p_i forem nulos. Segunda, atribui valores nulos ao parâmetros distantes da reta de referência (ou seja; para maiores valores c_i). Se p_i denotar a densidade do prisma, o produto $|p_i|(c_i^2 + k_i^2)$ é proporcional o momento de inércia da i-ésima cela. No ponto de mínimo, os valores não-nulos ficarão ao redor da reta de referência, fazendo com a solução estimada tenha o momento de inércia mínimo.

7.4 Relações entre Parâmetros

Matrizes de peso são empregadas também para impor variações relativas entre os parâmetros do modelo na forma de vínculos de igualdade aproximada. Esta condição produz matrizes de peso na forma de

$$\mathbf{W}_p = \mathbf{F}^T \mathbf{F} \tag{7.12}$$

sendo $\mathbf{F}$ uma matriz tipo

$$\mathbf{F}\mathbf{p} = \mathbf{c}. \tag{7.13}$$

A utilização destes vínculos é correspondente a ampliar um problema linear $\mathbf{d} = \mathbf{G}\mathbf{p}$ para uma forma

$$\begin{pmatrix} \mathbf{G} \\ \mathbf{F} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{d} \\ \mathbf{c} \end{bmatrix} \tag{7.14}$$

cuja solução por 7.14 é

$$\hat{\mathbf{p}} = (\mathbf{G}^T \mathbf{G} + \mathbf{F}^T \mathbf{F})^{-1} (\mathbf{G}^T \mathbf{d} + \mathbf{F}^T \mathbf{c}). \tag{7.15}$$

Cabe ressaltar que nem todas matrizes do tipo $\mathbf{W}_p = \mathbf{F}^T\mathbf{F}$ não positivo definidas. Em algumas situações, portanto, matrizes nesta forma podem ser incapazes de regularizar um problema mal-posto.

7.5 Exercícios

(i) Prove a identidade matricial em 7.6.

(ii) Em 7.1, faça $\mu = 0$ e $\mathbf{W}_d$ uma matriz diagonal e calcule o estimador correspondente. Este estimador garante unicidade e estabilidade?

(iii) Usando 7.5, determine o estimador $\dot{\mathbf{p}}$ quando $\mathbf{p}_0 = \mathbf{0}_m$.

(iv) Defina os elementos da matriz $\mathbf{F}$ e do vetor $\mathbf{c}$ em 7.13 de forma a minimizar o gradiente de $\mathbf{p}$ (Use uma aproximação por diferenças finitas para representar o operador gradiente).

(v) Defina os elementos de $\mathbf{F}$ que minimizam a derivada horizontal.

(vi) Defina os elementos de $\mathbf{F}$ que minimizam a derivada vertical.

(vii) Defina os elementos de $\mathbf{F}$ que minimizam uma combinação das derivadas horizontal e vertical.

(viii) Defina os elementos da matriz $\mathbf{F}$ e do vetor $\mathbf{c}$ em 7.13 para informar que o gradiente de $\mathbf{p}$ aumenta na vertical.

7.6 Referências

- Gillen, A. & Menichetti, 1984, Gravity and magnetic inversion with minimization of a specific functional: Geophysics, 49, 1354-1360.
- Last, B. J. & Kubik, K., 1983, Compact gravity inversion: Geophysics, 48, 713-721.