

Edson Alonso Falla Luza

**Utilização das métricas de Mahalanobis e Euclidiana  
associadas ao problema da árvore mínima como  
estabilizadores do problema inverso gravimétrico 2-D que  
estima o arcabouço de fontes homogêneas.**

Projeto Final de Graduação apresentado ao curso de graduação em Geofísica da Universidade Federal Fluminense, como requisito para a Obtenção do grau de Bacharel em Geofísica.

Universidade Federal Fluminense - UFF  
Departamento de Geologia e Geofísica  
Graduação em Geofísica

Orientador: Rodrigo Bijani

Brasil

29 de novembro de 2019

Edson Alonso Falla Luza

**Utilização das métricas de Mahalanobis e Euclidiana associadas ao problema da árvore mínima como estabilizadores do problema inverso gravimétrico 2-D que estima o arcabouço de fontes homogêneas.**

Projeto Final de Graduação apresentado ao curso de graduação em Geofísica da Universidade Federal Fluminense, como requisito para a Obtenção do grau de Bacharel em Geofísica.

Comitê composto pelos seguintes avaliadores:

---

**Rodrigo Bijani**(Orientador)  
GIECAR - UFF

---

**Cosme F. Ponte Neto**  
ON - MCTIC

---

**Wagner Moreira Lupinacci**  
GIECAR - UFF

---

**Fernando Vizeu Santos**  
GIECAR - UFF

Brasil  
29 de novembro de 2019

# Sumário

	<b>Lista de ilustrações</b>	<b>5</b>
	<b>Lista de tabelas</b>	<b>6</b>
<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>13</b>
<b>2</b>	<b>GRAVIMETRIA</b>	<b>15</b>
2.1	O problema direto gravimétrico 2D	15
2.2	Problema direto para múltiplas fontes pontuais	17
<b>3</b>	<b>INVERSÃO EM GEOFÍSICA</b>	<b>18</b>
3.1	Problema Inverso Gravimétrico 2D	18
3.2	O Problema inverso Geofísico Estabilizado	19
<b>4</b>	<b>TEORIA DOS GRAFOS</b>	<b>21</b>
4.1	Tipos de Grafos	22
4.1.1	Árvores	23
4.2	O MST no problema inverso gravimétrico 2D	24
4.3	A métrica de Mahalanobis	26
<b>5</b>	<b>OTIMIZAÇÃO NUMÉRICA</b>	<b>28</b>
5.1	Algoritmo Genético	28
5.2	Arquitetura e implementação do Algoritmo Genético	29
5.2.1	Função Objetivo Estabilizada	30
5.2.2	Critério de Parada	30
5.2.3	Função de Seleção	30
5.2.4	Função de Cruzamento	30
5.2.5	Função de Mutação	31
5.2.6	Função de Substituição	31
<b>6</b>	<b>RESULTADOS</b>	<b>33</b>
6.1	Modelo de um Dique Vertical	33
6.1.1	Norma L2	33
6.1.1.1	Solução Sub Regularizada ( $\mu = 1 \times 10^{-10}$ )	34
6.1.1.2	Solução Super Regularizada ( $\mu = 1 \times 10^{10}$ )	34
6.1.1.3	Solução Regularizada ( $\mu = 5 \times 10^{-3}$ )	34
6.1.2	Norma de Mahalanobis	35

6.1.2.1	Solução Sub Regularizada ( $\mu = 1 \times 10^{-100}$ ) . . . . .	36
6.1.2.2	Solução Super Regularizada ( $\mu = 1 \times 10^{20}$ ) . . . . .	36
6.1.2.3	Solução Regularizada ( $\mu = 1 \times 10^1$ ) . . . . .	37
<b>6.2</b>	<b>Modelo de um Dique em mergulho . . . . .</b>	<b>38</b>
6.2.1	Norma L2 . . . . .	39
6.2.1.1	Sub Regularizada ( $\mu = 1 \times 10^{-10}$ ) . . . . .	40
6.2.1.2	Super Regularizada ( $\mu = 1 \times 10^{10}$ ) . . . . .	41
6.2.1.3	Regularizada ( $\mu = 1 \times 10^{-3}$ ) . . . . .	42
6.2.2	Norma de Mahalanobis . . . . .	43
6.2.2.1	Sub Regularizada ( $\mu = 1 \times 10^{-20}$ ) . . . . .	43
6.2.2.2	Super Regularizada ( $\mu = 1 \times 10^{10}$ ) . . . . .	44
6.2.2.3	Regularizada ( $\mu = 5 \times 10^1$ ) . . . . .	44
<b>7</b>	<b>CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS . . . . .</b>	<b>47</b>
	<b>REFERÊNCIAS . . . . .</b>	<b>48</b>

# Lista de ilustrações

Figura 1	– Figura esquemática exemplificando os principais elementos geométricos a serem utilizados no modelo. O círculo verde faz menção à fonte de massa $m_j$ em subsuperfície, $\mathbf{r}_i$ e $\mathbf{r}_j$ são os vetores-posição que localizam as coordenadas de observação e a fonte pontual, respectivamente. $P(x_i, z_i)$ é a localização da $i$ -ésima observação e $x_j, z_j$ identifica a posição da $j$ -ésima fonte pontual. . . . .	16
Figura 2	– Exemplo de um grafo no qual $V = \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5\}$ e $E = \{e_1, e_2, e_3, e_4, e_5, e_6\}$ . Esta figura foi retirada de (COSTA, 2011) . . . . .	21
Figura 3	– Exemplo de um grafo sem ciclos retirado de (COSTA, 2011). . . . .	22
Figura 4	– Exemplo de um grafo com 2 ciclos retirado de (GOMES, 2017). . . . .	22
Figura 5	– $C_3$ e $P_5$ . Figura retirada de (COSTA, 2011) . . . . .	23
Figura 6	– $G_1$ é um grafo conexo e $G_2$ é um grafo desconexo com 3 componentes conexas. Figura retirada de (COSTA, 2011) . . . . .	23
Figura 7	– Uma floresta com 3 árvores. Esta figura foi retirada de (ABREU et al., 2014) . . . . .	23
Figura 8	– Uma árvore geradora de um grafo. . . . .	24
Figura 9	– (a) Esquema de um grafo não orientado composto por $M = 5$ fontes pontuais (pontos pretos enumerados de 1 a 5). As linhas que conectam os pontos de massa são as arestas do grafo. Cada aresta possui um distância, que é representada por $d_{12}, d_{13}, d_{14}, \dots, d_{45}$ . (b) Após aplicar o algoritmo de Kruskal para encontrar a MST. O conjunto de arestas em negrito representam as arestas que formam o MST. As arestas escolhidas são armazenadas no vetor $\mathbf{d}^{MST}$ (BIJANI et al., 2015). . . . .	25
Figura 10	– Arquitetura do Algoritmo Genético utilizado neste trabalho . . . . .	29
Figura 11	– Figura referente à norma L2 e $\mu = 1 \times 10^{-10}$ mostrando como a solução sem função de estabilização é ambígua, mesmo que o erro entre $g_{z_{obs}}$ e $g_{z_{calc}}$ tenha sido quase que 0. . . . .	35
Figura 12	– Figura referente à norma L2 e $\mu = 1 \times 10^{10}$ mostrando como a estabilização utilizando a norma L2 favorece soluções que colapsam no centroide da nuvem de pontos. . . . .	36
Figura 13	– Figura referente à norma L2 e $\mu = 5 \times 10^{-3}$ mostrando como para o fator de estabilização correto, a inversão não só consegue encontrar o arcabouço do modelo, mas também ajustar a curva de $g_z$ . . . . .	37

Figura 14 – Figura referente à norma de Mahalanobis e $\mu = 1 \times 10^{-100}$ mostrando em (c) como a convergência da função $\theta(p)$ não ocorreu, por isso a figura (b) mostra um bom ajuste da curva mas ainda obtendo 2 corpos isolados como solução. . . . .	38
Figura 15 – Figura referente à norma de Mahalanobis e $\mu = 1 \times 1020$ mostrando como a norma de mahalanobis não leva em conta os centroides da nuvem de pontos, por isso a solução mostrada em (b) é longe de ser boa, ainda que a figura (c) mostre claramente que função $\theta(p)$ foi otimizada. . . . .	39
Figura 16 – Figura referente à norma de Mahalanobis e $\mu = 1 \times 10^1$ mostrando que a norma de mahalanobis conseguiu inverter o eixo preferencial do modelo, assim como o eixo de simetria (b) e diminuir o erro pra perto de 0 (d) . . . . .	40
Figura 17 – Figura referente à norma L2 e $\mu = 1 \times 10^{-10}$ mostrando como a curva de $g_z$ foi ajustada, mas o modelo invertido foi totalmente distinto do verdadeiro, devido a falta de estabilização. . . . .	41
Figura 18 – Figura referente à norma L2 e $\mu = 1 \times 10^{10}$ mostrando como o algoritmo e a norma L2 foram capazes de aproximar bem o centro de massa do modelo, porém o resíduo entre as curvas de $g_z$ não foi ajustado. . . . .	42
Figura 19 – Figura referente à norma L2 e $\mu = 1 \times 10^{-3}$ mostrando como o fator ótimo de $\mu$ conseguiu recuperar não somente a forma do corpo em subsuperfície, mas também ajustara curva da anomalia gravimétrica. . . . .	43
Figura 20 – Figura referente à norma de Mahalanobis e $\mu = 1 \times 10^{-20}$ mostrando como a norma de mahalanobis foi capaz de ajustar melhor a curva de $g_z$ que a norma L2, ainda que no problema subregularizado. . . . .	44
Figura 21 – Figura referente à norma de Mahalanobis e $\mu = 1 \times 10^{10}$ , mostrando como o resíduo foi ajustado até certo ponto, porém o esqueleto do modelo não pôde ser recuperado. . . . .	45
Figura 22 – Figura referente à norma de Mahalanobis e $\mu = 5 \times 10^1$ mostrando como a inversão regularizada por esta norma foi capaz de recuperar o mergulho do modelo, ainda que abrindo problemas de interpretações para mais de um corpo em subsuperfície. . . . .	46

## Lista de tabelas

Tabela 1 – Tabela mostrando os parâmetros do algoritmo genético para o modelo de um prisma vertical. . . . .	33
Tabela 2 – Tabela mostrando o espaço de busca dos parâmetros para a inversão do modelo do prisma vertical. . . . .	34

---

Tabela 3 – Tabela mostrando os parâmetros dos prismas utilizados para cria o modelo de uma escada. . . . . 39

Tabela 4 – Tabela mostrando os parâmetros do Algoritmo Genético para o modelo de uma escada. . . . . 40

Tabela 5 – Tabela mostrando o espaço de busca dos parâmetros para a inversão. . 41

# Agradecimentos

Aproveito as primeiras linhas para agradecer à instituição que me acolheu durante estes últimos 5 anos. Toda a diversidade de pensamentos e condições, que se pode presenciar apenas numa universidade pública, me fez crescer como ser humano. Agradeço também aos funcionários, pois sem eles a faculdade não teria sido tão acolhedora.

Primeiramente, gostaria de agradecer ao professor Rodrigo Bijani, meu orientador. Por ter aceito me orientar. Mesmo a minha proposta sendo tão inusual e complicada, ele aceitou a árdua tarefa de me guiar neste caminho. Por ter me ajudado não só na construção da monografia, mas também na minha construção como pessoa. Pelas conversas aleatórias e divertidas na sua sala e pela sua disponibilidade de me tirar dúvidas sempre que eu precisava. Obrigado por ser um grande orientador e amigo. Quero agradecer também à banca, professor Wagner Lupinacci, Fernando Vizeu e Cosme Ferreira, por aceitar ler e corrigir um trabalho nada usual.

Ao professor Luiz Alberto, pelos bate papo nos corredores do Geociências sobre programação e tomografia sísmica. Ao professor Fernando Freire, por fazer os últimos 2 anos da minha graduação os mais produtivos. Por me ajudar a conhecer outras área da Geofísica e sempre acreditar que eu era capaz de tudo. Por ser uma pilastre central no crescimento da Geofísica UFF.

A minha panela VBB, que foram sempre um dos motivos principais pelos quais eu acordava cedo com vontade de ir para a faculdade. Por todas as viagens, sejam de campo ou não, e as festinhas. Pela amizade e apoio que me deram. Com certeza a UFF não teria sido a mesma sem vocês.

A minha outra panela Tralhas Online que, apesar de ter conhecido há pouco tempo, são com certeza parte da minha felicidade diária. Obrigado pelos momentos de diversão e descontração que me proporcionaram. Não consigo imaginar a minha vida sem a amizade de vocês. A minha panela principal e mais querida Panela dentro da Panela. Não sei o que seria de mim sem vocês. Como é impossível um parágrafo para agradecer a vocês, cada um vai ganhar o seu próprio.

A Natacha, rainha de Nilópolis. Mais do que uma amiga, uma mãe nessa faculdade. Sempre cuidando de mim e me ensinando a ser uma pessoa melhor. Por me ensinar tanto sobre o mundo e sobre a vida. Por sempre me incentivar a acreditar que eu consigo o que eu quiser. As suas palavras sempre foram uma fonte de força para mim.

A Thaisa, rainha de São Gonçalo e do Crossfit. Por me ensinar a ter persistência em todo momento. Por sempre me fazer rir com as suas histórias e pelos, muito raros mesmo, abraços, sei que foram difíceis pra você. Obrigado, pois me ajudaram muito. Você vai conquistar o mundo todo, eu não tenho dúvida.

A Hellen, rainha de Nova Friburgo e do drama. Por sempre estar disposta a ouvir e aconselhar. Por sempre estar feliz e me ensinar a viver a vida de forma intensa. Obrigado por sempre me fazer sorrir com seu jeito especial. Você faz o mundo ao seu redor um lugar mais alegre.

Ao Rômulo, rei. Simplesmente rei. Obrigado pelos anos de amizades, conselhos e áudios de 6 minutos. Por me ensinar que a vida deve ser vivida de forma positiva, com a cabeça bem alta e sem se preocupar com o que outros pensem de você. Por me ensinar tanta coisa que nem caberia neste texto. Você merece tudo de bom que existe neste mundo, irmão.

À Maria Luiza, rainha de Saquarema. Por esse jeito louco e engraçado de ver a vida. Com certeza você me ajudou a superar muitas dificuldades com o seu ponto de vista sobre as coisas. Obrigado por passar por quase todo perrengue comigo, e por me ajudar a superá-los também. Um metro e meio de muita loucura e alegria que com certeza quero levar pra vida toda.

Aos meus amigos da matemática, por todas as conversas na frente do quadro de giz e nas salas de café do IMPA. Pelas noites nos bares da Tijuca conversando sobre assuntos tão absurdos como o fato de existirmos de verdade e o que é existência. Vocês fazem o mundo um lugar mais divertido.

Aos meus amigos da escola, obrigado por me mostrar que a amizade verdadeira resiste ao tempo e a distância

Aos meus bichinhos, Aline e Paulinho. Por sempre me receber em casa com carinho e lambidas. Porque não importa o quão cansativo o dia tenha sido, eu sempre pude contar com os dois para tornar minha estadia em casa a mais alegre possível.

À Beatriz Soto Miguez, cuja existência alegre todos os meus dias e me dá forças para encarar o mundo. Pela sua paciência e amor quando eu mais precisei. Pelo seu companheirismo, e nunca me deixar sentir sozinho. Por irradiar alegria e entusiasmo como uma criança ao ver algo pela primeira vez. Por me ensinar que viver é se superar a cada dia, e superar os obstáculos que a própria vida nos coloca na frente. Obrigado por compartilhar a sua vida comigo, obrigado por alegrar todas as minhas manhãs com suas mensagens de bom dia, obrigado por ser meu porto seguro e por todo o seu amor. Você é meu mundo e minha primavera.

À minha mãe, por todo o esforço que ela fez para que eu pudesse conquistar meus sonhos. Por todas as vezes que acordou de madrugada pra que eu não tivesse que fazer isso e pudesse dormir mais um pouco. Por todas as vezes que a vida pensou em me derrubar e ela se enfiou no meio para me proteger. Por me ensinar independência e perseverança. Por vibrar com cada conquista minha, e me dar força para continuar caminhando sempre. Por ser uma mulher que me ensinou o verdadeiro significado de força. Obrigado por me dar a vida e me ensinar a vivê-la.

