

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

AMANDA FERNANDES RAMOS PASSONI

**SOLUÇÕES DE QUADRADOS MÍNIMOS COM RESTRIÇÕES PARA
PROBLEMAS DE TOMOGRAFIA SÍSMICA**

CURITIBA

2022

AMANDA FERNANDES RAMOS PASSONI

**SOLUÇÕES DE QUADRADOS MÍNIMOS COM RESTRIÇÕES PARA
PROBLEMAS DE TOMOGRAFIA SÍSMICA**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao
Curso de Matemática Industrial da Universidade
Federal do Paraná como requisito parcial à obtenção
do grau de bacharel em Matemática Industrial.

Orientador: Prof. Dr. Saulo Pomponet Oliveira.

CURITIBA

2022

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, André e Tatiane, pelo eterno amor, confiança e incentivo.

À minha avó Mara, e à minha tia Juliana, pelo apoio incondicional.

Aos professores, que durante anos compartilharam conhecimentos comigo. Em especial, ao professor Dr. Saulo Pomponet Oliveira, que sugeriu o tema deste trabalho e me orientou em cada etapa de sua elaboração.

À amiga Bianca, por estar presente em todos os momentos.

Ao amigo Guilherme, pela ajuda nos estudos e pelos conselhos ao longo da graduação.

Ao meu namorado, Gustavo, por ser tão atencioso e companheiro.

RESUMO

A tomografia sísmica de tempos de trânsito é uma técnica geofísica de imageamento do subsolo, que pode ser caracterizada como um problema inverso. A incógnita desse problema é o campo de velocidade de propagação da onda compressional no meio, que é obtido indiretamente por meio da grandeza inversa, que é o campo de vagarosidade, que constitui o vetor de parâmetros do modelo. O campo de vagarosidade pode ser calculado a partir dos tempos de trânsito entre fontes e receptores, os quais compõem o vetor de dados. A relação entre a vagarosidade e os tempos de trânsito é baseada em um modelo simplificado de raios retos entre fontes e receptores, o qual resulta num sistema linear de equações. Como, geralmente, há muito mais dados do que parâmetros, o sistema linear que caracteriza o problema inverso é sobredeterminado, e pode ser resolvido minimizando-se o quadrado da norma do erro. O objetivo desta monografia consistiu em estudar a imposição de restrições inferiores e superiores ao vetor-solução de quadrados mínimos. Para tanto, foi utilizado o método da barreira logarítmica, que impõe restrições fisicamente factíveis às componentes do vetor-solução. Os resultados numéricos foram comparados aos da inversão sem restrições.

Palavras-chave: tomografia sísmica de tempos de trânsito, inversão, quadrados mínimos, barreira logarítmica.

ABSTRACT

Travel time seismic tomography is a geophysical imaging technique of the subsurface, which can be characterized as an inverse problem. The unknown of this problem is the compressional velocity field, which is indirectly calculated from its reciprocal, namely the slowness field, which is the vector parameter of the model. The slowness can be calculated from the travel times between the sources and receivers, which is the observation data vector. The relationship between the slowness field and the travel times is based on a simplified model of straight rays between sources and receivers, resulting in a linear system of equations. As there are more data than parameters, the linear system that characterizes the inverse problem is overdetermined, and can be solved by minimizing the square of the residuals. The objective of this monograph was the study of the enforcement of lower and upper constraints on the least squares solution vector. For this purpose, it was used the logarithmic barrier method, which imposes physically feasible constraints on the components of the solution vector. Numerical results were compared to the unrestricted inversion.

Keywords: seismic traveltimes tomography, inversion, least squares, log-barrier.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Problema direto e problema inverso	8
Figura 2 – Representação da tomografia sísmica poço a poço	12
Figura 3 – Modelo sintético	18
Figura 4 – Curva GCV ($\alpha = 10^{-4}$)	19
Figura 5 – Curva GCV ($\alpha = 10^{-3}$)	19
Figura 6 – Curva GCV ($\alpha = 10^{-2}$)	20
Figura 7 – Evolução de ϕ e η ($\alpha = 10^{-4}$)	21
Figura 8 – Evolução de ϕ e η ($\alpha = 10^{-3}$)	21
Figura 9 – Evolução de ϕ e η ($\alpha = 10^{-2}$)	22
Figura 10 – Modelo reconstruído sem barreira logarítmica ($\alpha = 10^{-4}$)	23
Figura 11 – Modelo reconstruído com barreira logarítmica ($\alpha = 10^{-4}$)	23
Figura 12 – Modelo reconstruído sem barreira logarítmica ($\alpha = 10^{-3}$)	23
Figura 13 – Modelo reconstruído com barreira logarítmica ($\alpha = 10^{-3}$)	23
Figura 14 – Modelo reconstruído sem barreira logarítmica ($\alpha = 10^{-2}$)	24
Figura 15 – Modelo reconstruído com barreira logarítmica ($\alpha = 10^{-2}$)	24

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	8
2	INVERSÃO POR QUADRADOS MÍNIMOS	10
3	TOMOGRAFIA SÍSMICA	12
4	MÉTODO DE BARREIRA LOGARÍTMICA.....	15
5	IMPLEMENTAÇÃO E RESULTADOS NUMÉRICOS	18
6	CONCLUSÃO	26
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	27

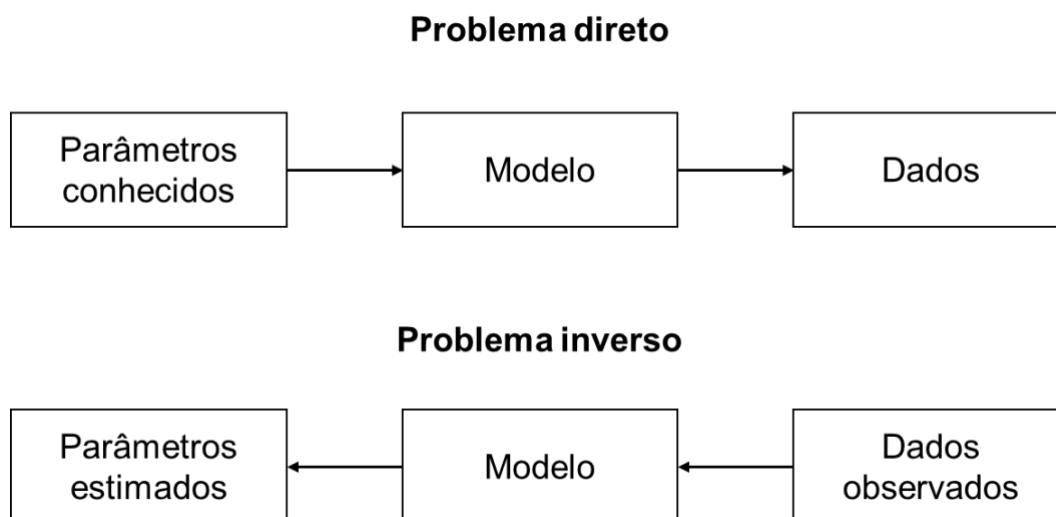
1 INTRODUÇÃO

A tomografia sísmica de tempos de trânsito é uma técnica de imageamento de subsuperfície, no contexto da geofísica de exploração (LO; INDERWIESEN, 1994). Nessa técnica, ondas sísmicas são emitidas por fontes localizadas em um poço, as quais são captadas por receptores em outro poço. A partir do levantamento de dados de tempos de trânsito para vários pares de fonte-receptor (ou seja, os tempos registrados entre a emissão de um pulso sísmico em uma fonte e sua chegada em um receptor), aplica-se um método de inversão, a fim de construir um modelo que represente a distribuição de velocidades de propagação das ondas sísmicas das estruturas na subsuperfície.

Em geral, o problema de calcular dados de resposta a partir de um modelo previamente definido e das leis físicas que regem o fenômeno em questão, com parâmetros de entrada conhecidos, é chamado de problema direto. Por outro lado, o problema de estimar os parâmetros (nesse caso, os valores de velocidade), e um modelo que se adeque aos dados obtidos através de levantamentos experimentais é chamado de problema inverso (BAZÁN; BORGES, 2009). A solução desse problema pode não obedecer aos requisitos de existência, unicidade e estabilidade, o que o classifica como um problema mal posto.

A Figura 1 mostra um esquema simplificado dos problemas direto e inverso.

Figura 1 – Problema direto e problema inverso.



Fonte: Adaptado de BAZÁN; BORGES (2009).