À Carolina Parra, pois com certeza é uma pessoa muito importante na minha vida. Por todas as vezes que me ajudou não só na escola, mas na faculdade e na vida. Por todas

as vezes que recomendou um filme, e que gosto bom pra filmes! Uma menção honrosa ao Andy e Tony, seus filhotes cachorrinhos, que trazem alegria para a vida de todos que os conhecem.

Ao Maycol, meu irmão. Palavras nunca serão suficientes para expressar tudo a gratidão que tenho por ele. Por sempre me colocar em primeiro lugar, mesmo que isso significasse sacrifícios. Por todas as vezes que fomos ao Maracanã torcer pelo Flamengo e voltamos andando até em casa cantando junto com a torcida. Por todas as vezes que me aconselhou quando eu não sabia o que fazer. Ele é, com certeza, a minha maior inspiração como ser humano. É a pessoa que eu mais admiro no mundo, e eu nunca irei coseguir agradecê-lo suficientemente, mas sempre irei tentar. Obrigado por todas as viagens, todas as conversas, todas as cervejas, todos os abraços, todos os conselhos. Obrigado por acreditar tanto em mim e me ensinar tanto. Obrigado por nunca desistir de mim e me ajudar a conquistar meus sonhos. Obrigado por ser um alicerce na minha vida. Obrigado por ser meu melhor amigo e meu melhor mentor.

Por último, obrigado a todas as pessoas que fizeram parte da minha vida. À minha família no Peru, aos que se foram, incluindo meus antigos bichinhos, mas de algum jeito influenciaram na minha vida de forma positiva. Obrigado a todos que fizeram parte da minha vida, eu só dou os meus passos graças a vocês.

## Resumo

Problemas inversos geofísicos são, na sua grande maioria, mal postos. Seja pela instabilidade das soluções, ou pela não unicidade das mesmas. Uma das alternativas para contornar este entrave é através dos regularizadores e estabilizadores, que são ferramentas matemáticas incorporadas ao funcional minimizante. Através do conhecimento geológico prévio do local de estudo, pode ser interessante a utilização de diferentes funcionais estabilizantes, as quais favorecem soluções específicas. [Bijani et al. \(2015\)](#) propuseram um novo estabilizador, chamado de função de equidistância, para o problema inverso gravimétrico 3-D que estima o excesso de massa e o arcabouço de fontes homogêneas por meio de um conjunto de fontes pontuais com igual excesso massa. Este estabilizador baseia-se em resolver o problema da árvore geradora de custo mínimo (*Minimum Spanning Tree*, em inglês) e tem como objetivo homogeneizar a distribuição espacial das fontes pontuais de massa, atribuindo-lhes conexidade por meio da métrica Euclidiana. Neste trabalho implementamos e validamos o referido estabilizador, em linguagem Python, para o problema inverso 2-D similar. Além disso, é proposta uma alternativa à função de estabilização, baseada em uma norma distinta, chamada na literatura de norma de Mahalanobis, que baseia-se na covariância da distribuição espacial de fontes pontuais. Desta forma, podemos investigar se a referida norma privilegia as estimativas que possuam direções preferenciais, como por exemplo, fontes em mergulho ou de formato elíptico. Para solucionar este problema inverso estabilizado, utilizamos a otimização estocástica, por meio da implementação do algoritmo genético (AG) mono-objetivo, também em linguagem Python. A implementação é realizada aproveitando as existências de funções do Python pré-definidas para computação científica, assim como a criação de nossas próprias funções. Testes em dois conjuntos de dados sintéticos ruidosos foram executados para diferentes valores do parâmetro de regularização a fim de verificar a eficácia dos distintos estabilizadores. As estimativas obtidas mostram que a função de equidistância realmente impõe compacidade ao conjunto de fontes pontuais, fato contrastante quando a função de estabilização é baseada na métrica de Mahalanobis. Adicionalmente, pode-se observar que as estimativas iniciais sortadas dentro do espaço de busca não comprometeram as soluções obtidas pelo AG, fato inerente aos métodos estocásticos.

**Palavras-chave:** Inversão gravimétrica, Algoritmo Genético, Teoria dos Grafos, Estabilização

# Abstract

Inverse geophysical problems are mostly ill-posed due to the instability of solutions, or the non uniqueness of them. One way to solve this is through regularization and stabilizers, which are mathematical functions incorporated into the goal function. Through prior geological knowledge of the study area, it might be preferable to use different metrics, which favor specific solutions. [Bijani et al. \(2015\)](#) proposed a new stabilizer, called the equidistance function, for the 3-D gravity inverse problem that estimates the excess of mass and the framework of homogeneous sources by a set of identical point masses. This stabilizer solves the Minimum Spanning Tree problem and aims to homogenize the spatial distribution of point masses. The Euclidean norm is considered to impose connectivity to the set of point masses. In this work we implement and validate, in Python language, the equidistance function for a similar 2-D gravity inverse problem. In addition, an alternative stabilizing function, based on Mahalanobis distance, is proposed. In this way, we can investigate whether this norm favors estimates that have preferential directions, such as dipping or elliptical sources. To solve this stabilized inverse problem, we implement the mono-objective Genetic Algorithm (AG), also in Python language. The implementation is accomplished by taking advantage of Python's predefined internal functions for scientific programming, and also creating our own functions. Tests on two noisy synthetic data sets are performed for different regularizing parameters in order to verify the effectiveness of both stabilizers. The obtained estimates show that the equidistance function imposes compactness to the set of point sources, which is not the case when the stabilizer is based on Mahalanobis distance. Additionally, it can be observed that the initial estimates randomly defined within the search space did not compromise the solutions obtained by the GA, a fact inherent to stochastic methods.

**Keywords:** Gravity inversion, Genetic Algorithm, Graph Theory, Stabilization

# 1 Introdução

A Geofísica é a ciência que estuda os fenômenos físicos relacionados aos planetas, principalmente à Terra (KEAREY; BROOKS; HILL, 2013). Os métodos geofísicos são aplicações diretas da teoria geofísica (TELFORD, 1990), como por exemplo o método eletromagnético, que é derivado diretamente das equações de **Maxwell** aplicadas ao campo eletromagnético da Terra (COGGON, 1971). Outro exemplo é o método sísmico, baseado nas equações diferenciais parciais que modelam o comportamento de ondas em meios acústicos e elásticos, o qual nos ajuda a entender a subsuperfície com destacada resolução (WHITE, 1983). Há também o método gravimétrico, baseado na análise vetorial e na teoria das funções harmônicas aplicadas ao campo gravitacional da Terra, afim de estudar variação lateral de densidade das rochas em subsuperfície (BLAKELY, 1996). Seja qual for o método, uma etapa crucial e muito importante do fluxo de trabalho para um geofísico é a etapa de inversão. Esta é uma área da matemática, mais especificamente da Análise Matemática, que têm como objetivo estimar os parâmetros de uma função que parametriza uma superfície diferenciável específica (TARANTOLA, 2005). A inversão geofísica refere-se à aplicação de técnicas matemáticas no dado geofísico, com o objetivo de recuperar informações físicas de subsuperfície (ZHDANOV, 2015). A definição geofísica pode parecer um pouco diferente da matemática, mas ficará claro adiante no capítulo 3 a equivalência de ambas definições. Problemas inversos geofísicos são, na sua grande maioria, mal postos. Seja pela instabilidade das soluções, ou pela não unicidade destas (BACKUS; GILBERT, 1967). Uma das formas de resolver isso é através de regularizadores e estabilizadores, ferramentas matemáticas que são incorporadas à função de minimização. Assim, estudos têm sido feitos afim de propor e validar novos estabilizadores e regularizadores aos problemas inversos geofísicos. Por exemplo, Tikhonov e Arsenin (1977) propuseram uma forma de tornar o problema mal posto em bem posto, solucionando os 3 assinaturas de instabilidade. O regularizador de Tikhonov é um dos mais utilizados ainda hoje em dia, devido à sua fácil implementação e baixo custo computacional. Alguns anos depois, Backus e Gilbert (1967) propuseram uma nova abordagem, um novo regularizador. Utilizados em muitos problemas inversos sísmicos, o regularizador de Backus-Gilbert impõe uma grande estabilidade às soluções do problema, algo extremamente importante para modelos de equações diferenciais parciais. Em 2015, Bijani et al. (2015) propuseram um novo estabilizador para o problema de inversão gravimétrica 3-D que estima o arcabouço de massa de fontes homogêneas. Este estabilizador baseia-se na teoria dos grafos e na resolução do problema da árvore mínima e tem como objetivo estabilizar e unificar as soluções do problema inverso 3D. A teoria dos grafos é um ramo da matemática que estuda as relações entre os objetos de um determinado conjunto. Para tal são empregadas estruturas chamadas de grafos,

$\mathbf{G}(\mathbf{V},\mathbf{E})$ , onde  $\mathbf{V}$  é um conjunto não vazio de objetos denominados vértices (ou nós) e  $\mathbf{E}$  (do inglês Edges - arestas) é um subconjunto de pares não ordenados de  $\mathbf{V}$  (COSTA, 2011). Derivada desse belo ramo da matemática, surge a MST (do inglês *Minimum Spanning tree* - Árvore de espalhamento mínimo), que nos ajudará a estabilizar as soluções encontradas, utilizando uma otimização estocástica meta-heurística.

O objetivo deste trabalho é implementar e validar o estabilizador proposto por Bijani et al. (2015), em linguagem Python, para um problema inverso 2-D similar. Além disso, será proposta outra métrica para a função de estabilização original, chamada de métrica de Mahalanobis (LIMA, 1983). Esta, em contraste com a norma Euclidiana, considera a matriz de covariância inversa das coordenadas Cartesianas 2-D do conjunto de fontes pontuais, o que favorece a estimativa de soluções que priorizem uma direção específica. Dessa forma, podemos analisar o que cada métrica oferece em termos de estabilidade do problema. A implementação será feita aproveitando a existências de funções do Python pré-definidas para computação científica, assim como a criação de nossas próprias funções. A validação será feita através de testes sintéticos, implementados em Python, que simulam anomalias gravimétricas produzidas por fontes simples, como um dique vertical e oblíquo.

Inicialmente, apresenta-se o problema direto gravimétrico bidimensional, que consiste no cálculo da componente vertical da atração gravitacional ( $g_z$ ) produzida por fontes pontuais de massa. Em seguida, definimos o problema inverso de estimar a distribuição espacial e o excesso de massa das respectivas fontes. Por se tratar de um problema mal posto, discussões sobre estabilização de problemas inversos são apresentadas, dando luz ao critério de estabilização proposto por Bijani et al. (2015), que é apresentado neste trabalho. Adicionalmente, a introdução da métrica de Mahalanobis à função de estabilização é considerada. Afim de proporcionar para o leitor um melhor entendimento sobre o estabilizador aqui estudado, adentramos brevemente na teoria dos grafos, mostrando alguns exemplos que servem de alicerce para a estabilização do nosso problema. Além disso, discutimos as aplicações desta teoria para o objetivo deste trabalho, introduzindo e explicitando o problema do MST na estimativa de soluções únicas e significativas. Logo após, apresentamos de forma superficial o conceito de algoritmos de otimização determinística e estocástica, de forma a justificar a escolha do Algoritmo Genético (AG) para perfomar a nossa inversão. Por fim, apresentamos os resultados obtidos, discutindo, analisando e elucidando os aspectos principais da métrica de Mahalanobis no estabilizador.

## 2 Gravimetria

A Gravimetria é a subárea da geofísica encarregada em estudar variações laterais na densidade das rochas em subsuperfície (KEAREY; BROOKS; HILL, 2013). Ela faz parte dos Métodos Potenciais, uma área da física-matemática cujo objetivo é estudar campos vetoriais mensuráveis que sejam conservativos (BLAKELY, 1996). Ao longo deste capítulo, o leitor será convidado a conhecer o a formulação matemática do problema direto a ser considerado e como é possível calcular dados a partir da proposta de parametrização da subsuperfície adotada aqui.

### 2.1 O problema direto gravimétrico 2D

Seja uma fonte pontual de massa  $m_j$ , cujas coordenadas Cartesianas são representadas por  $(x_j, z_j)$ , conforme observado na Figura 1. Pela lei da gravitação Universal de Newton, sabemos que a vetor campo gravitacional  $\mathbf{g}$ , produzido pela referida fonte em um ponto de observação  $(x_i, z_i)$  é dado por:

$$\mathbf{g}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = -\gamma \frac{m_j}{\|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|^2} \quad (2.1)$$

em que:

- $\gamma$  é a constante Universal da gravitação cujo valor no SI é  $6,67 \times 10^{-11} \frac{Nm^2}{Kg^2}$  ;
- $m_j$  é o excesso de massa da fonte pontual em  $kg$ ;
- $\mathbf{r}_i$  é o vetor-posição que identifica a posição da  $i$ -ésima observação;
- $\mathbf{r}_j$  é o vetor-posição que localiza a posição da  $j$ -ésima fonte pontual;

É importante salientar que neste texto, todas as grandezas vetoriais são representadas por letras em negrito. Neste trabalho, utilizaremos somente a componente vertical da atração gravitacional, notada por  $g_z$ . Como sabemos, a referida componente gravitacional é uma ótima aproximação à anomalia Bouguer que é comumente utilizada em interpretação Geofísica (BLAKELY, 1996; KEAREY; BROOKS; HILL, 2013). Para obtermos  $g_z$ , devemos fazer a projeção vetorial do campo gravitacional (i.e., Equação 2.1) na direção vertical  $z$ :

$$g_z = \langle \mathbf{g}(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{z}} \rangle. \quad (2.2)$$

Vale salientar que o símbolo  $\langle \ \rangle$  apresentado na Equação 2.2 indica produto interno, ou escalar, e basicamente representa a parcela do vetor campo gravitacional que está sobre a

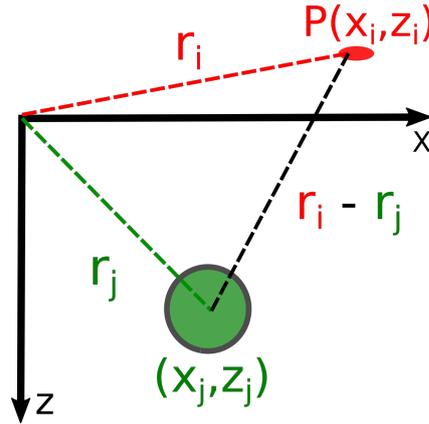


Figura 1 – Figura esquemática exemplificando os principais elementos geométricos a serem utilizados no modelo. O círculo verde faz menção à fonte de massa  $m_j$  em subsuperfície,  $\mathbf{r}_i$  e  $\mathbf{r}_j$  são os vetores-posição que localizam as coordenadas de observação e a fonte pontual, respectivamente.  $P(x_i, z_i)$  é a localização da  $i$ -ésima observação e  $x_j, z_j$  identifica a posição da  $j$ -ésima fonte pontual.

direção vertical. Seguindo um pouco mais em nossa demonstração e suprimindo os índices  $i$  e  $j$  para simplificar a notação, tem-se:

$$g_z = \left\langle -\gamma \frac{m_j}{\|\mathbf{r}\|^2} \hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{z}} \right\rangle. \quad (2.3)$$

Como sabemos, para o caso bidimensional aqui tratado, o versor radial  $\hat{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{\|\mathbf{r}\|}$ , em que  $\mathbf{r} = x \hat{\mathbf{x}} + z \hat{\mathbf{z}}$  e  $\|\mathbf{r}\| = \sqrt{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r} \rangle} = \sqrt{x^2 + z^2} = r$ . Dessa forma:

$$g_z = \frac{1}{r} \left\langle -\gamma \frac{m_j}{r^2} x \hat{\mathbf{x}} + -\gamma \frac{m_j}{r^2} z \hat{\mathbf{z}}, \hat{\mathbf{z}} \right\rangle \quad (2.4)$$

Da algebra linear, sabemos que o conjunto de versores Cartesianos  $\{\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{z}}\}$  formam uma base ortonormal. Assim, a componente vertical da atração gravitacional pode ser computada:

$$g_z = -\gamma \frac{m_j}{r^2} \frac{z}{r}. \quad (2.5)$$

A simetria Cartesiana associada à um campo vetorial puramente radial, como o caso do campo gravitacional permite facilmente que o leitor verifique que as demais componentes gravitacionais são:

$$g_x = -\gamma \frac{m_j}{r^2} \frac{x}{r}, \quad g_y = -\gamma \frac{m_j}{r^2} \frac{y}{r}. \quad (2.6)$$

Voltando com os índices  $i$  e  $j$  para identificação das posições de observação e da fonte causadora e escrevendo os vetores-posição já no sistema Cartesiano de coordenadas, chegamos finalmente à componente vertical da atração gravitacional produzida por uma única fonte de massa pontual:

$$g_z(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = -\gamma \frac{m_j (z_i - z_j)}{[(x_i - x_j)^2 + (z_i - z_j)^2]^{3/2}}. \quad (2.7)$$

A Equação 2.7 exibe o aspecto linear da relação entre o excesso de massa e aceleração gravitacional, além da relação fortemente não linear entre  $g_z$  e as coordenadas da fonte e observação.