Esta monografia segue a temática de um trabalho anterior de iniciação científica (BRUFATI *et al.*, 2015), que trata do mal condicionamento do sistema linear sobredeterminado que caracteriza o modelo de tomografia de tempos de trânsito. Em

geral, esse sistema é tipicamente resolvido no sentido de minimizar o quadrado da norma do erro, o que corresponde à solução de um problema de quadrados mínimos (BJÖRCK, 2009). Entretanto, neste procedimento a minimização não impõe restrições ao vetor-solução. O objetivo desta monografia é estudar a restrição das componentes do vetor-solução do sistema a um intervalo correspondente a valores fisicamente factíveis dos parâmetros, utilizando a técnica de barreira logarítmica, seguindo a implementação de Weihermann *et al.* (2021).

A barreira logarítmica transforma um problema de otimização restrito em irrestrito, ao introduzir as restrições de desigualdade na função objetivo através da adição de um termo de barreira, impedindo as variáveis de violarem tais restrições (NOCEDAL; WRIGHT, 1990). Baptista *et al.* (2005) e Soler *et al.* (2012) utilizaram esse método para a solução do problema de fluxo de potência ótimo. Li e Oldenburg (2000) aplicaram essa técnica na inversão de dados 3D de polarização induzida, enquanto Weihermann *et al.* (2021) a aplicaram a perfis gamaespectrométricos.

O presente trabalho está organizado em seis capítulos. Este capítulo tratou da introdução sobre a temática do estudo, bem como dos objetivos propostos. No segundo capítulo, discute-se a formulação de um problema inverso, definindo a função objetivo, e utiliza-se o método de quadrados mínimos para encontrar a solução desse problema. O terceiro capítulo apresenta o modelo de tomografia sísmica de tempos de trânsito, que é caracterizado por um sistema linear sobredeterminado. O quarto capítulo retrata o método de barreira logarítmica, utilizado para impor restrições ao vetor-solução do problema. O quinto capítulo apresenta a implementação computacional do problema de tomografia sísmica linear com restrições e a produção de resultados numéricos baseados nos experimentos de Brufati *et al.* (2015). Por fim, o sexto capítulo apresenta as conclusões do trabalho.

2 INVERSÃO POR QUADRADOS MÍNIMOS

Em geral, os dados geofísicos são obtidos de forma discretizada, o que permite uma formulação matricial do problema. Sejam $\mathbf{m} = [m_1, m_2, \dots, m_N]^T$ o vetor que representa os parâmetros, $\mathbf{d} = [d_1, d_2, \dots, d_M]^T$ o vetor que representa os dados. Em geral, os vetores $\mathbf{m}$ e $\mathbf{d}$ são relacionados pela equação

$$\mathbf{d} = \mathbf{f}(\mathbf{m}), \quad (1)$$

sendo $\mathbf{f}$ uma transformação de $\mathbb{R}^N$ em $\mathbb{R}^M$. Nos modelos em que os dados dependem linearmente dos parâmetros, temos uma matriz $\mathbf{G}$, que relaciona os parâmetros $\mathbf{m}$ aos dados $\mathbf{d}$. Então, tem-se o seguinte sistema de equações, na forma matricial

$$\mathbf{d} = \mathbf{G}\mathbf{m}. \quad (2)$$

O problema direto corresponde a multiplicar $\mathbf{G}$ por $\mathbf{m}$, para obter $\mathbf{d}$, enquanto o problema inverso consiste em obter $\mathbf{m}$ a partir de $\mathbf{G}$ e $\mathbf{d}$, resolvendo o sistema indicado na equação (2). Geralmente, há muito mais dados do que parâmetros ($M > N$), por isso esse sistema costuma ser sobredeterminado.

Para uma matriz $\mathbf{G}$ que possa ser invertida, os parâmetros $\mathbf{m}$ podem ser obtidos por

$$\mathbf{m} = \mathbf{G}^{-1}\mathbf{d}. \quad (3)$$

Porém, os dados não se ajustam perfeitamente ao modelo devido a erros experimentais e à simplificação do problema. Por isso, pode-se reescrever a equação (2) como

$$\mathbf{d} = \mathbf{G}\mathbf{m} + \mathbf{e}, \quad (4)$$

onde $\mathbf{e}$ representa os erros experimentais e as simplificações inseridas no problema, podendo ser reescrito como

$$\mathbf{e} = \mathbf{d} - \mathbf{G}\mathbf{m}. \quad (5)$$

Dessa forma, para obter uma solução para o vetor parâmetros $\mathbf{m}$, pode-se minimizar a soma dos quadrados dos erros, a qual será chamada de função objetivo.

Essa minimização significa buscar a solução para $\mathbf{m}$ que tenha o menor erro possível em relação ao dado observado. Dessa forma, obtém-se os parâmetros que melhor se ajustam às observações.

A soma dos quadrados dos erros corresponde à norma euclidiana do vetor $\mathbf{e}$, dada pelo produto dele por sua transposta

$$\varphi = |\mathbf{e}|^2 = \mathbf{e}^T \mathbf{e}. \quad (6)$$

Substituindo a equação (5) na equação (6), pode-se reescrever a função objetivo como

$$\varphi = (\mathbf{d} - \mathbf{G}\mathbf{m})^T (\mathbf{d} - \mathbf{G}\mathbf{m}). \quad (7)$$

Desenvolvendo a função φ , obtém-se

$$\varphi = \mathbf{d}^T \mathbf{d} - \mathbf{m}^T \mathbf{G}^T \mathbf{d} - \mathbf{d}^T \mathbf{G} \mathbf{m} + \mathbf{m}^T \mathbf{G}^T \mathbf{G} \mathbf{m}. \quad (8)$$

Para minimizar essa função objetivo, é preciso obter o vetor gradiente de φ e igualá-lo a zero, seguindo a condição necessária de otimalidade de primeira ordem (RIBEIRO; KARAS, 2013)

$$\nabla \varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{m}} = \mathbf{0}, \quad (9)$$

$$\mathbf{G}^T \mathbf{G} \mathbf{m} - \mathbf{G}^T \mathbf{d} = \mathbf{0}. \quad (10)$$

A matriz Hessiana de φ , dada por

$$\nabla^2 \varphi = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \mathbf{m}^2} = \mathbf{G}^T \mathbf{G}, \quad (11)$$

deve ser semidefinida positiva, respeitando a condição necessária de otimalidade de segunda ordem (RIBEIRO; KARAS, 2013). De fato, dado um vetor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$,

$$\mathbf{x}^T \mathbf{G}^T \mathbf{G} \mathbf{x} = (\mathbf{G}\mathbf{x})^T (\mathbf{G}\mathbf{x}) = |\mathbf{G}\mathbf{x}|^2 \geq 0. \quad (12)$$

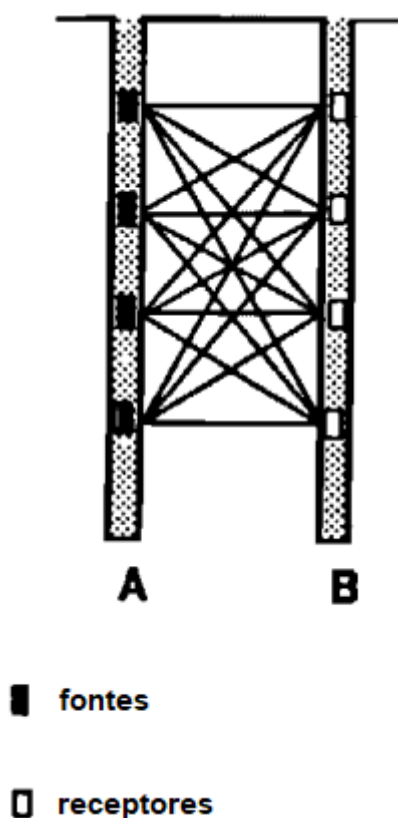
Nos casos em que a matriz $\mathbf{G}$ tem posto completo, o vetor de parâmetros que minimiza a função objetivo φ é dado pela solução do sistema linear

$$(\mathbf{G}^T \mathbf{G}) \mathbf{m} = \mathbf{G}^T \mathbf{d}. \quad (13)$$

3 TOMOGRAFIA SÍSMICA

A tomografia é um método utilizado para fazer inferências sobre as propriedades físicas de um corpo, utilizando as informações fornecidas pela passagem de uma onda através desse corpo. A tomografia sísmica é uma ferramenta geofísica para estudar o interior da Terra, que permite obter imagens em duas ou três dimensões da subsuperfície. O foco deste trabalho foi a tomografia sísmica de tempos de trânsito, que leva em consideração somente os tempos de percurso dos raios entre cada par fonte-receptor. Nessa técnica, ondas sísmicas são emitidas por fontes localizadas em um poço, as quais são captadas por receptores em outro poço, como representado na Figura 2.

Figura 2 – Representação da tomografia sísmica poço a poço.



Fonte: Adaptado de LO; INDERWIESEN (1994).

Restringindo o estudo a uma região plana delimitada pelas linhas das fontes e receptores (Figura 2), identificamos cada material no ponto (x, z) por meio da velocidade $v(x, z)$ com que uma onda sísmica se propaga neste ponto, onde x representa a coordenada horizontal, e z a coordenada vertical

$$v = \frac{\Delta x}{\Delta t}, \quad (14)$$

sendo Δx o deslocamento realizado neste intervalo, então, o intervalo de tempo com que a onda se propaga nesse ponto é dado por

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{v}. \quad (15)$$

Assim, o tempo de trânsito de um raio, da fonte até o receptor, pode ser aproximado por

$$t = \sum_j \frac{\Delta x_j}{v_j}, \quad (16)$$

sendo que Δx_j representa o j -ésimo segmento do raio e v_j a velocidade do meio neste segmento. Essa expressão pode ser escrita numa forma linear, ao definir-se a vagarosidade

$$s(x, z) = \frac{1}{v(x, z)}, \quad (17)$$

dessa forma, substituindo a equação (17) na equação (16), obtém-se

$$t = \sum_j \Delta x_j s_j. \quad (18)$$

Para aplicar o procedimento de inversão no formato matricial, pode-se discretizar o meio em N blocos de mesmo tamanho e vagarosidade constante. Deste modo, o tempo de trânsito do i -ésimo raio é dado por

$$t_i = \sum_{j=1}^N g_{ij} s_j, \quad (19)$$

onde g_{ij} representa o tamanho do percurso percorrido pelo i -ésimo raio dentro do j -ésimo bloco, e s_j representa a vagarosidade de cada bloco j .

Dessa forma, pode-se escrever a equação (19) em notação vetorial

$$\mathbf{t} = \mathbf{G}\mathbf{s}, \quad (20)$$

onde o vetor $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^M$ representa o tempo de percurso de cada raio, sendo M a quantidade de pares fonte-receptor, $\mathbf{G}$ é a matriz formada pelos elementos g_{ij} representando o percurso do i -ésimo raio dentro do j -ésimo bloco ($g_{ij} = 0$, se o raio i

não passa pelo bloco j), e o vetor $\mathbf{s} \in \mathbb{R}^N$ representa a vagarosidade de cada bloco j . $\mathbf{G}$ é chamada de Matriz Kernel ou Matriz de Sensibilidade. Cada linha dessa matriz representa um raio, ou seja, se o modelo for atravessado por 6.400 raios, a matriz de sensibilidade terá 6.400 linhas. Por sua vez, o número de colunas é o número de parâmetros do problema. Então, se um modelo for discretizado por células regulares, sendo 20 blocos na direção x e 40 blocos na direção z , o modelo será representado por 800 blocos, portanto, 800 parâmetros. Assim, a matriz tomográfica terá 6.400 linhas e 800 colunas, neste caso.

Uma propriedade importante dessa matriz é sua esparsidade. O número de elementos nulos de $\mathbf{G}$ é muito elevado, pois, em cada trajetória, o raio atravessa uma pequena parcela dos blocos de vagarosidade constante s_j . Nesta monografia, por simplicidade será considerado que os raios são retos, assim, a geometria dos raios não depende da distribuição de velocidades – em outras palavras, a matriz $\mathbf{G}$ não depende do vetor $\mathbf{s}$.

Pode-se observar que a equação (20) é similar à equação (2), que representa um problema inverso. Nesse caso, o vetor $\mathbf{t}$ constitui o vetor de dados, que é a informação de entrada do problema inverso, e o vetor $\mathbf{s}$ contém os parâmetros do problema. Então, para o problema de tomografia sísmica, tem-se a função objetivo abaixo

$$\phi = (\mathbf{t} - \mathbf{Gs})^T(\mathbf{t} - \mathbf{Gs}). \quad (21)$$

4 MÉTODO DE BARREIRA LOGARÍTMICA

O objetivo desta monografia foi estudar a restrição das componentes do vetor-solução do sistema representado pela equação (20) a um intervalo correspondente a valores fisicamente factíveis dos parâmetros, utilizando o método de barreira logarítmica.

Os métodos de barreira transformam um problema restrito em um problema irrestrito, onde as restrições são introduzidas na função objetivo através de um termo de barreira (NOCEDAL; WRIGHT, 1990). Esse termo impede as variáveis de violarem tais restrições, trabalhando no interior da região factível (MURRAY; WRIGHT, 1994).

Para aplicar esse método ao problema de tomografia sísmica apresentado na seção anterior, escreve-se a função objetivo dada na equação (21) sujeita a restrições

$$\begin{aligned} \min \phi &= (\mathbf{t} - \mathbf{G}\mathbf{s})^T (\mathbf{t} - \mathbf{G}\mathbf{s}) + \lambda(\mathbf{s}^T \mathbf{s}), \\ \text{sujeito a } s_{\min} &\leq s_j \leq s_{\max}, \quad j = 1, \dots, N, \end{aligned} \quad (22)$$

onde as restrições $s_{\min} = \frac{1}{8.000}$ e $s_{\max} = \frac{1}{1.500}$ são as vagarosidades mínima e máxima admitidas. Esses valores são baseados na velocidade da onda compressional na água, 1.500 m/s , admitida como a velocidade mínima, e no fato que a velocidade de 8.000 m/s , admitida como velocidade máxima, é maior do que as velocidades compressionais observadas na crosta terrestre (TEIXEIRA *et al.*, 2009). O termo $\lambda(\mathbf{s}^T \mathbf{s})$ controla a suavidade da solução final, para melhorar a estabilidade numérica da inversão, sendo λ o parâmetro de regularização.

O parâmetro de regularização é calculado pelo método da Validação Cruzada Generalizada (GCV) (CRAVEN; WAHBA, 1979). Esse método sugere que um bom valor para λ deve prever dados no vetor $\mathbf{t}$ que estejam faltando ou que foram removidos (BAZÁN; BORGES, 2009; HANSEN, 1998). O parâmetro de regularização é o valor λ que minimiza a função GCV

$$V_{\mathbf{G},\mathbf{t}}(\lambda) = \frac{\|(\mathbf{I} - \mathbf{G}\mathbf{G}_\lambda^+) \mathbf{t}\|_2^2}{\left(\text{tr}(\mathbf{I} - \mathbf{G}\mathbf{G}_\lambda^+)\right)^2}, \quad (23)$$

em que $\mathbf{G}_\lambda^+ = (\mathbf{G}^T \mathbf{G} + \lambda^2 \mathbf{I})^{-1} \mathbf{G}^T$ representa a pseudoinversa da matriz $(\mathbf{G}^T \mathbf{G} + \lambda^2 \mathbf{I})$ do sistema $(\mathbf{G}^T \mathbf{G} + \lambda^2 \mathbf{I}) \mathbf{s}_\lambda = \mathbf{G}^T \mathbf{t}$, onde $\mathbf{s}_\lambda = \mathbf{G}_\lambda^+ \mathbf{t}$ é a solução regularizada (BAZÁN; BORGES, 2009).

A equação (22) é um problema quadrático. Pode-se reescrever esse problema da seguinte forma

$$\begin{aligned}
\min \phi &= (\mathbf{t} - \mathbf{G}\mathbf{s})^T (\mathbf{t} - \mathbf{G}\mathbf{s}) + \lambda(\mathbf{s}^T \mathbf{s}), \\
\text{sujeito a } s_j + f_u &= s_{\max} \\
s_j - f_l &= s_{\min}, \\
f_u, f_l &> 0 \\
j &= 1, \dots, N,
\end{aligned} \tag{24}$$

onde f_u, f_l são variáveis de folga associadas às restrições de desigualdade da equação (22).

As restrições são implementadas pela inclusão de um termo de barreira logarítmica na função objetivo ϕ , o qual garante a não negatividade das variáveis de folga, uma vez que a função logarítmica é definida somente para números positivos (BAPTISTA *et al.*, 2005; WRIGHT, 1995)

$$B(s, \eta) = \phi - 2\eta \left[\sum_{j=1}^M \ln(f_l) + \sum_{j=1}^M \ln(f_u) \right], \tag{25}$$

ou, normalizando as variáveis de folga por $s_{\max}$,

$$B(s, \eta) = \phi - 2\eta \left[\sum_{j=1}^M \ln \left(\frac{s_j}{s_{\max}} - \frac{s_{\min}}{s_{\max}} \right) + \sum_{j=1}^M \ln \left(1 - \frac{s_j}{s_{\max}} \right) \right], \tag{26}$$

onde η é o parâmetro de barreira, dado inicialmente por

$$\eta = \frac{\phi(\mathbf{s}^0)}{-2 \left[\sum_{j=1}^M \ln \left(\frac{s_j^0}{s_{\max}} - \frac{s_{\min}}{s_{\max}} \right) + \sum_{j=1}^M \ln \left(1 - \frac{s_j^0}{s_{\max}} \right) \right]}, \tag{27}$$

sendo $\mathbf{s}^0$ o chute inicial para a vagarosidade, conforme a implementação de Weihermann *et al.* (2021).