## 2.2 Problema direto para múltiplas fontes pontuais

Imagine agora que, ao invés de uma única fonte pontual, deseja-se calcular  $g_z$  produzida por um conjunto de  $M$  fontes pontuais, todas com igual valor de excesso de massa  $m$ . Para que esse cálculo seja possível, basta realizar o somatório da Equação 2.7 para  $M$  fontes pontuais ao longo de  $N$  coordenadas de observação:

$$\mathbf{g}_z = \sum_{j=1}^M g_z(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j), i = 1, 2, \dots, N, \quad (2.8)$$

recordando que  $N$  e  $M$  são o número de observações e fontes pontuais, respectivamente. Os índices  $j$  e  $i$  controlam a posição da  $j$ -ésima fonte pontual em relação à  $i$ -ésima coordenada de observação, respectivamente. A Equação 2.8 pode ser considerada, sem qualquer perda de generalidade, devido ao princípio da superposição. Da álgebra Linear, recorde-se que se  $V$  e  $W$  são espaços vetoriais e  $T : V \rightarrow W$  uma transformação linear, então, por definição  $T(u + v) = T(u) + T(v) \quad \forall u, v \in V$  (LIMA, 2006). Este é o chamado, na física, princípio da superposição. Para o problema gravimétrico em discussão neste trabalho,  $V = \mathbb{R}^2$ ,  $W = \mathbb{R}$  e  $T = \mathbf{g}$ . Isto quer dizer que, dado um conjunto de pontos  $M = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_M, y_M)\} \in \mathbb{R}^2$ , o campo gravitacional num ponto  $P$  de coordenadas  $(x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2$   $\mathbf{g}$  gerado por todos os pontos em  $M$ , pode ser calculado simplesmente pela Equação 2.8.

Além da relativa facilidade com que a Equação 2.8 pode ser implementada computacionalmente, esta ainda é uma alternativa às abordagens usuais para modelagem direta gravimétrica, na qual a subsuperfície é representada por um número finito de prismas justapostos, como no trabalho de Uieda e Barbosa (2012). Vale reforçar que nesta trabalho, assim como no trabalho original de Bijani et al. (2015), as massas das fontes pontuais equivalem ao excesso ou ausência de massa em relação às áreas vizinhas.

## 3 Inversão em geofísica

Neste capítulo vamos apresentar alguns conceitos primordiais para o melhor entendimento da teoria da inversão aplicada à Geofísica. Adicionalmente, apresentaremos brevemente a formulação matemática do problema inverso gravimétrico bidimensional aqui tratado, destacando especialmente as dificuldades e a inerente falta de unicidade deste tipo de problema.

Como dito no capítulo 1, a inversão sob o ponto de vista puramente matemático, têm como objetivo estimar os parâmetros de uma função  $\phi(\mathbf{p})$  que parametriza uma superfície diferenciável específica (TARANTOLA, 2005).

Na Geofísica, não estamos interessando na superfície em si, apenas queremos que ela contenha os nossos dados observados. Assim, chamamos de **Espaço dos dados** a superfície, não importando qual seja, que contém os dados observados. E chamamos de **Espaço dos parâmetros** o espaço Euclidiano que é o domínio da função de parametrização  $\phi(\mathbf{p})$  (SCALES; SMITH; TREITEL, 1994). Podemos definir então, mais formalmente, um problema inverso geofísico como sendo um problema de otimização, onde queremos encontrar os parâmetros ótimos  $\mathbf{p}^*$ , de forma que  $\phi(\mathbf{p}^*) = \mathbf{Espaço\ dos\ dados}$ . De fato, como dito antes, não estamos interessados na superfície em si, apenas queremos que os nossos dados observados estejam nela. Assim, se estimarmos o vetor de parâmetros  $\mathbf{p}$  que minimiza a função do ajuste <sup>1</sup> (i.e.,  $|d(\mathbf{p}) - d_{obs}|_N$ ), em que  $d(\mathbf{p})$  é uma função que coincide com  $\phi(\mathbf{p})$  nos dados observados e  $| \cdot |_N$  é uma distância no **Espaço dos Dados**, então a superfície parametrizada por  $d(\mathbf{p}^*)$  com certeza contém todos os dados observados, conforme desejado.

### 3.1 Problema Inverso Gravimétrico 2D

Seja  $\mathbf{g}_z^{obs}$  seja um vetor contendo  $N$  observações da componente vertical da atração gravitacional. Essa resposta gravimétrica é devido a uma fonte causadora em subsuperfície, da qual nada se sabe. Buscando extrair mais informações sobre a referida fonte, propomos aqui que a subsuperfície seja representada por um conjunto de  $M$  fontes de massa, todas com idêntico valor de excesso de massa  $m_j$ . Cada uma das fontes esta localizada por um par específico de coordenadas  $(x_j, z_j)$ . Podemos então definir o vetor de parâmetros do nosso problema da seguinte forma:

$$\mathbf{p}_j = (x_j, z_j), \quad j = 1, \dots, M \quad . \quad (3.1)$$

<sup>1</sup> Função que calcula a métrica entre dados observados e preditos, muitas vezes via métrica Euclidiana

Portanto, o problema inverso consiste em estimar a distribuição espacial bidimensional do conjunto de  $M$  fontes pontuais e também o excesso de massa total (i.e.,  $m = \sum_{j=1}^M m_j$ ) que melhor se ajustem ao vetor de dados observados  $\mathbf{g}_z^{obs}$  no sentido dos mínimos quadrados. Para tal, podemos definir a seguinte função objetivo estabilizada:

$$\Gamma(m, \mathbf{p}) = \phi(m, \mathbf{p}) + \mu \theta(\mathbf{p}), \quad (3.2)$$

em que a primeira parcela representa a função do ajuste dos dados, também chamada de *data misfit*, que pode ser escrita como:

$$\phi(m, \mathbf{p}) = \|\mathbf{g}_z^{obs} - \mathbf{g}_z(m, \mathbf{p})\|^2, \quad (3.3)$$

em que o símbolo  $\|\cdot\|^2$  representa a norma L2 ou Euclidiana e  $\mathbf{g}_z(m, \mathbf{p})$  é vetor de dados preditos, que neste caso é a componente vertical da atração gravitacional predita pela Equação 2.8. Podemos analisar a Equação 3.3 como a diferença entre os dados observado e predito para cada posição de observação. O objetivo central nesta etapa consiste em estimar o excesso de massa  $m$  e as coordenadas Cartesinas bidimensionais  $(x_j, z_j)$ , armazenadas no vetor de parâmetros  $\mathbf{p}$ , de cada uma das  $M$  fontes pontuais, de forma a minimizar a função objetivo representada pela Equação 3.2. Portanto, estamos aproximando uma fonte causadora por um conjunto de fontes pontuais cujas coordenadas e excesso de massa são totalmente conhecidos. No entanto, como pode ser observado, a Equação 3.2 possui ainda um segundo termo composto por  $\mu$ , que é o parâmetro de regularização e tem o papel de controlar a importância relativa entre a função do ajuste e a de estabilização durante o processo de minimização (BOSCHETTI; MORESI, 2001). Existem diversos trabalhos que visam encontrar o parâmetro de regularização ideal durante o processo de otimização (TIKHONOV; ARSENIN, 1977; FARQUHARSON; OLDENBURG, 2004). Há, ainda, outros que nulificam o uso do  $\mu$ , dando origem à frente de Pareto (BIJANI et al., 2017; SCHNAIDT et al., 2018; AYANI; MACGREGOR; MALLICK, 2019) Neste trabalho, diferentes fatores regularização  $\mu$ , baseados inicialmente nos obtidos por Bijani et al. (2015), foram considerados a fim de verificar a relevância da função de estabilização nas estimativas da distribuição de fontes pontuais em subsuperfície.

Já  $\theta(\mathbf{p})$  é a função de estabilização, de fundamental importância em nosso contexto, cujos detalhes serão tratados nas próximas seções.

## 3.2 O Problema inverso Geofísico Estabilizado

A grande maioria dos problemas inversos em Geofísica são considerados mal postos ou ambíguos (PARKER, 1977). Isso significa que podem sofrer dos seguintes casos:

- Não existe solução;

Ocorre quando o vetor de parâmetros não pode ser obtido, especialmente quando a estimativa do vetor de parâmetros recai sobre a resolução de um sistema linear indeterminado (TARANTOLA, 2005). Este nível de detalhamento não será tratado neste documento;

- A solução existe mas não é única;

O problema surge no momento em que não há garantias de que exista apenas um vetor de parâmetros  $\mathbf{p}$  ótimo. Isto é, existem diversos vetores de parâmetros  $\mathbf{p}$  que minimizem a função do ajuste (i.e., Equação 3.3) adequadamente;

- A solução é instável;

Qualquer pequena alteração na configuração inicial do problema (ou seja, introdução de ruídos aos dados observados ou pequenas variações nas estimativas iniciais) acarreta em uma estimativa de  $\mathbf{p}$  completamente diferente da anterior (TARANTOLA, 2005). Dessa forma, podemos dizer que pequenas variações dos dados implicam em grandes variações nos parâmetros estimados (BLAKELY, 1996).

Caso contrário, dizemos que o problema é **bem posto**. Portanto, para tornar um problema inverso estável, precisamos nos apoiar nas chamadas funções de regularização ou estabilização. Pode-se dizer que uma função qualquer atua como um estabilizador se, ao incorporada a um problema inverso, este torna-se bem posto (TIKHONOV; ARSENIN, 1977).

Ao longo dos anos, muitos métodos de estabilização tem sido criados e testados. Nos problemas inversos Geofísicos, podemos citar os trabalhos pioneiros de (BACKUS; GILBERT, 1967; TIKHONOV; ARSENIN, 1977; HANSEN, 1987). Cada função de estabilização introduz uma característica específica ao vetor de parâmetros estimado e, na maioria dos casos, compete com a otimização da função do ajuste (TIKHONOV; ARSENIN, 1977; TARANTOLA, 2005; ZHDANOV, 2015). Recentemente, Bijani et al. (2015) propuseram um estabilizador alternativo, chamado de função de equidistância (a função  $\theta(\mathbf{p})$  introduzida na Equação 3.2), baseado no problema da árvore espalhada de custo mínimo (*Minimum Spanning Tree*, em inglês), denotado por MST, para impor que a distribuição espacial 3D de um conjunto de fontes pontuais seja homogêneo quando  $\theta(\mathbf{p})$  possuir norma L2 mínima. Inspirados no trabalho de Bijani et al. (2015), o problema original foi simplificado para o caso 2D e o estabilizador foi associado a outra métrica, chamada de distância de Mahalanobis (MAHALANOBIS, 1936; MAESSCHALCK; JOUAN-RIMBAUD; MASSART, 2000; MCLACHLAN; MCLACHLAN, 1999; BAR-HILLEL et al., 2005). Estes temas são melhor apresentados no capítulo 4.

## 4 Teoria dos Grafos

Um **grafo** é uma estrutura  $G = G(V,E)$ , constituída por um conjunto finito e não vazio  $V$  cujos elementos são denominados **vértices**, e um conjunto de subconjuntos a dois elementos de  $V$  denominados **arestas** (COSTA, 2011)(Ver Figura 2).<sup>1</sup> Indicamos por  $|V|$  e  $|E|$ , respectivamente, o número de vértices e o número de arestas de  $G$ . Se  $u, v$  são vértices (ou nodos) e existe um elemento em  $E$  que inicia em  $u$  e termina em  $v$ , dizemos que a aresta  $e$  **conecta** os vértices  $u$  e  $v$ . O **grau de um vértice**  $v$ , denotado por  $d(v)$ , é o número de arestas ligantes a  $v$ . Vértices ligados por arestas são ditos **vértices adjacentes** (ABREU et al., 2014). Na figura 2, por exemplo,  $|V| = 5$ ;  $|E| = 6$   $d(v_1) = d(v_2) = d(v_5) = 3$ . Adicionalmente, não há distinção sobre a orientação das arestas, de forma que grafo  $G$  diz-se não orientado. Seja  $G = G(V, E)$  um grafo. Quando  $G' = G'(V', E')$  é um grafo

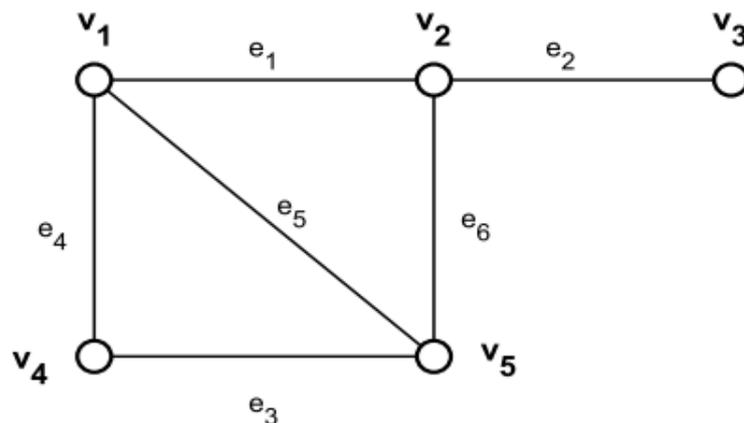


Figura 2 – Exemplo de um grafo no qual  $V = \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5\}$  e  $E = \{e_1, e_2, e_3, e_4, e_5, e_6\}$ . Esta figura foi retirada de (COSTA, 2011)

satisfazendo  $V' \subset V$  e  $E' \subset E$  escrevemos  $G' \subset G$  e dizemos que  **$G'$  é um subgrafo de  $G$**  (ABREU et al., 2014).<sup>2</sup>

Grafos são de extrema importância para o mundo da matemática aplicada, sendo fundamentais na ciência de dados, economia, logística, otimização numérica, etc (BONDY; MURTY et al., 1976). Neste trabalho, utilizaremos um tipo especial de grafo e suas peculiaridades com o objetivo de estabilizar o problema inverso gravimétrico.

<sup>1</sup> Ainda que haja uma formalidade matemática na definição de um grafo, ela está fora do objetivo deste projeto.

<sup>2</sup> De forma simples, estamos apenas escolhendo um número finito de vértices e arestas do grafo maior para definir  $G'$ .

## 4.1 Tipos de Grafos

Apresentamos a seguir alguns tipos especiais de grafos que são bastante utilizados na matemática aplicada e, em particular, no nosso problema.

- **Grafo sem laços ou ciclos:** É um grafo onde não existem aréostas que liguem um vértice a ele mesmo. Este tipo de grafo é de suma importância para a construção do estabilizador mostrado na seção 3.1. A Figura 3 mostra um grafo sem ciclos, enquanto a Figura 4.

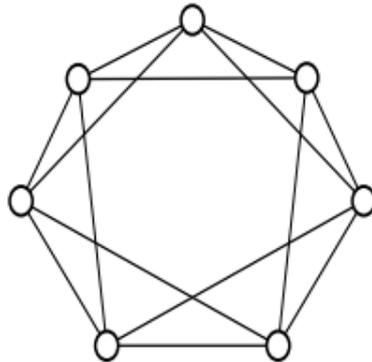


Figura 3 – Exemplo de um grafo sem ciclos retirado de (COSTA, 2011).