Para minimizar a função objetivo com a barreira logarítmica $B(s, \eta)$, é utilizado o método de Newton

$$\nabla^2 B \Delta \mathbf{s} = -\nabla B, \tag{28}$$

onde $\nabla^2 B$ representa a matriz Hessiana de B , $\Delta \mathbf{s}$ o tamanho do passo e ∇B o vetor gradiente de B . Dessa forma,

$$\begin{aligned}
&[\mathbf{G}^T \mathbf{G} + 2\eta((\mathbf{s} - s_{\min} \mathbf{I})^{-2} + (s_{\max} \mathbf{I} - \mathbf{s})^{-2}) + \lambda] \Delta \mathbf{s} \\
&= -[\mathbf{G}^T (\mathbf{G}\mathbf{s} - \mathbf{t}) + 2\eta((\mathbf{s} - s_{\min} \mathbf{I})^{-1} \mathbf{e} - (s_{\max} \mathbf{I} - \mathbf{s})^{-1} \mathbf{e}) + \lambda \mathbf{s}],
\end{aligned} \tag{29}$$

onde $\mathbf{s} = \text{diag}\{s_1, s_2, \dots, s_N\}$ e $\mathbf{e} = (1, \dots, 1)^T$.

A matriz $\mathbf{s}$ e o parâmetro η são atualizados a cada iteração k

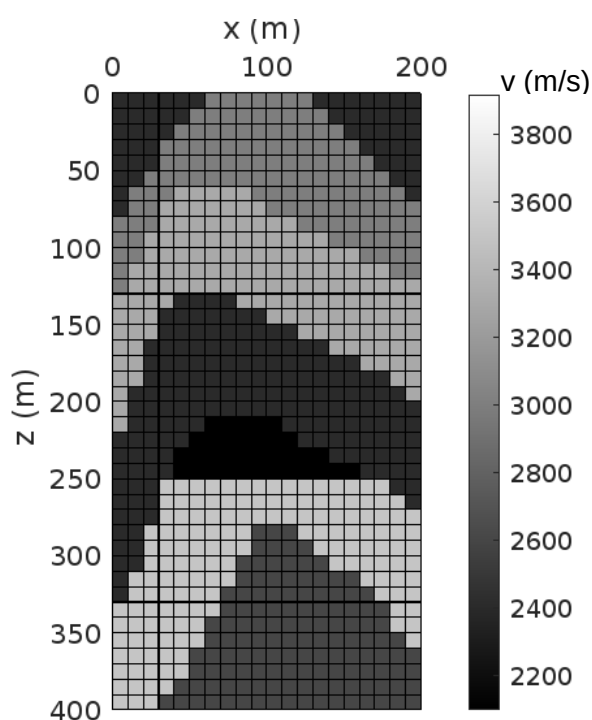
$$\begin{aligned} \mathbf{s}_{k+1} &= \mathbf{s}_k + \gamma \rho \Delta \mathbf{s}, \\ \eta_{k+1} &= (1 - \min(\gamma, \rho)) \eta_k, \end{aligned} \quad (30)$$

sendo $0 < \rho \leq 1$ um fator multiplicativo que garante que $s_{\min} \leq s_{k+1} \leq s_{\max}$. O fator $0 < \gamma < 1$, por sua vez, é utilizado para evitar que alguma componente do vetor s_{k+1} atinja uma das extremidades $s_{\min}$ ou $s_{\max}$ (LI; OLDENBURG, 2000). À medida que as iterações ocorrem, o parâmetro η_k tende a 0 e o vetor solução se aproxima do modelo que minimiza a função objetivo ϕ .

5 IMPLEMENTAÇÃO E RESULTADOS NUMÉRICOS

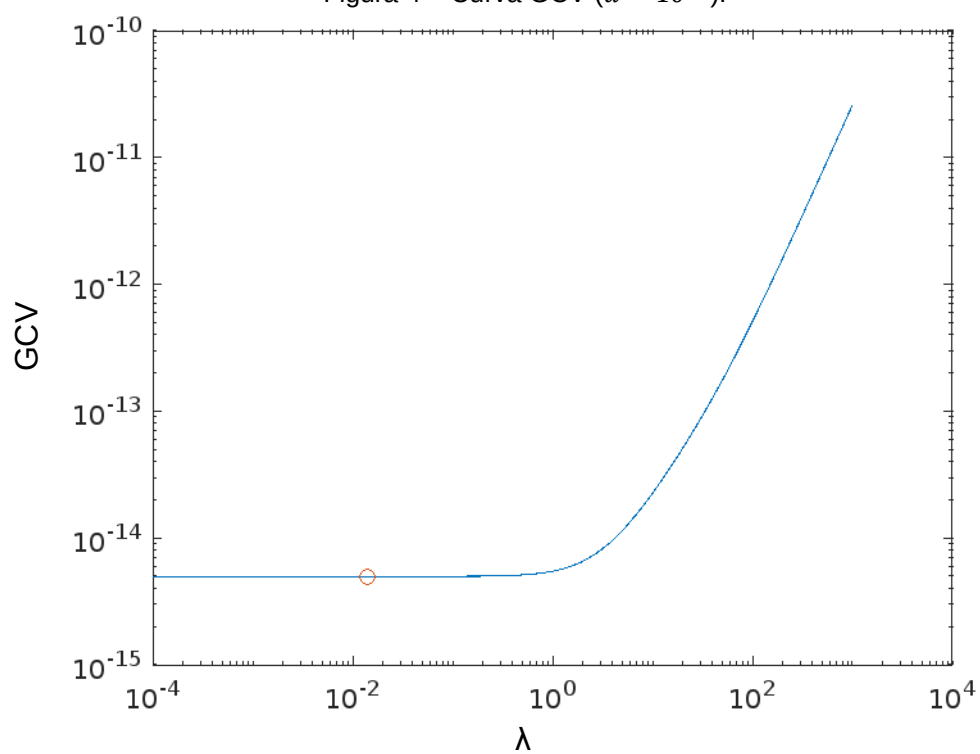
A implementação foi baseada nos experimentos de Brufati *et al.* (2015), onde é considerado o modelo sintético da Figura 3, que pode ser descrito como uma anticlinal não simétrica com origem tectônica. Foram utilizados 31 fontes e 31 receptores, de modo que são observados 169 raios. O modelo foi discretizado em 800 blocos, com 10 m² cada. Os dados de tempos de trânsito (t^{obs}) foram perturbados com um ruído uniformemente distribuído de amplitude α , com $\alpha = 10^{-4}$, $\alpha = 10^{-3}$ e $\alpha = 10^{-2}$.

Figura 3 – Modelo sintético.

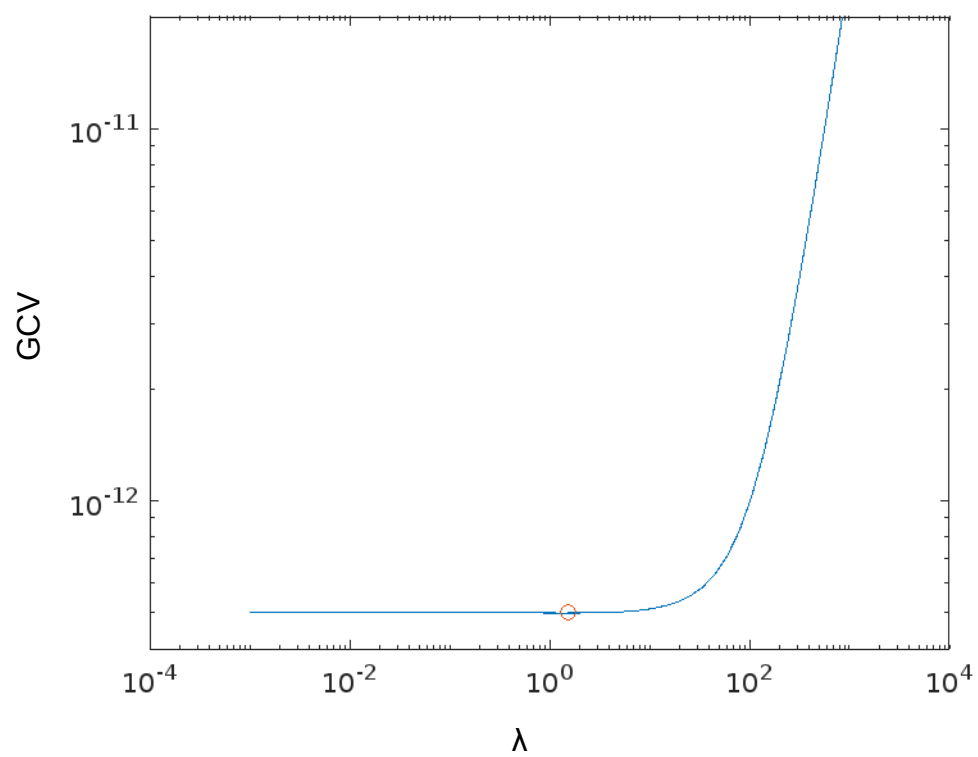


Fonte: BRUFATI *et al.* (2015).

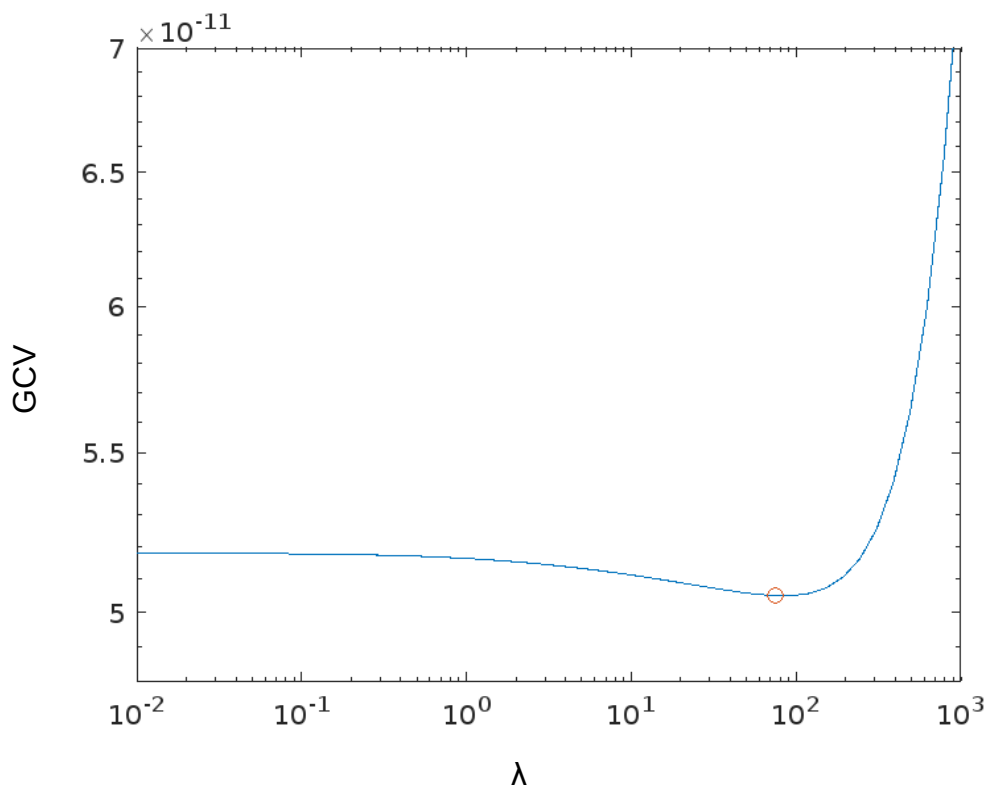
O método da barreira logarítmica foi aplicado utilizando um programa em MATLAB (R2022a), apresentado no Apêndice A. A técnica utilizada para a escolha do parâmetro de regularização foi a Validação Cruzada Generalizada (GCV). As Figuras 4-6 mostram as curvas GCV, para os diferentes níveis de ruído aplicados ao modelo. O círculo vermelho indica o parâmetro λ escolhido, o qual minimiza a função GCV.

Figura 4 – Curva GCV ($\alpha = 10^{-4}$).

Fonte: A autora (2022)

Figura 5 – Curva GCV ($\alpha = 10^{-3}$).

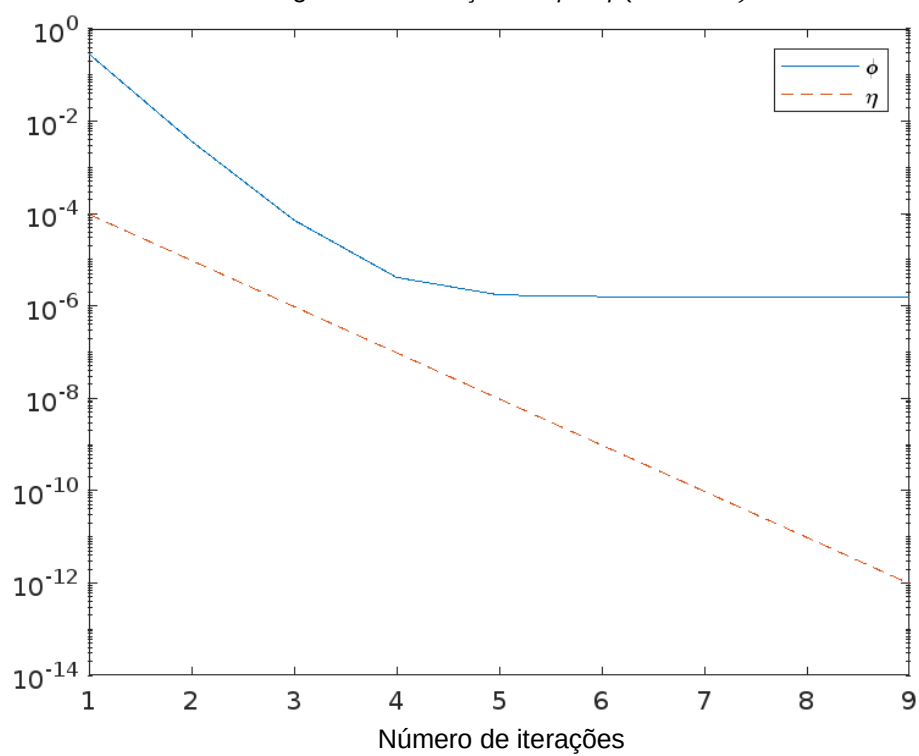
Fonte: A autora (2022).

Figura 6 – Curva GCV ($\alpha = 10^{-2}$).

Fonte: A autora (2022).

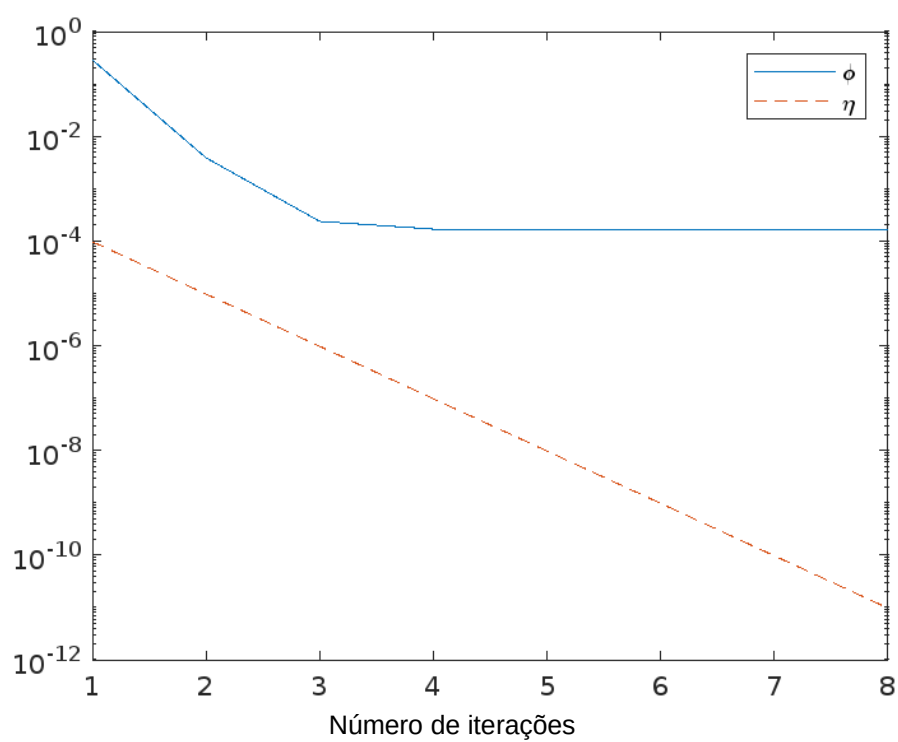
As Figuras 7-9 apresentam a variação da função objetivo ϕ e do parâmetro de barreira η , para cada parâmetro de perturbação α . Observa-se que à medida que o parâmetro de barreira η se aproxima de 0, o vetor solução se aproxima do modelo que minimiza a função objetivo ϕ .

Figura 7 – Evolução de ϕ e η ($\alpha = 10^{-4}$).