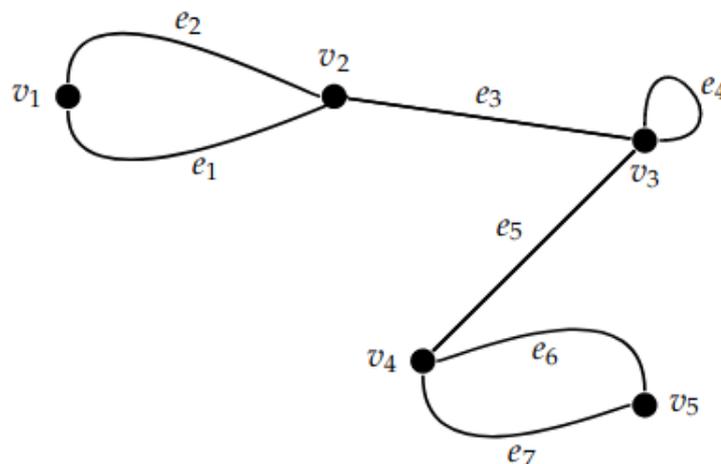


Figura 4 – Exemplo de um grafo com 2 ciclos retirado de (GOMES, 2017).

- **Cadeias, Caminhos e Ciclos:** Uma sequência finita  $v_1, v_2, \dots, v_k$  de vértices de um grafo  $G(V, E)$  é dita uma **cadeia** (walk) de  $v_1$  a  $v_k$  quando  $\{v_i, v_{i+1}\} \in E$ , ou seja, quando dois vértices consecutivos estão sempre ligados por uma aresta. Um **caminho** (path) é uma cadeia em que todos os vértices são distintos. Um caminho fechado é denominado um **ciclo**. Caminhos e ciclos com  $n$  vértices são denotados, respectivamente, por  $P_n$   $C_n$  (ver figura 5).

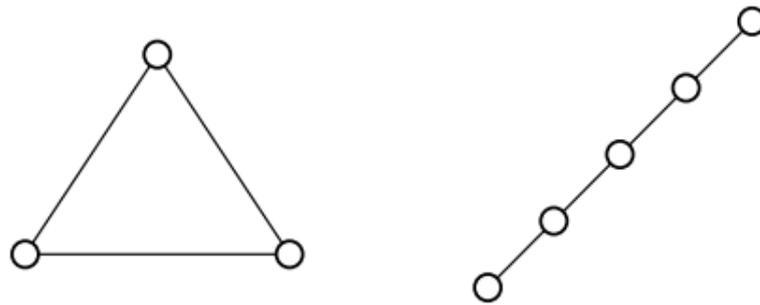


Figura 5 –  $C_3$  e  $P_5$ . Figura retirada de (COSTA, 2011)

- **Grafo Conexo:** É um grafo no qual existe um caminho ligando cada par de vértices. Em caso contrário, o grafo é denominado desconexo. Se  $G$  é um grafo desconexo, dizemos que  $G' \subset G$  é uma componente conexa de  $G$  quando  $G'$  é um grafo conexo e não existe um subgrafo conexo de  $G$  contendo  $G'$  (ver figura 6).

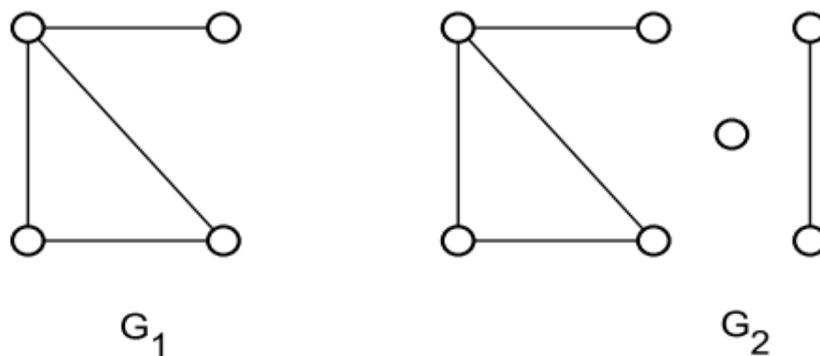


Figura 6 –  $G_1$  é um grafo conexo e  $G_2$  é um grafo desconexo com 3 componentes conexas. Figura retirada de (COSTA, 2011)

### 4.1.1 Árvores

Uma árvore é um grafo conexo sem ciclo (HOORY; LINIAL; WIGDERSON, 2006). Um grafo desconexo sem ciclos é chamado uma **floresta** (ver figura 8). Dizemos que uma

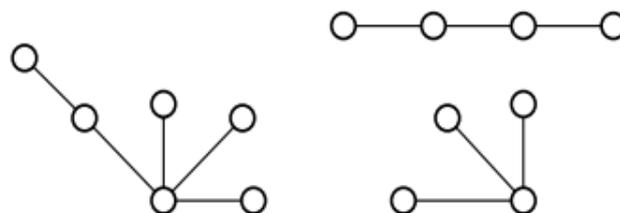


Figura 7 – Uma floresta com 3 árvores. Esta figura foi retirada de (ABREU et al., 2014)

árvore é geradora de um grafo  $G$  se é um subgrafo de  $G$  e contém todas os vértices de  $G$ . Ora, dado um grafo  $G$ , podemos então obter o conjunto  $A = \{G' \subset G \mid G' \text{ é uma árvore}\}$ .

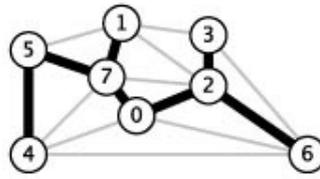


Figura 8 – Uma árvore geradora de um grafo.

É natural se fazer a pergunta - Existe alguma árvore geradora que seja "menor"<sup>3</sup> que todas as outras?

**Teorema 4.1.1** *Seja  $G$  um grafo.  $G$  é conexo se, e somente se,  $G$  possuir uma árvore geradora mínima (MST).*

Isso significa que, em nosso problema, o grafo sempre possui uma MST devido à construção das arestas que conectam todos os pontos de massa (Figura 8). É importante salientar que para a construção dos grafos não-orientados, utilizamos as bibliotecas *networkx* e *scipy*, disponíveis em linguagem *Python*. O dinamismo e a facilidade de utilização das funções *scipy.spatial.distance\_matrix* (para o cálculo e atribuição dos pesos às arestas) e *networkx.minimum\_spanning\_tree* (para definição do MST) foram determinantes para a continuidade do trabalho, por terem sido implementadas de forma a otimizar o tempo de processamento.

## 4.2 O MST no problema inverso gravimétrico 2D

Uma vez que temos em mãos as definições necessárias, duas perguntas são naturais. A primeira deve referir-se à aplicabilidade do MST ao nosso problema. A segunda é como computar a árvore mínima, sem ciclos, de um grafo  $G$ ?

Com o intuito de esclarecer alguns aspectos apresentados, vamos estabelecer as seguintes analogias entre o que foi discutido sobre grafos e o problema inverso em questão:

- Os vértices do Grafo são agora associados aos pontos de massa;
- As arestas que conectam os pontos de massa aos pares são segmentos de reta não-orientados;
- Os pesos de cada segmento de reta são as distâncias Euclidianas entre os pontos de massa que compõem o grafo;

Para exemplificar os conceitos mencionados, veja a Figura 9 (a). Nela podemos observar um grafo não orientado com 5 vértices e 9 arestas. O MST consiste em encontrar a árvore

<sup>3</sup> Menor neste caso quer dizer de menor custo, coisa que será tratada na próxima seção

geradora cuja soma de todos os pesos das arestas seja a menor possível. Por definição, associa-se a cada aresta do grafo um peso, o qual, neste caso, é a distância entre os vértices conectados. Neste ponto fica mais claro porque não podem existir ciclos, já que haveriam arestas com peso nulo, inviabilizando a construção da árvore. Para construir o

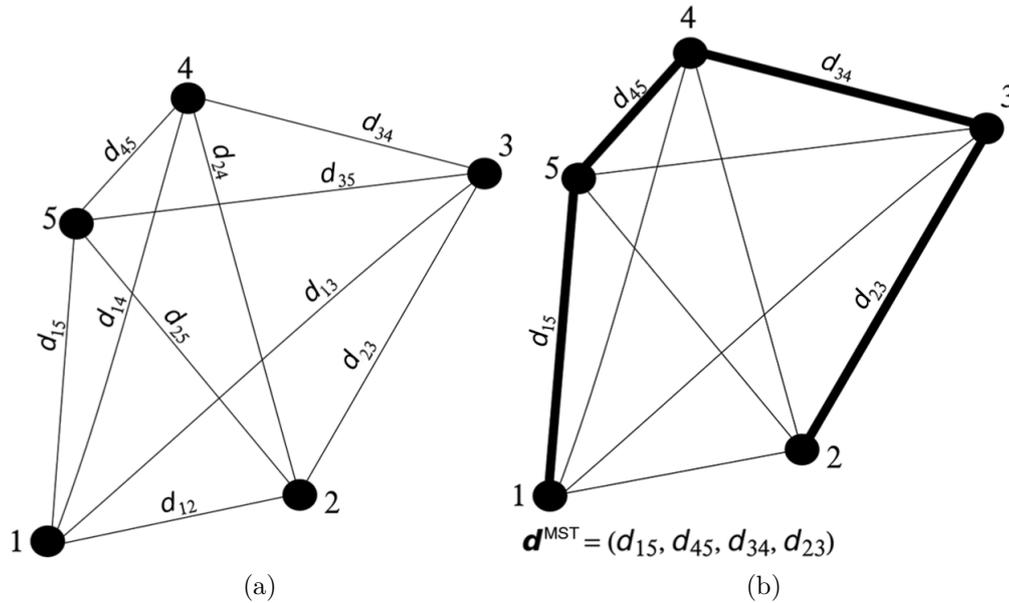


Figura 9 – (a) Esquema de um grafo não orientado composto por  $M = 5$  fontes pontuais (pontos pretos enumerados de 1 a 5). As linhas que conectam os pontos de massa são as arestas do grafo. Cada aresta possui um distância, que é representada por  $d_{12}, d_{13}, d_{14}, \dots, d_{45}$ . (b) Após aplicar o algoritmo de Kruskal para encontrar a MST. O conjunto de arestas em negrito representam as arestas que formam o MST. As arestas escolhidas são armazenadas no vetor  $\mathbf{d}^{MST}$  (BIJANI et al., 2015).

MST referente aos pontos de massa, há diversos algoritmos na literatura. Neste trabalho, utilizamos o algoritmo de Kruskal (KRUSKAL JR., 1956), implementado no pacote *networkX*, em linguagem *Python*. A ideia por trás deste algoritmo consiste na busca por um subconjunto das arestas que forma uma árvore e inclui todos os vértices, onde o distância total, dada pela soma dos pesos das arestas da árvore, é minimizada. Para mais detalhes sobre a implementação do algoritmo de Kruskal, o leitor é convidado à (KRUSKAL JR., 1956; CORMEN, 2001). Após a aplicação deste algoritmo em nosso exemplo com 5 vértices, tem-se o resultado apresentado na Figura 9 (b). Observe que as distâncias  $d_{15}, d_{45}, d_{34}$  e  $d_{23}$  foram escolhidas para compor o MST, além do grafo resultante não formar qualquer ciclo, fato que é uma exigência do problema. Diante do exposto até aqui, podemos definir a função de estabilização  $\theta(\mathbf{p})$ , adaptado de Bijani et al. (2015) da seguinte forma vetorial:

$$\theta(\mathbf{p}) = \sqrt{[\mathbf{d}(\mathbf{p}) - \bar{\mathbf{d}}(\mathbf{p})]^T \mathbf{A} [\mathbf{d}(\mathbf{p}) - \bar{\mathbf{d}}(\mathbf{p})]}, \quad (4.1)$$

em que  $\mathbf{d}(\mathbf{p})$  é o vetor de dimensão  $M - 1$  com as pesos (distâncias) que compõem o MST,  $\bar{\mathbf{d}}(\mathbf{p})$  é a média das distâncias do MST,  $\mathbf{A}$ , para a métrica Euclidiana, é a matriz identidade de dimensão  $M - 1$  (i.e., número de arestas do MST) e o símbolo  $T$  indica transposição. Como comentado em [Bijani et al. \(2015\)](#), a função de equidistância (i.e., Equação 4.1) mede a variância das distâncias entre os pontos de massa que pertencem ao MST. Dessa forma, essa função define se os pontos de massa estão homoganeamente distribuídos ou não. Por exemplo, se  $\theta(\mathbf{p}) = 0$  significa que todos os pontos de massa estão à mesma distância da média, e, conseqüentemente, pode-se afirmar que as arestas do MST possuem as mesmas distâncias. Imagine agora que a Equação 4.1 seja baseada em outra métrica. O que esperar desta alteração na função de estabilização? Que tipo de restrição será atribuída às soluções? Esses questionamentos são melhor discutidos na seção 4.3.

### 4.3 A métrica de Mahalanobis

Com o objetivo de verificar como outra métrica pode contribuir para a estabilização do problema inverso gravimétrico em discussão neste trabalho, introduzimos a métrica ou distância de Mahalanobis <sup>4</sup> da seguinte forma ([LIMA, 2006](#)):

$$\theta(\mathbf{p}) = \sqrt{[\mathbf{d}(\mathbf{p}) - \bar{\mathbf{d}}(\mathbf{p})]^T \mathbf{S}^{-1} [\mathbf{d}(\mathbf{p}) - \bar{\mathbf{d}}(\mathbf{p})]}. \quad (4.2)$$

Repare que na Equação 4.1 a matriz  $\mathbf{A}$  é a identidade, ao passo que na Equação 4.2 torna-se a inversa da matriz  $\mathbf{S}$ , que é matriz de covariância agrupada, cujo elemento  $(i, j)$  é obtido através da seguinte expressão:

$$\mathbf{S}_{ij} = cov(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j) = E[(\mathbf{p}_i - \mu_i)(\mathbf{p}_j - \mu_j)], \quad (4.3)$$

em que  $\mathbf{p}_i = (x_i, z_i)$   $i = 1, \dots, M$  é o vetor de parâmetros,  $\mu_i$  e  $\mu_j$  representam a média da coordenadas  $x$  e  $z$  de todas as fontes pontuais, respectivamente. Podemos afirmar que, para uma série de problemas em que a matriz de covariância agrupada for idêntica à matriz identidade, então tem-se que as métricas Euclidiana e Mahalanobis são coincidentes. Caso a matriz  $\mathbf{S}$  se apresente da forma diagonal, então a medida de distância é totalmente análoga à distância Euclidiana normalizada ([BAR-HILLEL et al., 2005](#)). A métrica de Mahalanobis considera a variância de cada elemento do vetor de parâmetros. Essa característica associada ao MST privilegia distribuições espaciais alongadas. Dessa forma, fontes causadoras de anomalias gravimétricas que possuam direções oblíquas (mergulo) são preferenciais. Vale salientar que a Equação 4.2 não impõe que as fontes pontuais estejam homoganeamente distribuídas espacialmente, fato que contrasta com a Equação 4.1.

Diante de todos os conceitos discutidos até aqui, precisamos de um método de otimização para que seja possível minimizar a função objetivo estabilizada 3.2 e conse-

<sup>4</sup> é uma medida de distância introduzida pelo matemático indiano Prasanta Chandra Mahalanobis em 1936 ([MAHALANOBIS, 1936](#))

quentemente, encontrar a solução que ajusta os dados gravimétricos e tenha significado geológico. O próximo capítulo 5 discute brevemente a respeito de como obter o vetor de parâmetros ótimo.

## 5 Otimização numérica

Problemas inversos são resolvidos por meio de técnicas de otimização numérica, que podem ser divididos em dois grandes grupos: i) Métodos Determinísticos (ou Analíticos) e ii) Métodos Estocásticos (ou Probabilísticos). O primeiro consiste na estimativa do vetor de parâmetros através das informações acerca do gradiente da função objetivo. Tais conjuntos de métodos sofrem severas limitações quando:

1. a função objetivo  $f(\mathbf{p})$  não for diferenciável em  $\mathbb{R}^N$  (IZMAILOV; SOLODOV, 2009);
2. não se sabe a derivada analítica de  $f(\mathbf{p})$ ;
3. a função objetivo é multimodal (VALENCIA, 1997);
4. a estimativa inicial é mal estabelecida (BOSCHETTI; MORESI, 2001);

Em nosso caso, definir a derivada analítica da função  $\theta(\mathbf{p})$  é inviável. Desta forma, recorreremos aos métodos estocásticos de otimização. Estes, basicamente, operam uma busca especializada pelo espaço dos parâmetros. Tal busca, dotada de certa aleatoriedade, tem como principal aspecto a imitação de fenômenos observados na natureza, como por exemplo, o comportamento de uma colônia de formigas na busca por alimento ou processo de seleção natural proposto por Charles Darwin. Este segundo, chamado na literatura de Algoritmo Genético é o utilizado neste trabalho e as etapas de implementação são apresentadas na seção 5.1

### 5.1 Algoritmo Genético

Um algoritmo é uma série de passos organizados que descrevem o processo a ser seguido, afim de solucionar um problema em específico. Nos anos de 1970, John Henry Holland (HOLLAND et al., 1992), motivado pelos recentes avanços na área de inteligência artificial, criou um novo conjunto de algoritmos, que denominou de Algoritmos Genéticos (AG). Tendo sua inspiração na evolução biológica e nos fenômenos genético-molecular, os algoritmos genéticos fazem evolucionar uma população de indivíduos (i.e., vetor de parâmetros) através de ações parcialmente aleatórias, semelhantes às do processo de evolução biológica, como mutação e *cross over*. (MKHLENBEIN; MAHNIG, 2001), descartando os menos aptos<sup>1</sup> Os AG tem sua eficiência comprovada quando se trata de minimizar (ou maximizar) funções que tem algum, ou até todos, dos problemas comentados no início deste capítulo (VALENCIA, 1997).

<sup>1</sup> Em geral, a palavra menos ou mais apto refere-se ao valor de uma função objetivo aplicada a cada indivíduo.

## 5.2 Arquitetura e implementação do Algoritmo Genético

Existem muitas arquiteturas para um AG. Neste trabalho, utilizamos uma bem geral, que é representada pela Figura 10. Os elementos da arquitetura do AG são destacados

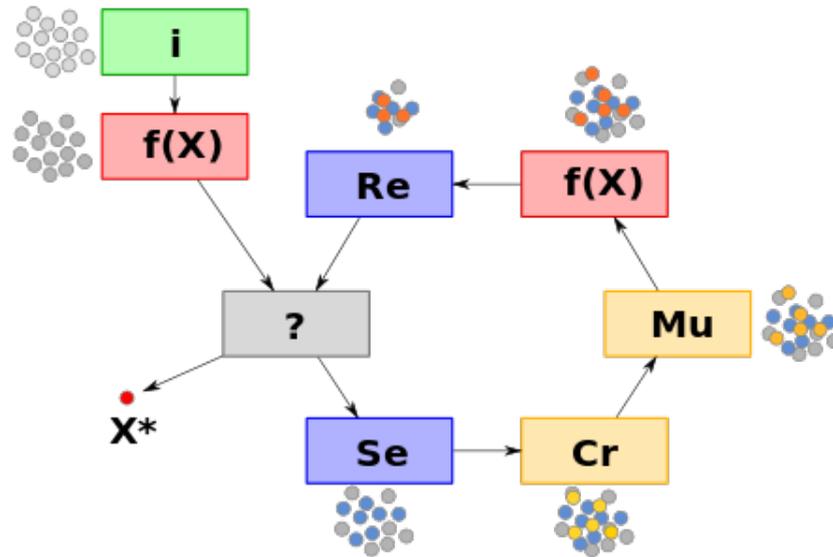


Figura 10 – Arquitetura do Algoritmo Genético utilizado neste trabalho

a seguir e aludidos aos elementos discutidos ao longo do texto. São eles:

1. **i** é a população inicial, ié., um conjunto de indivíduos  $(m, \mathbf{p})$  definidos aleatoriamente dentro do espaço de parâmetros estabelecido pelo usuário;
2.  $f(\mathbf{X})$  é a função objetivo: a cada indivíduo é associado uma aptidão  $(\Gamma(m, \mathbf{p}))$ ;
3. **?** é o critério de parada do algoritmo;
4. **Se** é a função de seleção dos indivíduos: etapa responsável pela manutenção da evolutibilidade do algoritmo;
5. **Cr** é a função de cruzamento dos indivíduos selecionados: função que garante a similaridade genética de pais e filhos;
6. **Mu** é a função de mutação dos indivíduos obtidos através do cruzamento: fundamental para variabilidade genética da população, sendo crucial na fuga de eventuais mínimos locais associados à multimodalidade da função  $\Gamma(m, \mathbf{p})$ ;
7. **Re** é a função de reinserção dos indivíduos mutados na população original;
8. **X\*** é o melhor indivíduo encontrado que cumpre o critério de parada;

### 5.2.1 Função Objetivo Estabilizada

Para o propósito deste trabalho, a função a ser otimizada é a função vista no capítulo 3, dada pela equação 3.2.

### 5.2.2 Critério de Parada

Existem duas condições de término que são mais utilizadas na literatura (GOLDBERG; HOLLAND, 1988), quantidade de iterações ou diferença entre as soluções consecutivas. A primeira é clara. Se o algoritmo exceder um número pré-determinado de iterações, então ele deve parar. A segunda é simplesmente uma função  $dif((m_1, \mathbf{p}_1), (m_2, \mathbf{p}_2)) = |\Gamma(m_1, \mathbf{p}_1) - \Gamma(m_2, \mathbf{p}_2)|$ , onde  $(m_1, \mathbf{p}_1)$  e  $(m_2, \mathbf{p}_2)$  são os melhores indivíduos de duas iterações consecutivas. Se  $dif((m_1, \mathbf{p}_1), (m_2, \mathbf{p}_2)) \leq \epsilon$ , para um  $\epsilon$  pré-definido, então o algoritmo deve parar. Neste trabalho, a condição de quantidade de iterações foi escolhida.

### 5.2.3 Função de Seleção

Este operador é responsável pela escolha do vetor de **pais**, que é um subconjunto da população inicial que será o domínio da função de cruzamento. Para isto, tomamos uma função de probabilidade do tipo  $Sigmoide(x)^2$  e aplicamos esta função ao conjunto  $\Gamma = \{\Gamma(m_i, \mathbf{p}_i) / i = 1, \dots, \text{número de indivíduos}\}$ . Assim, associamos a cada indivíduo  $\Gamma_i$ , um valor  $p_i = P(\Gamma_i)$  em  $[0, 1]$  e outro valor  $p \in [0, 1]$  aleatório. Se  $p_i > p$ , então o indivíduo correspondente  $(m_i, \mathbf{p}_i)$  é escolhido para fazer parte dos **pais**. Em termos de pseudo-código, temos:

---

#### Algorithm 1 Função de Seleção

---

```

n = número de indivíduos
for i:1 -> n do
  probi = P(Γ(mi, pi))
  p <- rand[0,1]
  if p ≤ probi then
    (mi, pi) é escolhido
  else
    i = i + 1
  end if
end for

```

---

### 5.2.4 Função de Cruzamento

A função de cruzamento será a responsável por gerar novos indivíduos, cujas propriedades serão semelhantes as dos seus geradores, i.e., **pais**. Primeiro, dividimos o vetor de **pais** pela metade (se não for possível, apenas excluimos um elemento qualquer

<sup>2</sup> Esta função é definida por:  $Sig(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$

deste); após isso, fazemos a média aritmética dois a dois entre elementos de cada metade. Chamaremos isso de **filhos**. Em forma de pseudo-código, a função é da seguinte forma:

---

**Algorithm 2** Função de Cruzamento
 

---

```

n = tamanho do vetor pais
if n é par then
  pais <- primeira metade do vetor pais
  maes <- segunda metade do vetor pais
else
  um elemento qualquer é retirado do domínio
  aplicamos a condição anterior
end if
for i:1 -> n do
   $p_{pai} <- \text{rand}[0,1]$ 
   $p_{mae} <- \text{rand}[0,1]$ 
  filhos[i] <-  $\frac{p_{mae} * maes + p_{pai} * pais}{p_{mae} * p_{pai}}$ 
end for

```

---

### 5.2.5 Função de Mutação

Esta é a chave da arquitetura aqui proposta. Cada filho do vetor **filhos** terá uma probabilidade de mutar, isto é, de mudar algum elemento do vetor de parâmetros, aleatoriamente sorteado respeitando o espaço de parâmetros definido a priori. Em nosso contexto, cada filho poderá mutar sua posição em  $(x, z)$ , i.e., **p** ou sua massa  $m$ . Veja que não iremos mutar a população inteira, nem os **pais**, apenas uma porcentagem dos filhos. Isto é feito assim para que não haja uma tendência probabilística muito forte a ponto de após poucas iterações, a população ser totalmente idêntica. O pseudo-código abaixo mostra de forma simples como é feito o processo.

---

**Algorithm 3** Função de Mutação
 

---

```

pmut <- rand[0,1]
for i: 1 -> n do
   $p_i <- [0,1]$ 
  if pmut  $\geq p_i$  then
    filhos[ i ] = filhos[ i ]*rand( espaço de parâmetros )
  else
    não faça nada
  end if
end for

```

---

### 5.2.6 Função de Substituição

A função escolhida neste trabalho foi a função Elitista, ou elitismo. Ela consiste em substituir os indivíduos menos aptos da população inicial, i.e., os indivíduos de maior valor

de  $\Gamma$ , pelos **filhos** já mutados, sem importar os valores da função objetivo obtida para **filhos**. A estratégia escolhida é mostrada no pseudo-código abaixo.

---

**Algorithm 4** Função de Substituição

---

```
 $pos_{ini}$  = tamanho de filhos  
 $pop_{aux}$  = ordena( $pop_{inicial}$ )  
 $pop_{aux}[pos_{ini} : final]$  = filhos
```

---

O algoritmo genético apresentado aqui foi implementado em linguagem Python, utilizando conceitos de classes, objetos, estrutura de dados e *design patterns* como *factory* e *literal objects*. Vale salientar que a biblioteca *scikit-learn* do Python apresenta uma versão própria deste algoritmo, que pode eventualmente servir de validação para o implementado aqui.

## 6 Resultados

Para validar a nossa metodologia e poder comparar os resultados obtidos através das diferentes métricas, que é o nosso objetivo principal, iremos apresentar dois modelos de anomalias gravimétricas causadas por fontes homogêneas sintéticas. Para todos os resultados, os modelos foram criados utilizando Python, aproveitando a estrutura de classes intrínseca da linguagem, que nos permitiu criar modelos mais complicados a partir da implementação do mais simples, como é o caso do segundo modelo. Nesta seção, todas as figuras obedecem a seguinte ordem: **(a)** Mostra o melhor indivíduo da população inicial; **(b)** Mostra o melhor indivíduo da população final, i.e., nossa solução; **(c)** Mostra a convergência da função de estabilização  $\theta(\mathbf{p})$  e **(d)** Mostra o histograma dos resíduos obtidos entre dados observados e preditos.

### 6.1 Modelo de um Dique Vertical

A modelagem direta, i.e., a criação das propriedades do modelo e da sua anomalia gravimétrica correspondente, foi feita utilizando as equações do (BLAKELY, 1996). O prisma foi enterrado a 150m de profundidade e tem sua base a 750m, além de estar centrado em  $x = 0$  e ter 50m de comprimento para cada lado no eixo  $x$ . A massa escolhida foi de aproximadamente  $2 \times 10^{11}$  Kg. Para o Algoritmo Genético, foram escolhidos os parâmetros mostrados na tabela 1 :

Parâmetros do Algoritmo Genético	
Parâmetro	Valor
Probabilidade de Mutação	0.2
$N^\circ$ de gerações	500
$N^\circ$ de indivíduos	50
Tempo de máquina médio	98s

Tabela 1 – Tabela mostrando os parâmetros do algoritmo genético para o modelo de um prisma vertical.

Além disso, cada indivíduo possui  $M = 10$  fontes pontuais com parâmetros de busca apresentados na tabela 2.

#### 6.1.1 Norma L2

Neste teste, utilizamos como função de estabilização a Equação 4.1, a mesma apresentada em Bijani et al. (2015).

Espaço de parâmetros		
Parâmetro	Mínimo	Máximo
x(m)	-950	950
z(m)	150	1000
M(Kg)	$1 \times 10^8$	$1 \times 10^{12}$

Tabela 2 – Tabela mostrando o espaço de busca dos parâmetros para a inversão do modelo do prisma vertical.

#### 6.1.1.1 Solução Sub Regularizada ( $\mu = 1 \times 10^{-10}$ )

A figura 11(a) mostra a solução inicial e o desajuste das curvas de  $g_z$ . Além disso, nota-se claramente na figura 11(b) que a inversão recuperou dois agrupamentos de fontes pontuais isoladas, além de ajustar o dado observado adequadamente. Veja que isto é o esperado, uma vez que  $\theta(\mathbf{p})$  não é adequadamente considerada durante o processo de inversão, o que reforça a ambiguidade **forma geométrica**  $\times$  **propriedade física** do método. Na figura 11(c), podemos ver que a função  $\theta$  apresenta valores altos, mostrando que, de fato, não houve regularização. Por fim, a figura 11(d) apresenta o histograma dos resíduos entre  $g_z$  observado e predito, reforçando o aspecto gaussiano no ruído introduzido no dado sintético.

#### 6.1.1.2 Solução Super Regularizada ( $\mu = 1 \times 10^{10}$ )

A Figura 12(a) mostra a solução inicial e o caráter aleatório do algoritmo. Além disso, vemos na Figura 12(b) o primeiro aspecto interessante do método proposto, onde é notório que a função de estabilização não só favoreceu soluções menos esparsas, como havíamos previsto, mas estimou uma solução excessivamente agrupada ao redor do centro de massa do prisma. Claro, apesar da inversão super regularizada não ter como propósito ajustar os dados, tem como objetivo diminuir a distância entre os vértices (fontes) e o centroide. Como o modelo é muito simples e simétrico, o centroide é, de fato, o centro de massa do próprio modelo. O leitor deve observar que na Figura 12(c) o comportamento decrescente de  $\theta$  é evidente, mostrando que a função de estabilização de fato é minimizada, convergindo para 0, como imposto por  $\mu$  elevado. A Figura 12(d) mostra como o resíduo entre dados observados e calculados não foi ajustado, uma vez que a função  $\Phi$ , da equação 3.2, não foi levada em consideração pelo AG.