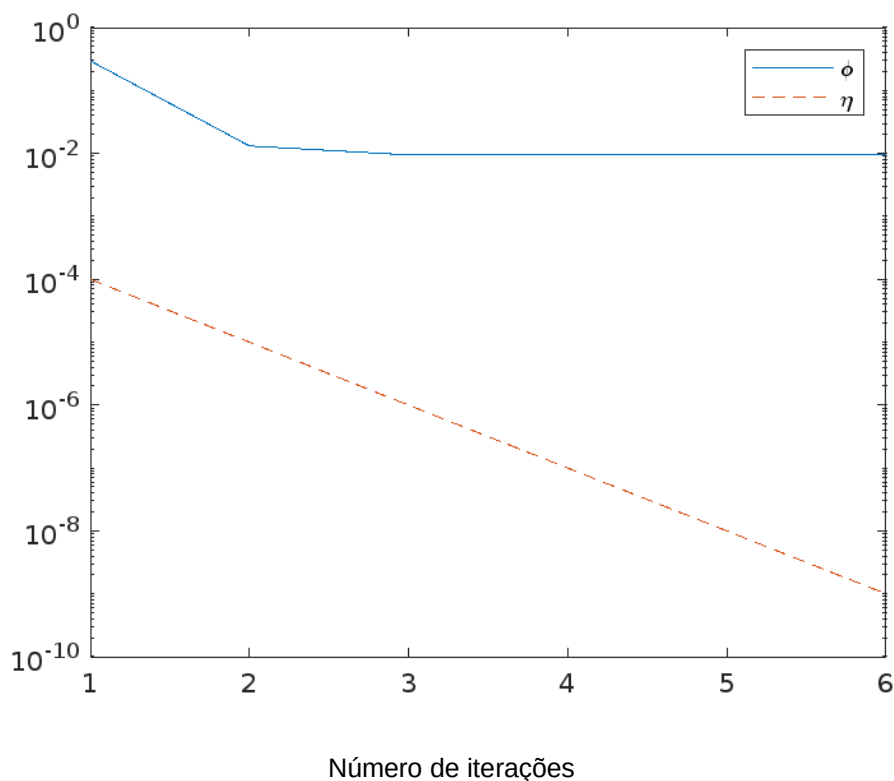


Fonte: A autora (2022).

Figura 8 – Evolução de ϕ e η ($\alpha = 10^{-3}$).



Fonte: A autora (2022).

Figura 9 – Evolução de ϕ e η ($\alpha = 10^{-2}$).

Fonte: A autora (2022).

Os modelos reconstruídos com a inversão, para os diferentes níveis de ruído, são apresentados nas Figuras 10-15. Percebe-se que estes modelos permitem identificar as diferentes camadas, de acordo com o modelo sintético apresentado na Figura 3. Além disso, nota-se que os modelos reconstruídos utilizando a inversão com e sem a barreira logarítmica são muito similares.

Figura 10 – Modelo reconstruído sem barreira logarítmica ($\alpha = 10^{-4}$).

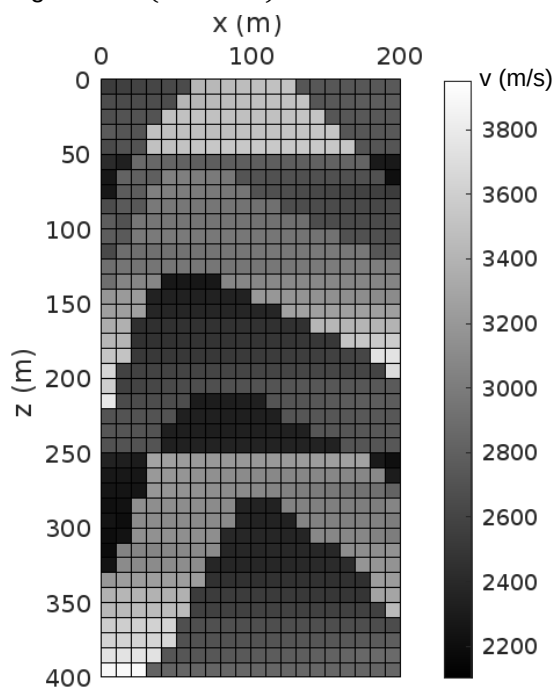


Figura 11 – Modelo reconstruído com barreira logarítmica ($\alpha = 10^{-4}$).

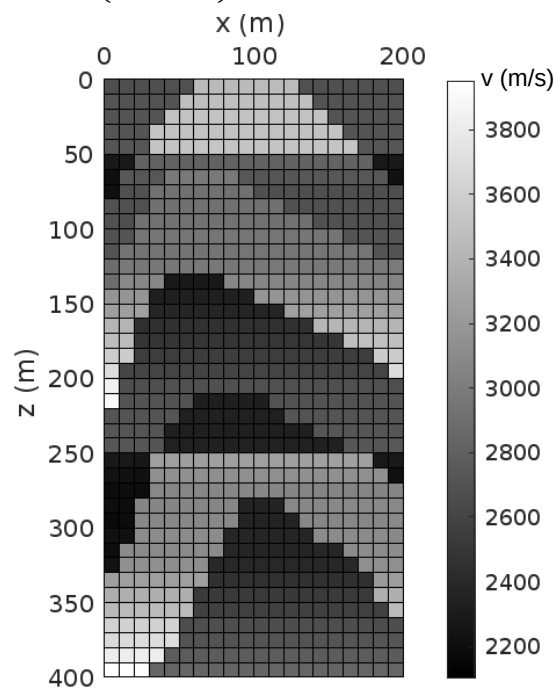


Figura 12 – Modelo reconstruído sem barreira logarítmica ($\alpha = 10^{-3}$).

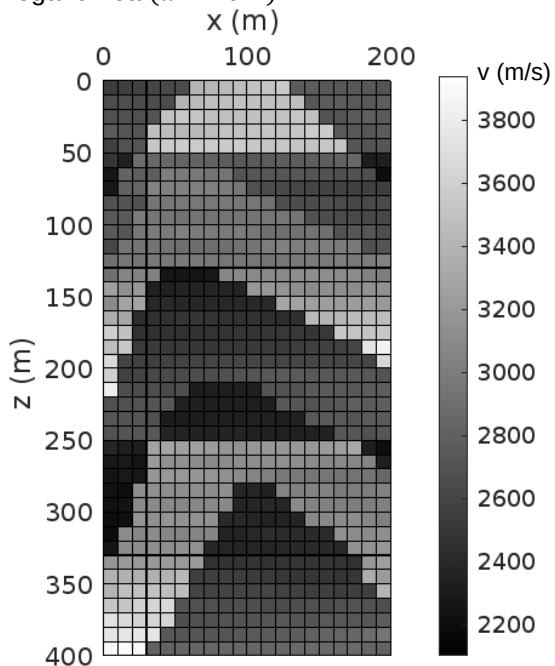
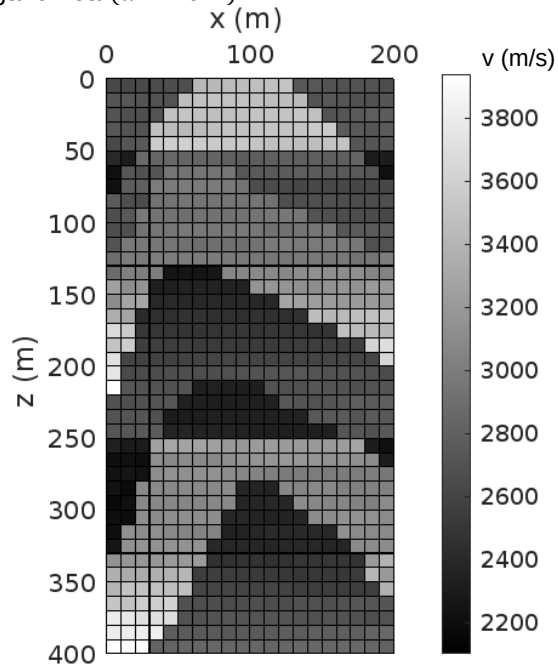


Figura 13 – Modelo reconstruído com barreira logarítmica ($\alpha = 10^{-3}$).



Fonte: A autora (2022).

Figura 14 – Modelo reconstruído sem barreira logarítmica ($\alpha = 10^{-2}$).