#### 6.1.1.3 Solução Regularizada ( $\mu = 5 \times 10^{-3}$ )

A figura 13(a) mostra a solução inicial e como esta não é preponderante para a estimativa final, mostrando a independência do AG frente à estimativa inicial. Note que apenas 1 corpo homogêneo é obtido como solução, acabando com a ambiguidade vista na figura 11(b). Veja também como o AG preocupou-se em obter soluções geofisicamente corretas, i.e., soluções que gerem uma anomalia gravimétrica suficientemente parecida com

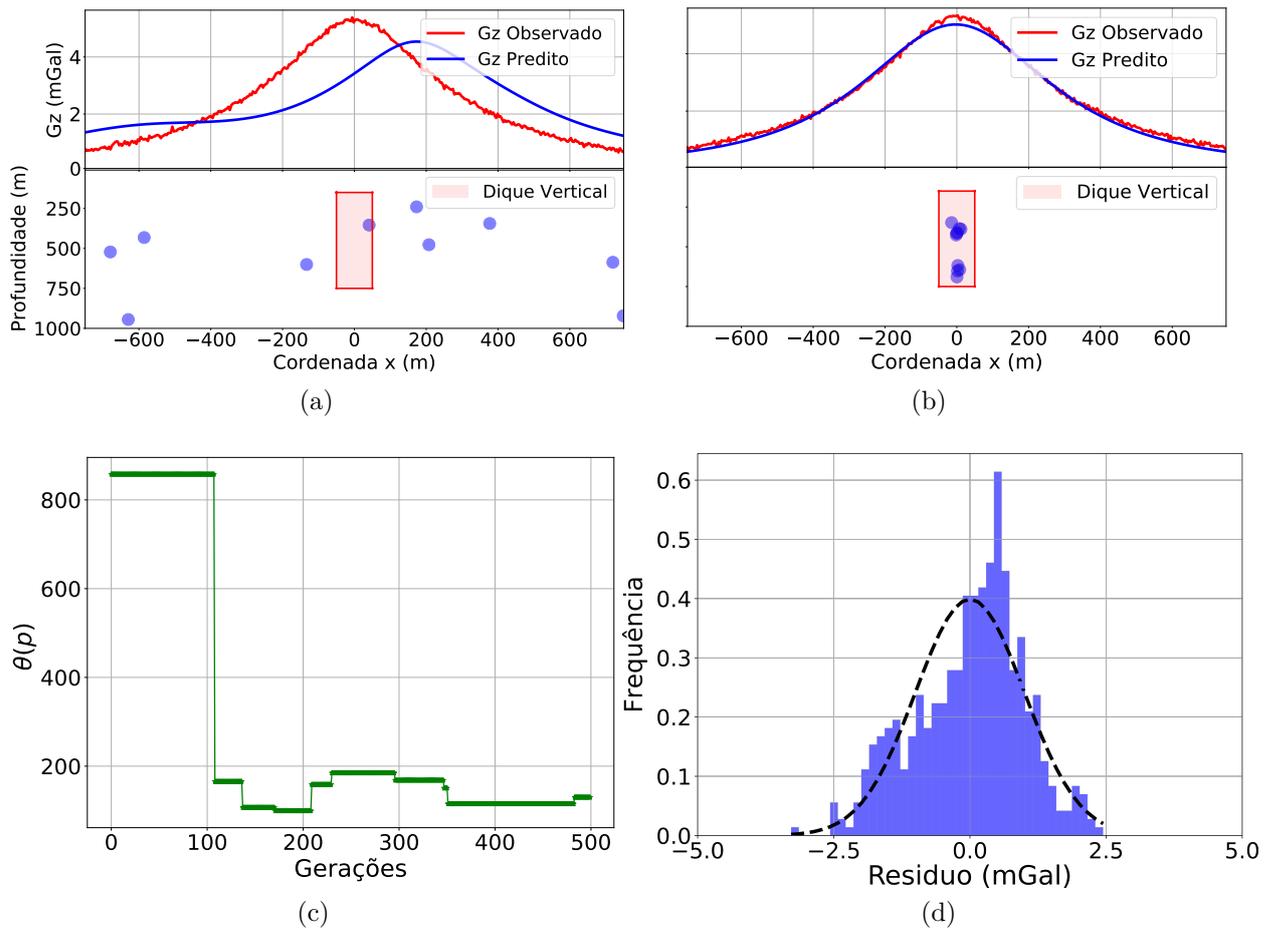


Figura 11 – Figura referente à norma L2 e  $\mu = 1 \times 10^{-10}$  mostrando como a solução sem função de estabilização é ambígua, mesmo que o erro entre  $g_{z_{obs}}$  e  $g_{z_{calc}}$  tenha sido quase que 0.

a observada. Na figura 13(c) é possível ver que valores mais baixos do que na figura 11(d) são encontrados, o que evidencia que a regularização foi imposta, mas não dominante. A figura 13(d) mostra que o erro, propositalmente gaussiano, foi ajustado adequadamente (média nula, desvio padrão 2.5).

### 6.1.2 Norma de Mahalanobis

Como dito na seção 4.3, a métrica de Mahalanobis é a grande novidade deste trabalho. Vale a pena lembrar que com esta norma, não esperamos homogeneizar a solução, mas sim obter novos resultados e conclusões sobre os benefícios de sua utilização no momento da inversão.

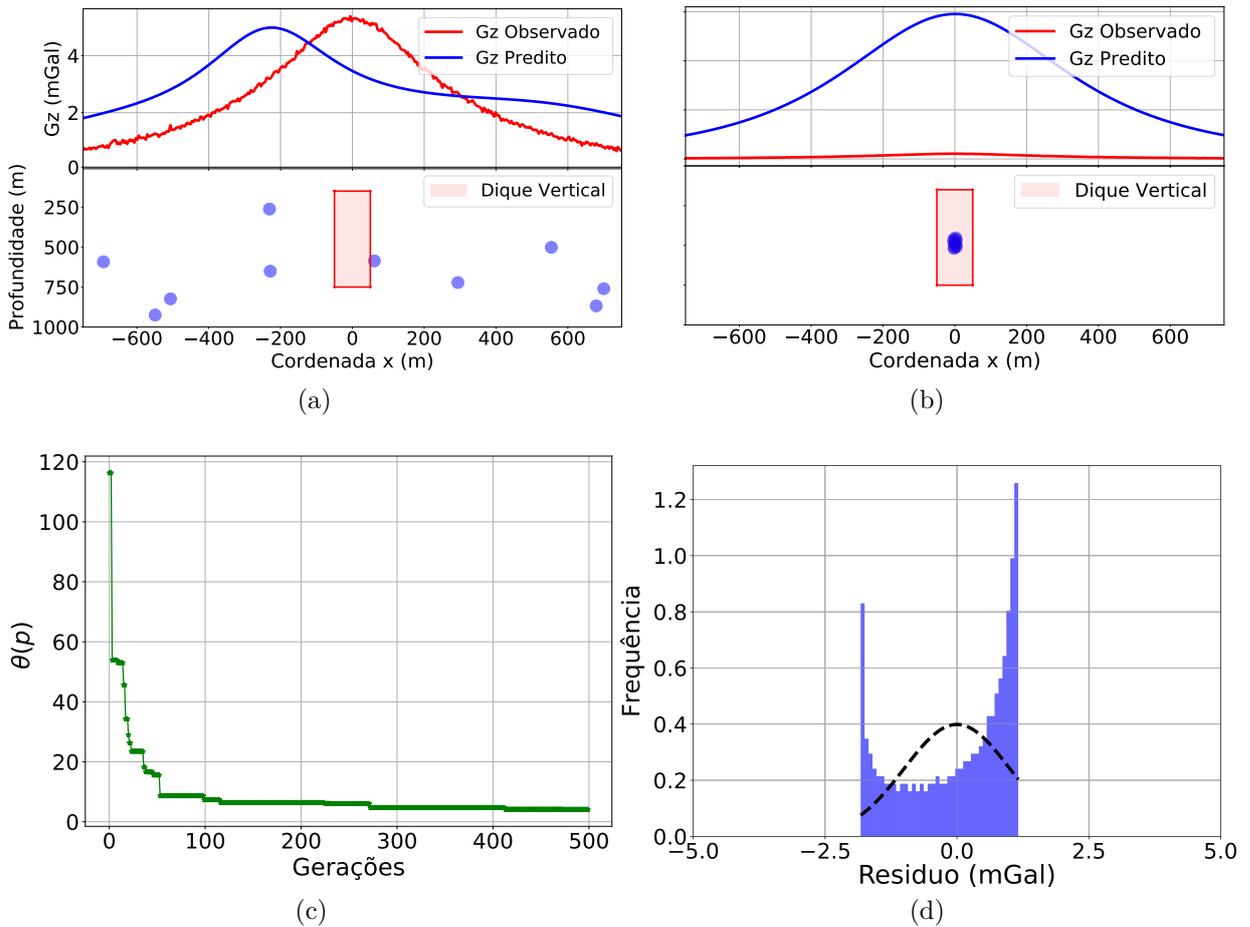


Figura 12 – Figura referente à norma L2 e  $\mu = 1 \times 10^{10}$  mostrando como a estabilização utilizando a norma L2 favorece soluções que colapsam no centroide da nuvem de pontos.

#### 6.1.2.1 Solução Sub Regularizada ( $\mu = 1 \times 10^{-100}$ )

A figura 14(a) mostra a solução inicial e o desajuste das curvas de  $g_z$ . A figura 14(b) mostra a estimativa final obtida e o ajuste dos dados. Repare que, mesmo que tenhamos mudado a norma na função de estabilização, devido ao  $\mu$  ser extremamente pequeno, não vemos influência nenhuma da função  $\theta(\mathbf{p})$  no momento da inversão. Vê-se claramente na figura 14(c) que a função de estabilização não chegou perto do 0 e nem foi minimizada, tendo ao longo do processo de inversão alguns picos positivos não desejados. A figura 14(d) mostra como o resíduo entre os dados observados e os preditos, foram ajustados corretamente.

#### 6.1.2.2 Solução Super Regularizada ( $\mu = 1 \times 10^{20}$ )

A Figura 15(a) mostra a solução inicial e o desajuste das curvas de  $g_z$ . A Figura 15(b) mostra o péssimo ajuste tanto do modelo, quando da curva de  $g_z$ . A Figura 15(c) mostra como a função  $\theta(\mathbf{p})$  foi de fato minimizada. O resultado da figura 15(d) mostra a

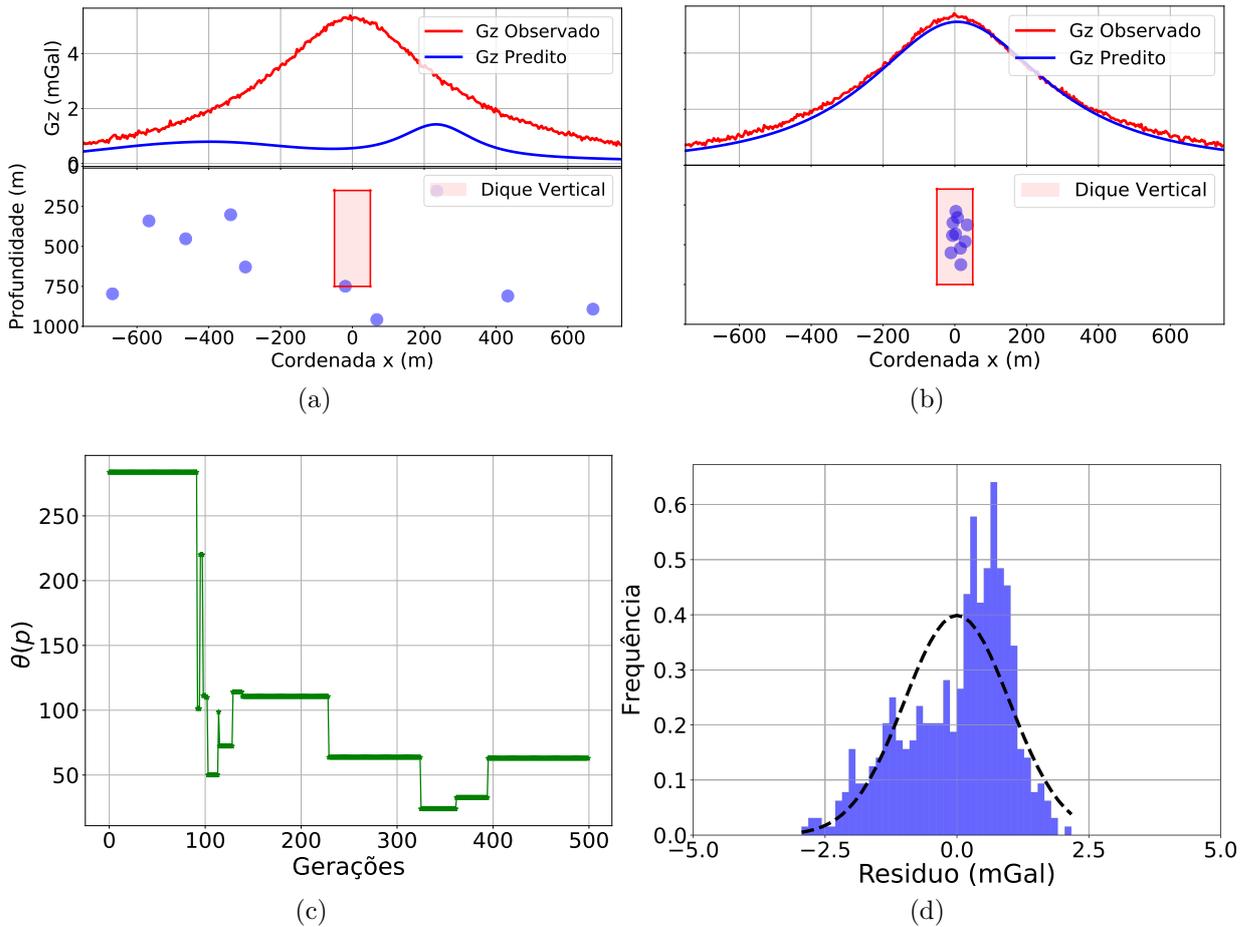


Figura 13 – Figura referente à norma L2 e  $\mu = 5 \times 10^{-3}$  mostrando como para o fator de estabilização correto, a inversão não só consegue encontrar o arcabouço do modelo, mas também ajustar a curva de  $g_z$ .

importância do fator  $\mu$  de regularização, já que, em contrapartida à figura 14(d), o ajuste do resíduo neste caso é inexistente.

### 6.1.2.3 Solução Regularizada ( $\mu = 1 \times 10^1$ )

A Figura 16(a) mostra a solução inicial e como a mesma passa longe de ser tendenciosa. Talvez um dos resultados mais interessante, a Figura 16(b) mostra claramente que a direção preferencial do modelo na direção  $\hat{z}$  foi encontrada, além do claro ajuste da curva de  $\mathbf{g}_z$ , que é um dos objetivos principais da inversão gravimétrica. Vemos em 16(c) que apesar da função de estabilização não ter sido minimizada, o fator  $\mu$  correspondente é suficiente para evidenciar aspectos geométricos sobre o modelo invertido. Por fim, a figura 16(d) mostra como o resíduo gaussiano foi ajustado corretamente.

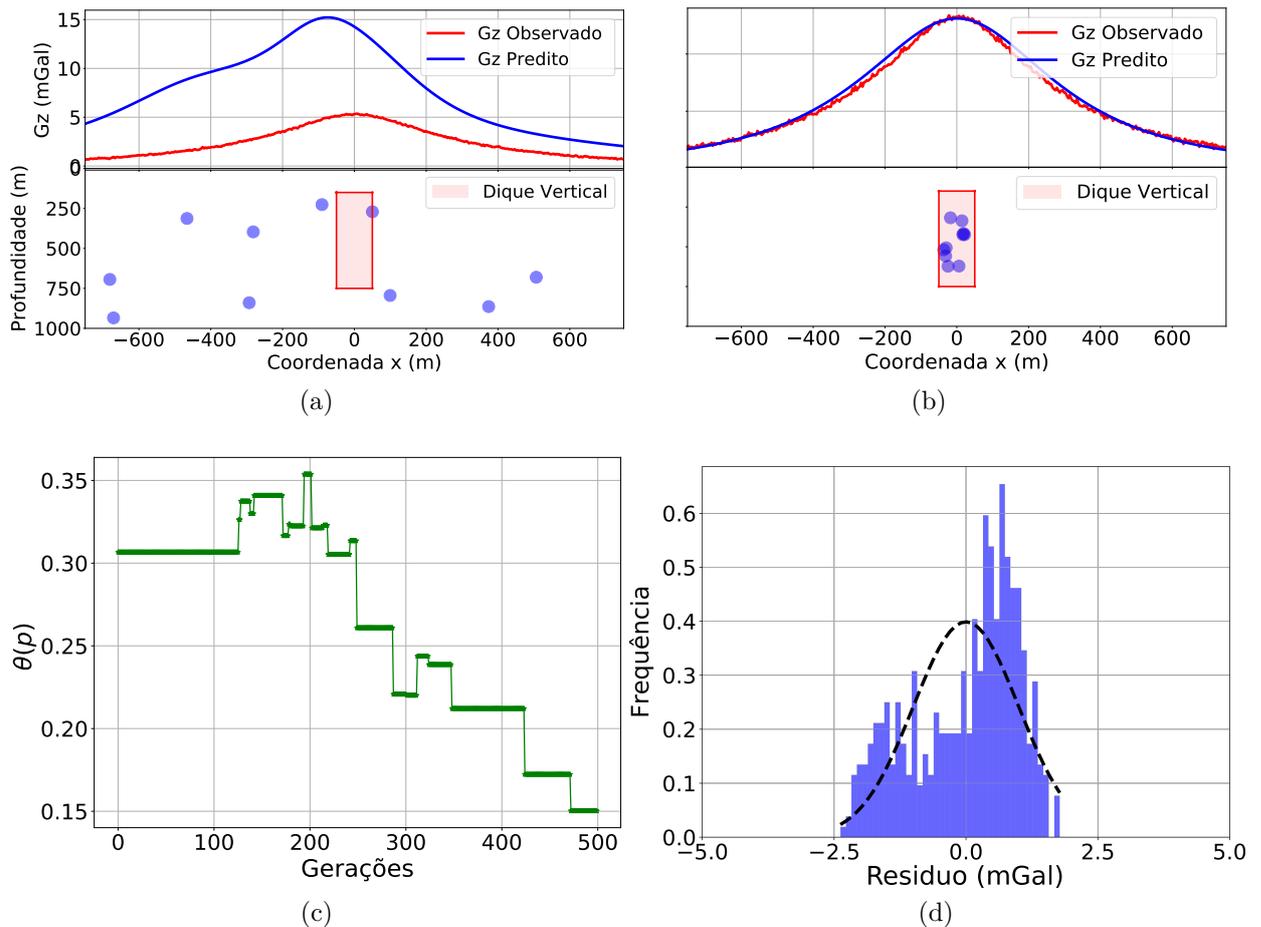


Figura 14 – Figura referente à norma de Mahalanobis e  $\mu = 1 \times 10^{-100}$  mostrando em (c) como a convergência da função  $\theta(p)$  não ocorreu, por isso a figura (b) mostra um bom ajuste da curva mas ainda obtendo 2 corpos isolados como solução.

## 6.2 Modelo de um Dique em mergulho

Este modelo foi criado utilizando duas ferramentas muito fortes do Python: O Polimorfismo, que nos garante que uma função de mesmo nome mas objetivo diferente em mais de uma classe é capaz de identificar que resposta deve retornar cada vez que é chamada para um objeto específico. E o princípio da superposição, que nos diz que a anomalia gravimétrica gerada por 2 corpos que não tem interseção, é a soma das anomalias gravimétricas geradas por cada corpo de forma individual. Dito isto, foram criados 4 objetos do tipo prisma, com parâmetros distintos. O modelo final é apenas uma concatenação dos 4 prismas individuais e as propriedades dos prismas são mostradas abaixo na tabela 3.

A tabela 4 mostra os parâmetros que foram escolhidos para o algoritmo genético.

Além disso, cada indivíduo possuía 10 fontes pontuais com parâmetros de busca apresentados na tabela 5.

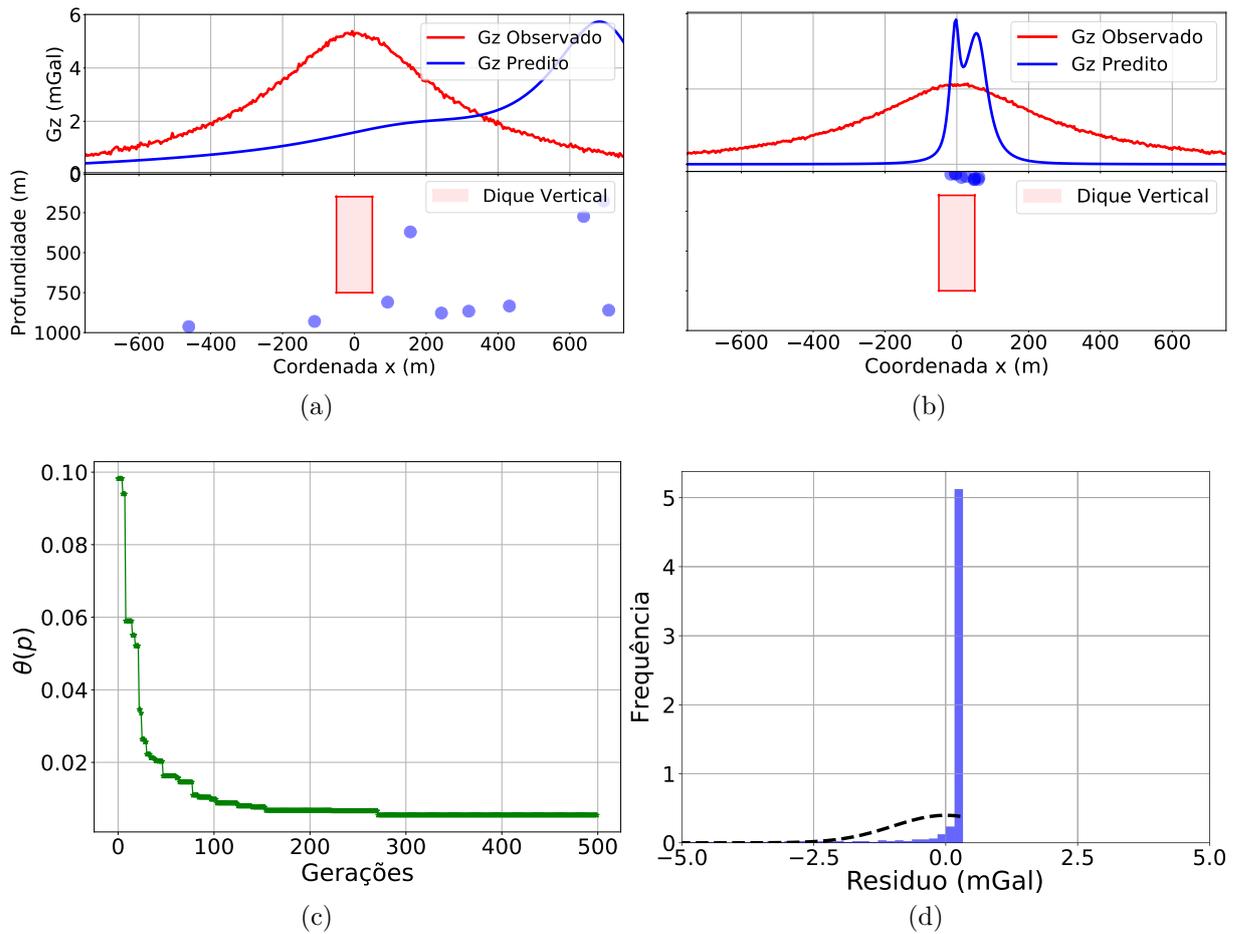


Figura 15 – Figura referente à norma de Mahalanobis e  $\mu = 1 \times 1020$  mostrando como a norma de mahalanobis não leva em conta os centroides da nuvem de pontos, por isso a solução mostrada em (b) é longe de ser boa, ainda que a figura (c) mostre claramente que função  $\theta(p)$  foi otimizada.

Parâmetros dos prismas utilizados para criar o modelo			
Prisma	X(m)	Z(m)	$\rho(\text{Kg}/\text{m}^2)$
1	[ -300, -100 ]	[ 150, 250 ]	2.95
2	[ -200, 0 ]	[ 250, 350 ]	2.95
3	[ -100, 100 ]	[ 350, 450 ]	2.95
4	[ 0 , 200 ]	[ 450, 550 ]	2.95

Tabela 3 – Tabela mostrando os parâmetros dos prismas utilizados para cria o modelo de uma escada.

### 6.2.1 Norma L2

Devido ao modelo de escada ser mais complexo que o de um prisma vertical, o algoritmo genético deve ter mais problemas em encontrar o centro de massa do modelo. Todavia, ainda espereamos soluções homogêneas, ié., pouco esparsas, verificando também o ajuste da curva de  $\mathbf{g}_z$ .

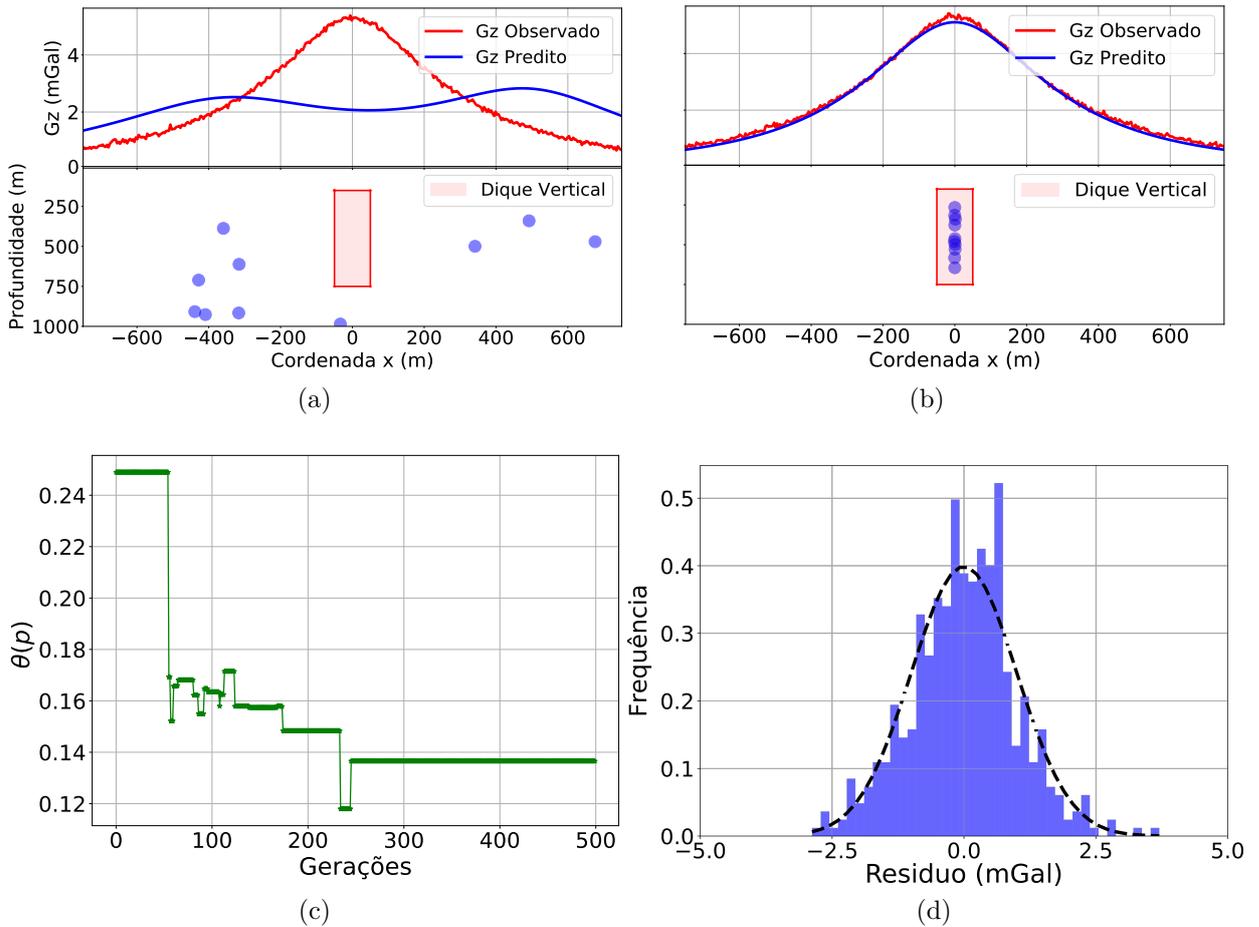


Figura 16 – Figura referente à norma de Mahalanobis e  $\mu = 1 \times 10^1$  mostrando que a norma de mahalanobis conseguiu inverter o eixo preferencial do modelo, assim como o eixo de simetria (b) e diminuir o erro pra perto de 0 (d)

Parâmetros do Algoritmo Genético	
Parâmetro	Mínimo
Probabilidade de Mutação	0.3
$N^\circ$ de gerações	2000
$N^\circ$ de indivíduos	50
Tempo de máquina médio	154s

Tabela 4 – Tabela mostrando os parâmetros do Algoritmo Genético para o modelo de uma escada.

### 6.2.1.1 Sub Regularizada ( $\mu = 1 \times 10^{-10}$ )

A figura 17(a) mostra a solução inicial e a grande diferença entre as curvas de  $g_z$  predita e observada. A figura 17(b) mostra claramente como a inversão preocupou-se apenas em minimizar o erro entre as curvas de  $g_z$ , criando um modelo totalmente distinto do original. A figura 17(c) mostra como, de fato, a função de estabilização não foi levada em conta, abrindo espaço para a interpretação de 2, ou até bem mais corpos como causantes

Limites de busca para o modelo de um prisma vertical		
Parâmetro	Mínimo	Máximo
x(m)	-1000	1000
z(m)	10	1000
M(Kg)	$1 \times 10^8$	$1 \times 10^{12}$

Tabela 5 – Tabela mostrando o espaço de busca dos parâmetros para a inversão.

da anomalia observada. A figura 17(d) mostra como a inversão foi capaz de ajustar o erro gaussiano no dado, mostrando mais uma vez que o ajuste da anomalia gravimétrica foi ótimo.

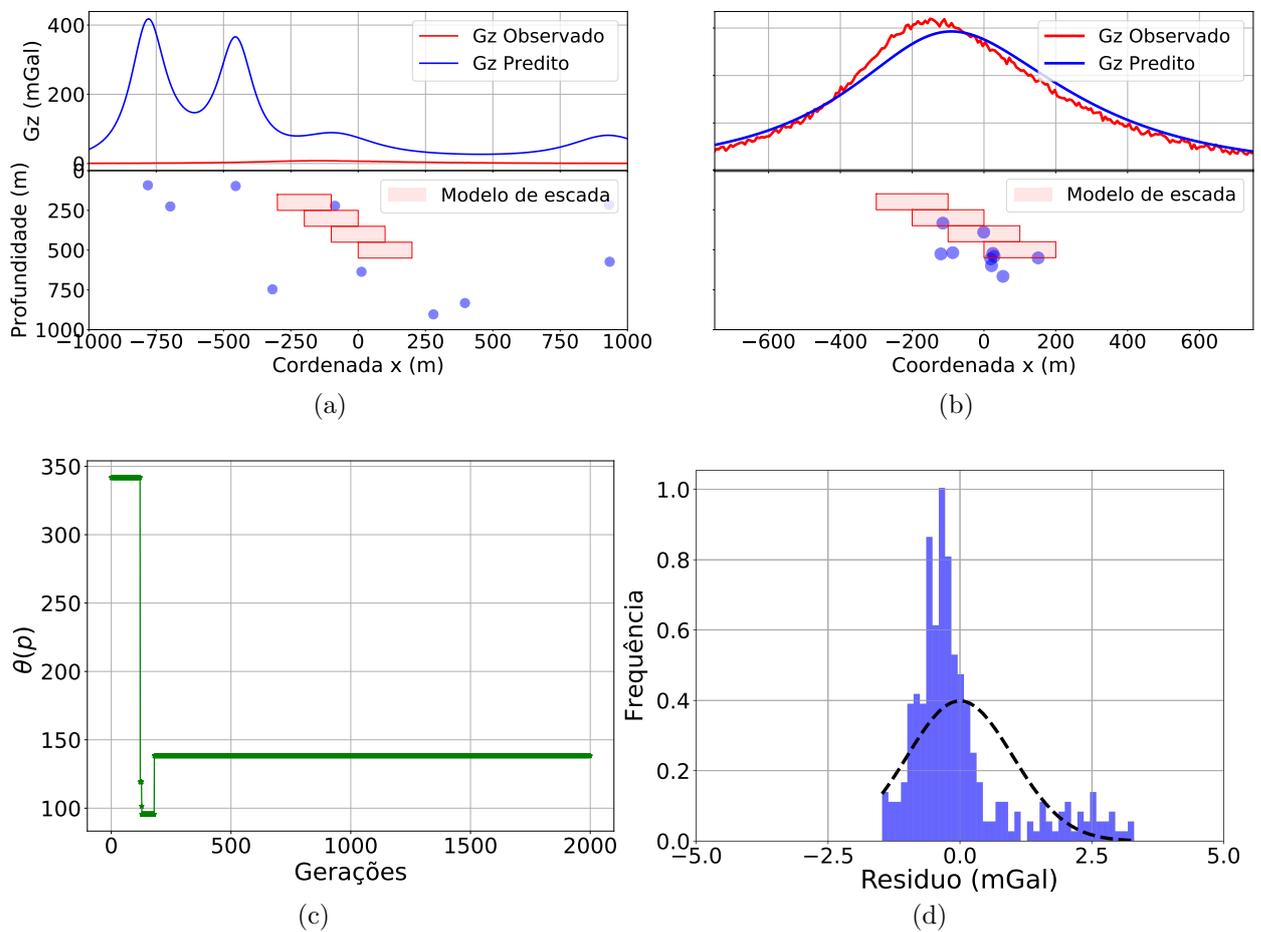


Figura 17 – Figura referente à norma L2 e  $\mu = 1 \times 10^{-10}$  mostrando como a curva de  $g_z$  foi ajustada, mas o modelo invertido foi totalmente distinto do verdadeiro, devido a falta de estabilização.