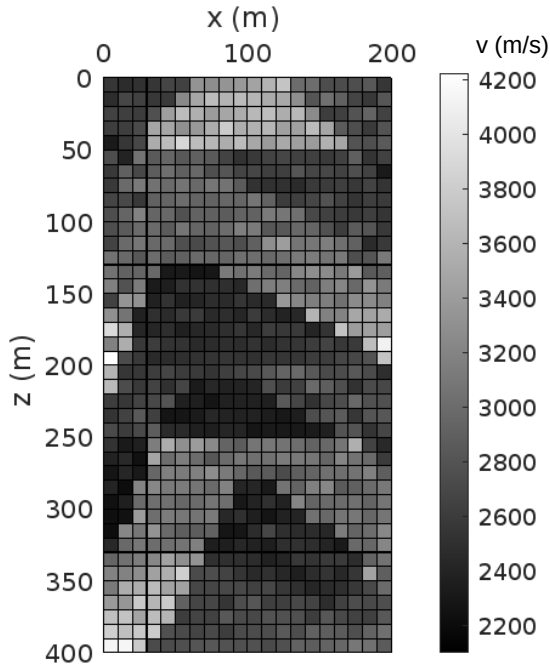
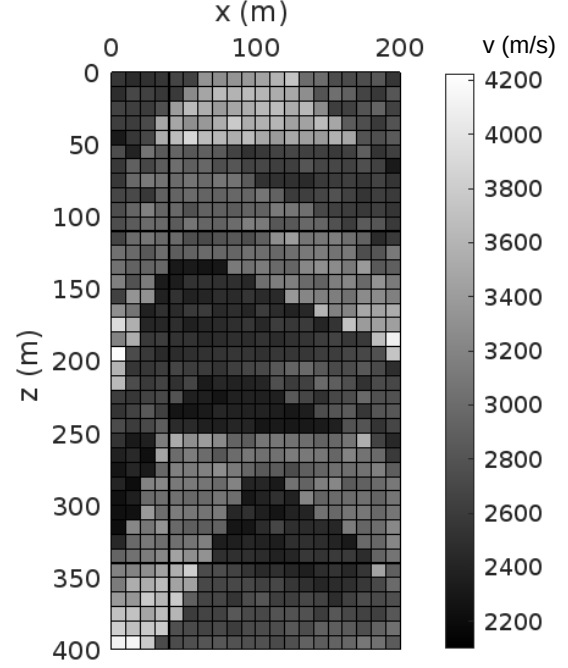


Figura 15 – Modelo reconstruído com barreira logarítmica ($\alpha = 10^{-2}$).



Fonte: A autora (2022).

Foram avaliados os erros quadráticos médios para comparar os resultados da implementação do método de barreira logarítmica com o método sem restrições. Então, pode-se definir os erros dos dados de tempos de trânsito perturbados em relação aos dados observados

$$\epsilon_{\alpha} = \frac{\|t^{\alpha} - t^{obs}\|_2}{\|t^{obs}\|_2}, \quad (31)$$

o erro dos tempos de trânsito calculados pela inversão em relação aos tempos de trânsito perturbados

$$\epsilon_t = \frac{\|t^{calc} - t^{\alpha}\|_2}{\|t^{\alpha}\|_2}, \quad t^{calc} = Gs^{est}, \quad (32)$$

o erro das velocidades estimadas comparadas às velocidades do modelo sintético

$$\epsilon_v = \frac{\|v^{est} - v^{real}\|_2}{\|v^{real}\|_2}, \quad (33)$$

e o erro das vagarosidades estimadas comparadas às vagarosidades do modelo sintético

$$\epsilon_s = \frac{\|s^{est} - s^{real}\|_2}{\|s^{real}\|_2}. \quad (34)$$

A Tabela 1 mostra os erros quadráticos médios das inversões com e sem barreira logarítmica, para cada parâmetro de perturbação α .

Tabela 1 – Erro quadrático médio (em percentual).

α	Sem barreira logarítmica				Com barreira logarítmica			
	ϵ_{α}	ϵ_t	ϵ_v	ϵ_s	ϵ_{α}	ϵ_t	ϵ_v	ϵ_s
10^{-4}	0,005813	0,006854	10,0521	9,62307	0,005813	0,005482	9,94197	9,51670
10^{-3}	0,057882	0,055080	10,1241	9,66830	0,057882	0,054871	10,0584	9,59682
10^{-2}	0,570742	0,542295	11,5341	10,7506	0,570742	0,542304	11,5201	10,7384

Fonte: A autora (2022).

A partir dos dados apresentados na Tabela 1, infere-se que os erros do método de inversão com barreira logarítmica são menores do que os erros do método sem barreira, para todos os níveis de ruído. Além disso, o parâmetro de perturbação que apresentou os menores erros quadráticos médios foi o $\alpha = 10^{-4}$.

6 CONCLUSÃO

Esta monografia teve como objetivo avaliar soluções de quadrados mínimos com restrições para problemas de tomografia sísmica.

A implementação foi realizada com base nos experimentos de Brufati *et al.* (2015), onde os dados de tempos de trânsito foram perturbados com diferentes parâmetros. As restrições foram incorporadas ao problema utilizando-se o método da barreira logarítmica, conforme a aplicação de Weihermann *et al.* (2021). Enfim, os resultados numéricos foram comparados aos de um método sem restrições.

Percebe-se que os modelos reconstruídos pela inversão são satisfatórios, de acordo com o modelo sintético utilizado. Isso indica que o parâmetro de regularização selecionado com o uso da curva GCV possibilita uma reconstrução adequada do modelo. Ainda, os erros do método de inversão com restrições impostas pela barreira logarítmica são ligeiramente melhores, quando comparados ao método sem barreira.

Com base nos resultados obtidos neste trabalho, sugere-se o estudo da implementação do método de barreira logarítmica para a solução do problema de tomografia sísmica não linear, no qual não há a suposição de que os raios são retos (RODRIGUES, 2015). Nestes casos, as soluções das iterações iniciais podem ser mais discrepantes e mais próximas das restrições.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BAZÁN, F. S. V.; BORGES, L. S. **Métodos para problemas inversos de grande porte**. Notas em Matemática Aplicada, v. 39, 2009.

BJÖRCK, A. **Numerical methods for least squares problems**. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 1996.

BRIÃO, G. F. **Tomografia sísmica por tempo de percurso**: modelagem, métodos numéricos e implementação. Mestrado. Instituto Nacional De Matemática Pura e Aplicada, 2005.

BRUFATI, T. E. B, OLIVEIRA, S. P; BASSREI, A. **Conjugate Gradient Method for the Solution of Inverse Problems: Application in Linear Seismic Tomography**. Tendências em Matemática Aplicada e Computacional, v. 16, n. 3, p. 185-194, 2015

CARBONESI, B. de L. **Tomografia de refração e sua aplicação na identificação dos altos estruturais do Gráben da Casa de Pedra, RJ**. Trabalho de Graduação (Disciplina Projeto Final II) – Curso de Geofísica, Universidade Federal Fluminense, Rio de Janeiro, 2018.

CRAVEN, P.; WAHBA, G., **Smoothing noisy data with spline functions: estimating the correct degree of smoothing by the method of generalized cross-validation**. Numer. Math. v. 31, p. 377–403, 1978.

HANSEN, P. C. **Rank-deficient and discrete ill-posed problems**. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 1998.

JESUS, Y. C. V. de. **Tomografia sísmica de tempos de trânsito para campos de velocidades parametrizados por polinômios bidimensionais usando o algoritmo Metropolis**. Trabalho de Graduação – Curso de Geofísica, Instituto de Geociências da Universidade Federal da Bahia, Salvador, 2018.

LI, Y.; OLDENBURG, D. W., **3-D inversion of induced polarization data**. Geophysics, v. 65, n. 6, p. 1931–1945, 2000.

LO, T. W.; INDERWIESEN, P. L. **Fundamentals of seismic tomography**. Geophysical monograph series, n. 6, 1994.

NOCEDAL, J.; WRIGHT, S. J. **Numerical optimization**. Springer-Verlag, 1990.

RIBEIRO, A. A.; KARAS, E. W. **Otimização contínua: aspectos teóricos e computacionais**. São Paulo: Cengage Learning, 2013.

ROCHA, M. P. **Tomografia sísmica com ondas P e S para o estudo do manto superior no Brasil**. Tese (Doutorado em Geofísica) – Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2008.

RODRIGUES, V. H. S. R. **Aplicação da tomografia de tempos de trânsito a dados do Campo de Miranga, Bacia do Recôncavo**. Dissertação (Mestrado em Geofísica) – Instituto de Geociências da Universidade Federal da Bahia, Salvador, 2015.

SCHOTS, H. A. **Tomografia sísmica poço a poço e poço a superfície utilizando ondas diretas**. Dissertação (Mestrado) – Instituto de Geociências da Universidade Federal da Bahia, Salvador, 1990.

SOLER, E. M.; SOUSA, V. A.; COSTA, G. R. M. **A modified Primal–Dual Logarithmic-Barrier Method for solving the Optimal Power Flow problem with discrete and continuous control variables**. European Journal of Operational Research. v. 222, 3, p. 616-622, 2012.

TEIXEIRA, W.; FAIRCHILD, T. R.; TOLEDO, M. C. M.; TAIOLI, F. **Decifrando a Terra**. 2. ed. São Paulo: Ed. Nacional, 2009.

WEIHERMANN, J. D.; OLIVEIRA, S. P.; LI, Y.; FERREIRA, F. J. F. SILVA, A.; FORTIN, R. **A log–barrier approach for airborne gamma-ray spectrometry inversion**. Computers & Geosciences, v. 147, p. 104682, 2021.

WRIGHT, H. M. **Interior methods for constrained optimization**. Acta Numerica, v. 1, p. 341-407, 1992.

APÊNDICE A

Código do programa em MATLAB (R2022a), utilizado para a reconstrução dos modelos através da inversão com barreira logarítmica.

Fonte: Adaptado de BRUFATI *et al.* (2015) e WEIHERMANN *et al.* (2021).

```
clear all;
close all;
%-----
% dados de entrada
tic
M = dlmread('tomographic_matrix.dat');
% coluna 1: linhas da matriz G -> representam i-ésimo raio -> nº observações
% coluna 2: colunas da matriz G -> representam j-ésimo bloco -> nº blocos
% coluna 3: elementos g_ij -> tamanho do percurso percorrido pelo i-ésimo raio até
o j-ésimo bloco

nz = length(M);
nlin = max(M(:,1));
ncol = max(M(:,2));
G = sparse(nlin,ncol);
for i = 1:nz
    G(M(i,1),M(i,2))=M(i,3);
end

writematrix(G, 'g.csv')

% modelo sintético
vec = dlmread('velocity_model.dat');
blx = max(vec(:,1)); %nº de blocos na horizontal x
blz = max(vec(:,2)); %nº de blocos na vertical z
dim = blx*blz;      %nº total de blocos

vtrue = zeros(blz,blx);
vtrue = zeros(dim,1);
k = 0;
for j = 1:blx
    for i = 1:blz
        k = k + 1;
        vtrue(k) = vec(k,3);
        vtrue2D(i,j) = vec(k,3);
    end
end

strue = 1./vtrue;
tobs = G*strue;

% parâmetro de perturbação
alpha = 1e-2;
d = (1+ alpha*(2*rand(nlin,1)-1)).*tobs;

%-----
% cálculo do parâmetro de regularização lambda

WmWm = eye(dim); % Wm^T*Wm
nlb = 50;
lb_min = alpha; % valor inicial para lambda
lb_max = 10^5*alpha; % valor final para lambda
```

```

lb_vec = exp(linspace(log(lb_min),log(lb_max),nlb));

GWG = G'*G;

%nlb = 0%%% use para desativar o calculo do GCV

if (nlb>0) % executa GCV

    for k = 1:nlb
        lambda = lb_vec(k);
        Gpinv = (GWG + lambda*WmWm)\G';
        IG = eye(nlin) - G*Gpinv;
        GCV(k) = (norm(IG*d)/abs(sum(diag(IG))))^2;
    end

    % escolher o mínimo do GCV
    [GCV_opt,iopt]=min(GCV);
    lambda = lb_vec(iopt)

    figure; loglog(lb_vec,GCV,lb_vec(iopt),GCV_opt,'o')

else % carrega valores pré-calculados

    l_preCalc = [1.2068e+03,95.4095,1.4563,0.0176];
    lambda = l_preCalc(round(-log10(alpha)));
end

%-----
% inversão com o método sem restricoes

n_it = ncol*2; % nº máximo de iterações para o método dos gradientes conjugados
tol = 1e-6;

[MLS,Fl,RR,It] = pcg(GWG + lambda*WmWm,G'*d,tol,n_it);

%-----
% inversão com o método da barreira logarítmica

u = 1./1500; % restrição superior (v=1500m/s: velocidade na agua)
ll = 1./8000; % restricao inferior (v=8000m/s: velocidade maxima esperada na
crosta terrestre)
gamma = 0.9; % evita que os valores atinjam as restrições exatamente
max_Ns = 100; % nº máximo de passos do método de Newton
tol_Ns = 1e-5; % tolerância para a diferença entre valores consecutivos

e = ones(dim,1);

m = zeros(dim,1) + u/2; % valor inicial para a vagarosidade

k_Ns = 1; % contador de passos do método de Newton

Gm = G*m;
phi(k_Ns) = (Gm-d)'*(Gm-d) + lambda*m'*WmWm*m; % função objetivo

barr(k_Ns) = -2*sum(log(m/u-ll/u)+log(1-m/u)); % barreira logarítmica

phi0 = -1; % função objetivo passo anterior (para critério de parada)

eta = phi(k_Ns)/barr(k_Ns); % parâmetro de barreira logarítmica

```

```

Eta(k_Ns)=eta;

while(k_Ns < max_Ns)&&(abs(phi(k_Ns)/phi0 - 1) > tol_Ns)

    % derivadas dos termos da barreira logarítmica
    XY1 = diag((m-1l).^(-1) - (u-m).^(-1));
    XY2 = diag((m-1l).^(-2) + (u-m).^(-2));

    G_Ns = G'*G + lambda*WmWm + eta*XY2;           % Hessiana de B
    b_Ns = -G'*(Gm-d) - lambda*WmWm*m + eta*XY1*e; % Gradiente de B
    [ds,Fl,RR,It] = pcg(G_Ns,b_Ns,tol,n_it);

    rho = 1;
    for j = 1:dim
        if ds(j) < 0
            rho = min( rho , (m(j) - 1l)/abs(ds(j)) );
        elseif ds(j) > 0
            rho = min( rho ,(u - m(j))/ds(j) );
        end
    end

    % atualizar variáveis
    m = m + gamma*rho*ds;
    eta = (1 - min(gamma,rho))*eta;
    phi0 = phi(k_Ns);
    k_Ns = k_Ns + 1;

    Gm = G*m;
    phi(k_Ns) = (Gm-d)'*(Gm-d)+ lambda*m'*WmWm*m;
    Eta(k_Ns) = eta;

end

figure; semilogy(1:k_Ns,phi,1:k_Ns,Eta,'--'); legend('\phi','\eta')

%-----
% gráficos

% formata solucoes como matrizes

vest = 1./m;
k = 0;
for j = 1:blx
    for i = 1:blz
        k = k + 1;
        vest2D(i,j) = vest(k);
    end
end

vLS = 1./mLS;
k = 0;
for j = 1:blx
    for i = 1:blz
        k = k + 1;
        vLS2D(i,j) = vLS(k);
    end
end

minv = min([vest;vLS;vtrue]);

```

```

maxv = max([vest;vLS;vtrue]);

hx = 10; hy = 10;
[x,y] = meshgrid(hx*(0:(blx-1)),hy*(0:(blz-1)));

% modelo sintético
figure
colormap(gray)
hold on
for j = 1:blx
    for i = 1:blz
        [xx,yy]=meshgrid([x(i,j),x(i,j)+hx],[y(i,j),y(i,j)+hy]);
        surf(xx,yy,0*xx+vtrue2D(i,j));
    end
end
hold off
set(gca,'YDir','reverse');
set(gca,'XAxisLocation','top');
view(0,90)
caxis([minv,maxv])
set(gca,'FontSize',10)
colorbar
axis([0,200,0,400])
axis image
xlabel('x (m) '); ylabel('z (m) ')

% solução sem restrições
figure
colormap(gray)
hold on
for j = 1:blx
    for i = 1:blz
        [xx,yy]=meshgrid([x(i,j),x(i,j)+hx],[y(i,j),y(i,j)+hy]);
        surf(xx,yy,0*xx+vLS2D(i,j));
    end
end
hold off
set(gca,'YDir','reverse');
set(gca,'XAxisLocation','top');
view(0,90)
caxis([minv,maxv])
set(gca,'FontSize',10)
colorbar
axis([0,200,0,400])
axis image
xlabel('x (m) '); ylabel('z (m) ')

% solução com restrições
figure
colormap(gray)
hold on
for j = 1:blx
    for i = 1:blz
        [xx,yy]=meshgrid([x(i,j),x(i,j)+hx],[y(i,j),y(i,j)+hy]);
        surf(xx,yy,0*xx+vest2D(i,j));
    end
end
hold off
set(gca,'YDir','reverse');

```



```

set(gca,'XAxisLocation','top');
view(0,90)
caxis([minv,maxv])
set(gca,'FontSize',10)
colorbar
axis([0,200,0,400])
axis image
xlabel('x (m) '); ylabel('z (m) ')

% erros (em percentual)

RMSa = 100*norm(d-tobs)/norm(tobs);

RMSt = 100*norm(d-G*mLS)/norm(d);
RMSs = 100*norm(strue-mLS)/norm(strue);
RMSv = 100*norm(vtrue-vLS)/norm(vtrue);

disp(['RMS errors / LS (a,t,v,s): ',num2str([RMSa,RMSt,RMSv,RMSs])]);

RMSt = 100*norm(d-G*m)/norm(d);
RMSs = 100*norm(strue-m)/norm(strue);
RMSv = 100*norm(vtrue-vest)/norm(vtrue);

disp(['RMS errors / Log barr (a,t,v,s): ',num2str([RMSa,RMSt,RMSv,RMSs])]);

```