### 6.2.1.2 Super Regularizada ( $\mu = 1 \times 10^{10}$ )

A figura 18(a) mostra a solução inicial e o desajuste das curvas de  $g_z$ . A figura 18(b) mostra como o alto valor de  $\lambda$  colapsa novamente os pontos de massa. É interessante ver que o algoritmo e a utilização da norma L2 foram capazes de estimar bem o centro de

massa do modelo. Vê-se claramente na figura 18(c) que a função de estabilização convergiu para 0, como esperado, porém, como mostra a figura 18(d), o erro gaussiano colocado de propósito no dado foi totalmente ignorado pela inversão.

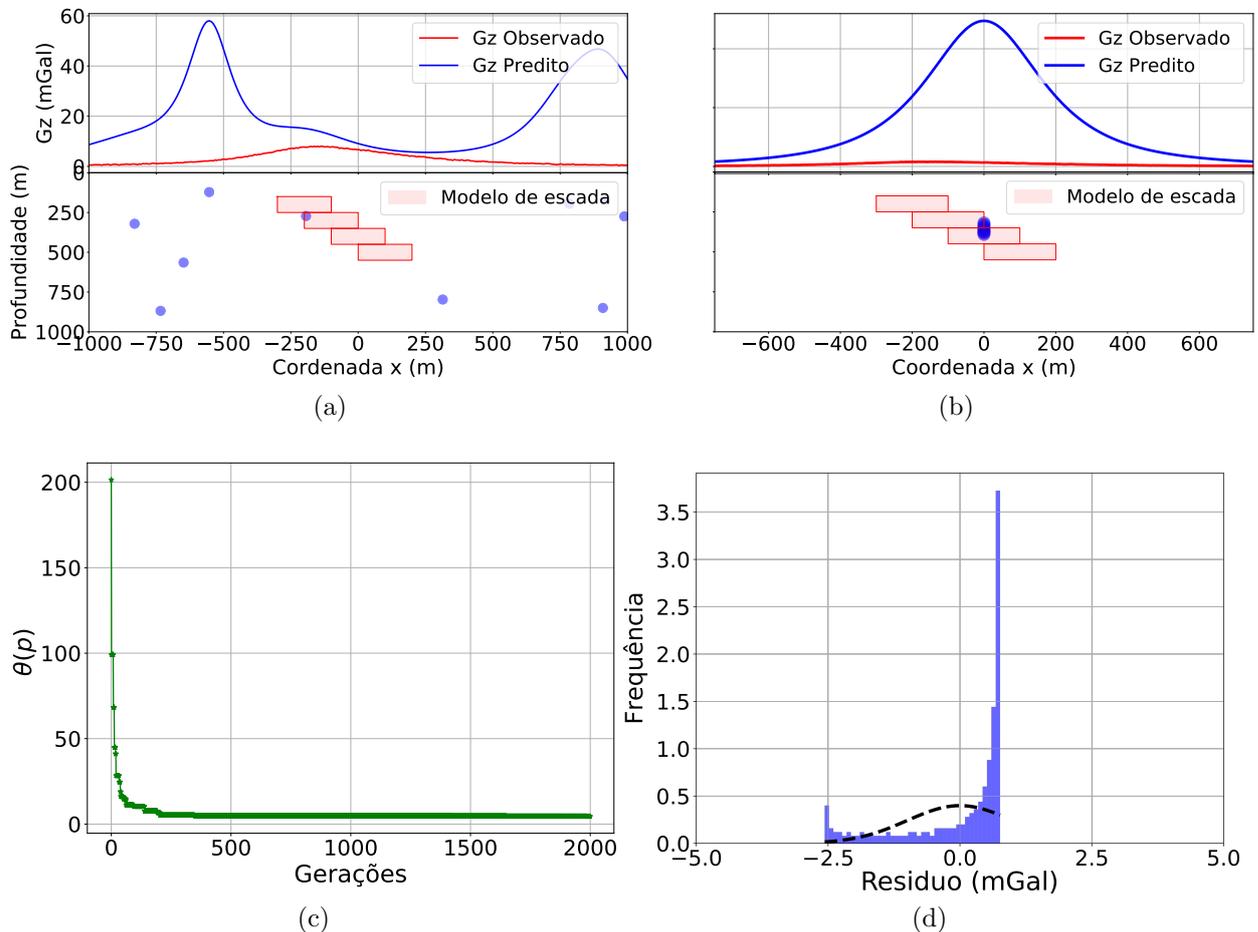


Figura 18 – Figura referente à norma L2 e  $\mu = 1 \times 10^{10}$  mostrando como o algoritmo e a norma L2 foram capazes de aproximar bem o centro de massa do modelo, porém o resíduo entre as curvas de  $g_z$  não foi ajustado.

### 6.2.1.3 Regularizada ( $\mu = 1 \times 10^{-3}$ )

A figura 19(a) mostra a solução inicial e o desajuste das curvas de  $g_z$ . Mais uma vez, vemos na figura 19(b) como o fator  $\mu$  é decisivo, influenciando não só na interpretação geofísica do modelo, mas também para ajustar de forma eficiente a curva de dados observados. A interpretação é clara o mostra que apenas um corpo homogêneo é o causador da curva em azul, além de ter um ajuste significativamente bom. A figura 19(c) mostra valores altos para a curva de  $\theta(\mathbf{p})$ , mostrando que a mesma não foi priorizada. Vale notar na figura 19(d) que o resíduo gaussiano foi suficientemente ajustado, tendo média zero e desvio padrão 2.5.

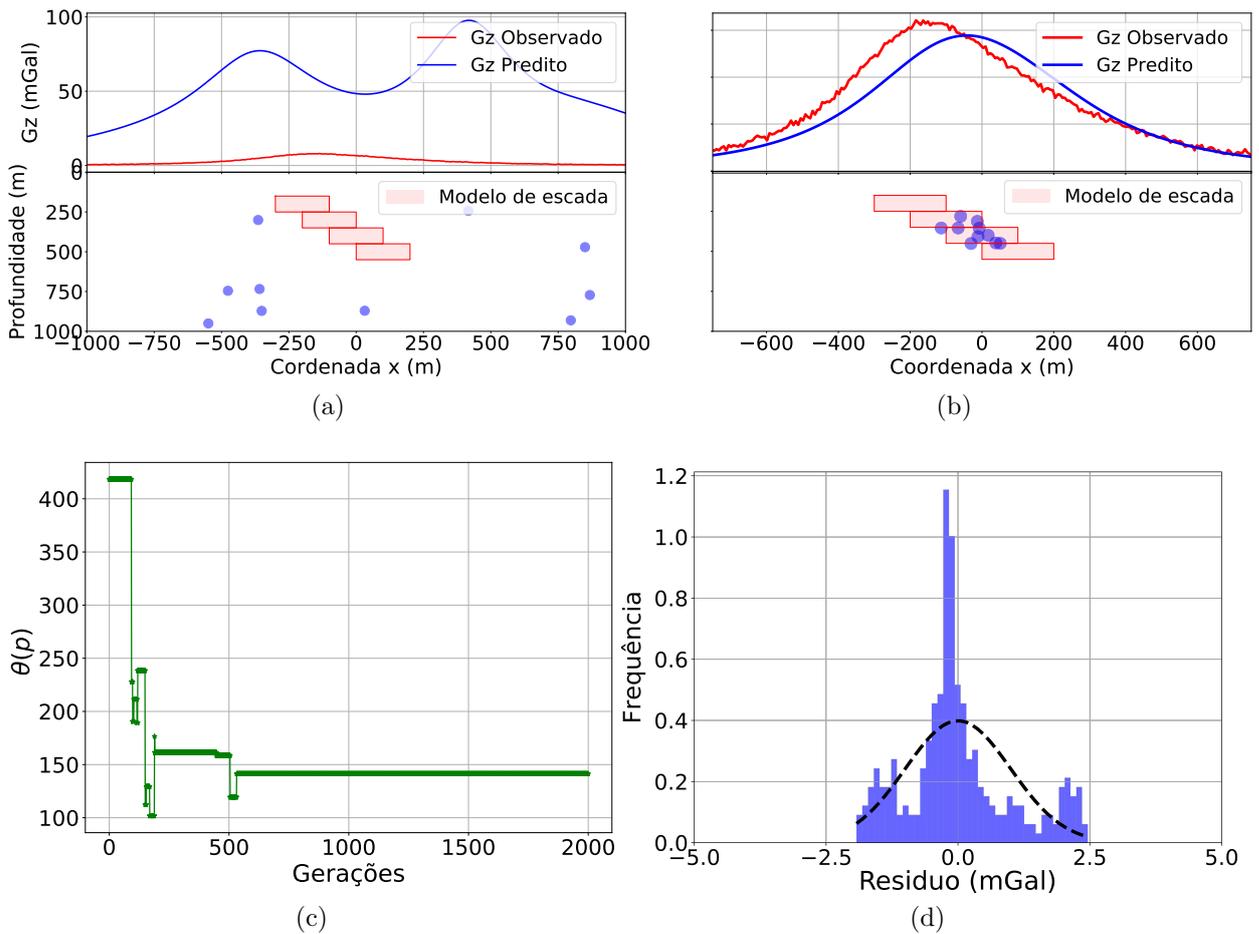


Figura 19 – Figura referente à norma L2 e  $\mu = 1 \times 10^{-3}$  mostrando como o fator ótimo de  $\mu$  conseguiu recuperar não somente a forma do corpo em subsuperfície, mas também ajustara curva da anomalia gravimétrica.

## 6.2.2 Norma de Mahalanobis

Entusiasmados pelos resultados nas figura 16(b), esperamos que a norma de Mahalanobis, para este modelo, seja capaz de encontrar bem o mergulho do nosso modelo, diferente da norma L2, como visto nos resultados na subseção 6.2.1. Afinal de contas, ajustar o mergulho irá com certeza melhorar o ajuste da curva.

### 6.2.2.1 Sub Regularizada ( $\mu = 1 \times 10^{-20}$ )

A figura 20(a) mostra a solução inicial e o desajuste das curvas de  $g_z$ . A figura 20(b) mostra, de cara, o poder desta norma. Apesar de um fator  $\mu$  pequeno, a ajuda da norma de Mahalanobis no problema inverso é claramente percebida pelo ajuste das curvas de  $g_z$ , conseguindo ajustar inclusive a assimetria da curva, ainda que o modelo possa levar a interpretações erradas. A figura 20(c) mostra claramente como a função  $\theta(p)$  não foi levada em conta pelo algoritmo genético. Por último, a figura 20(d) mostra um ajuste quase perfeito do resíduo gaussiano coloca de forma proposital no dado.

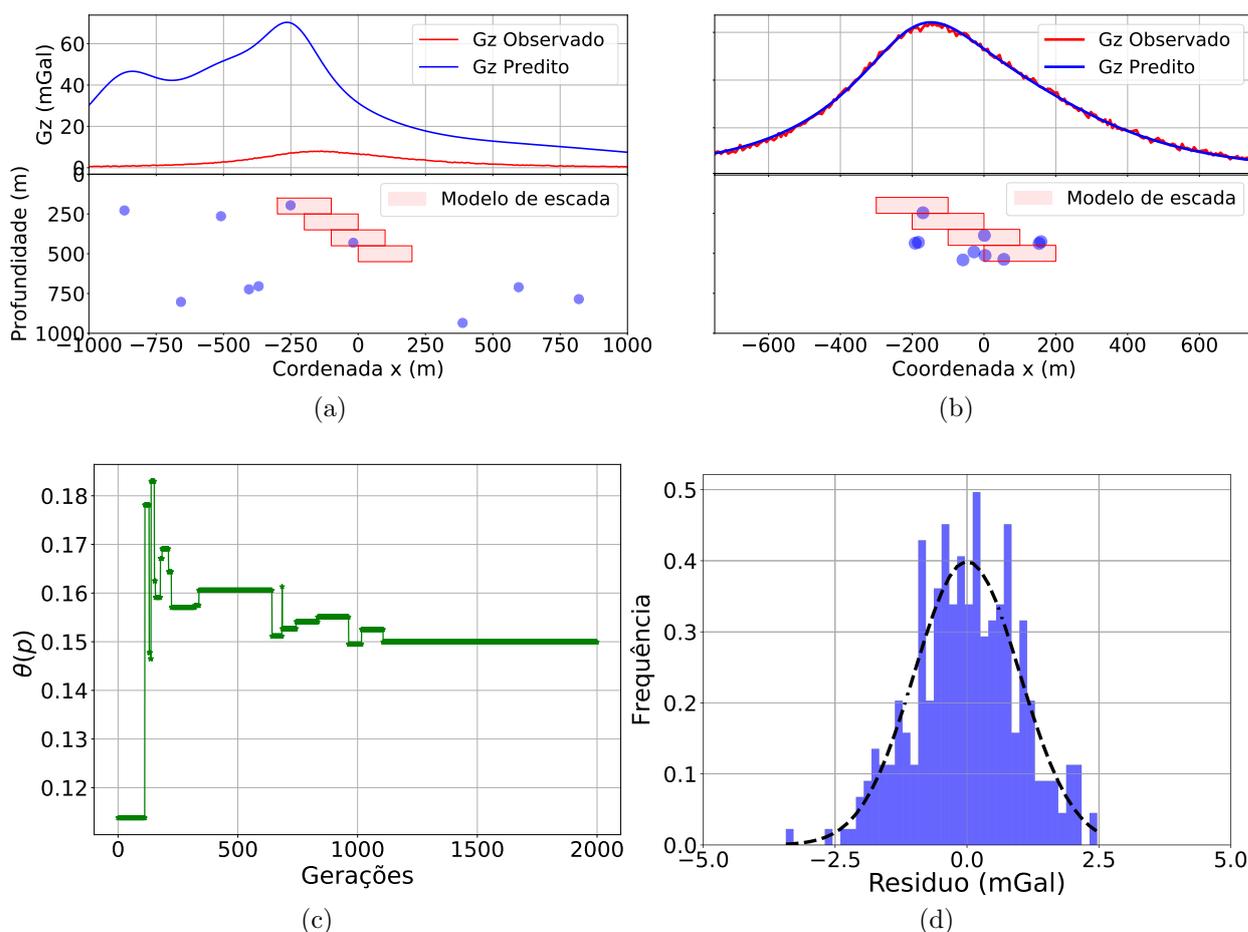


Figura 20 – Figura referente à norma de Mahalanobis e  $\mu = 1 \times 10^{-20}$  mostrando como a norma de mahalanobis foi capaz de ajustar melhor a curva de  $g_z$  que a norma L2, ainda que no problema subregularizado.

### 6.2.2.2 Super Regularizada ( $\mu = 1 \times 10^{10}$ )

A figura 21(a) mostra a solução inicial e o desajuste das curvas de  $g_z$ . Como esperado, a solução, ainda que colapsando as fontes pontuais para um centroide, este mesmo está longe de ser o centro de massa do modelo, como pode ser visto na figura 21(b). Novamente, a figura 21(c) mostra como a função de estabilização foi levada em conta no processo de inversão. Apesar do modelo não ter sido recuperado, o ajuste do resíduo não foi dos piores, tendo pelo menos média zero e desvio padrão 2.5, como podemos ver na figura 21(d).

### 6.2.2.3 Regularizada ( $\mu = 5 \times 10^1$ )

A figura 22(a) mostra a solução inicial e como a mesma não tem tendência nenhuma. O resultado obtido aqui deve convencer o leitor de que a norma de mahalanobis é decisiva no momento de encontrar direções preferenciais do modelo. A figura 22(b) mostra como o mergulho do modelo foi encontrado pelo algoritmo genético. Mesmo que não seja uma

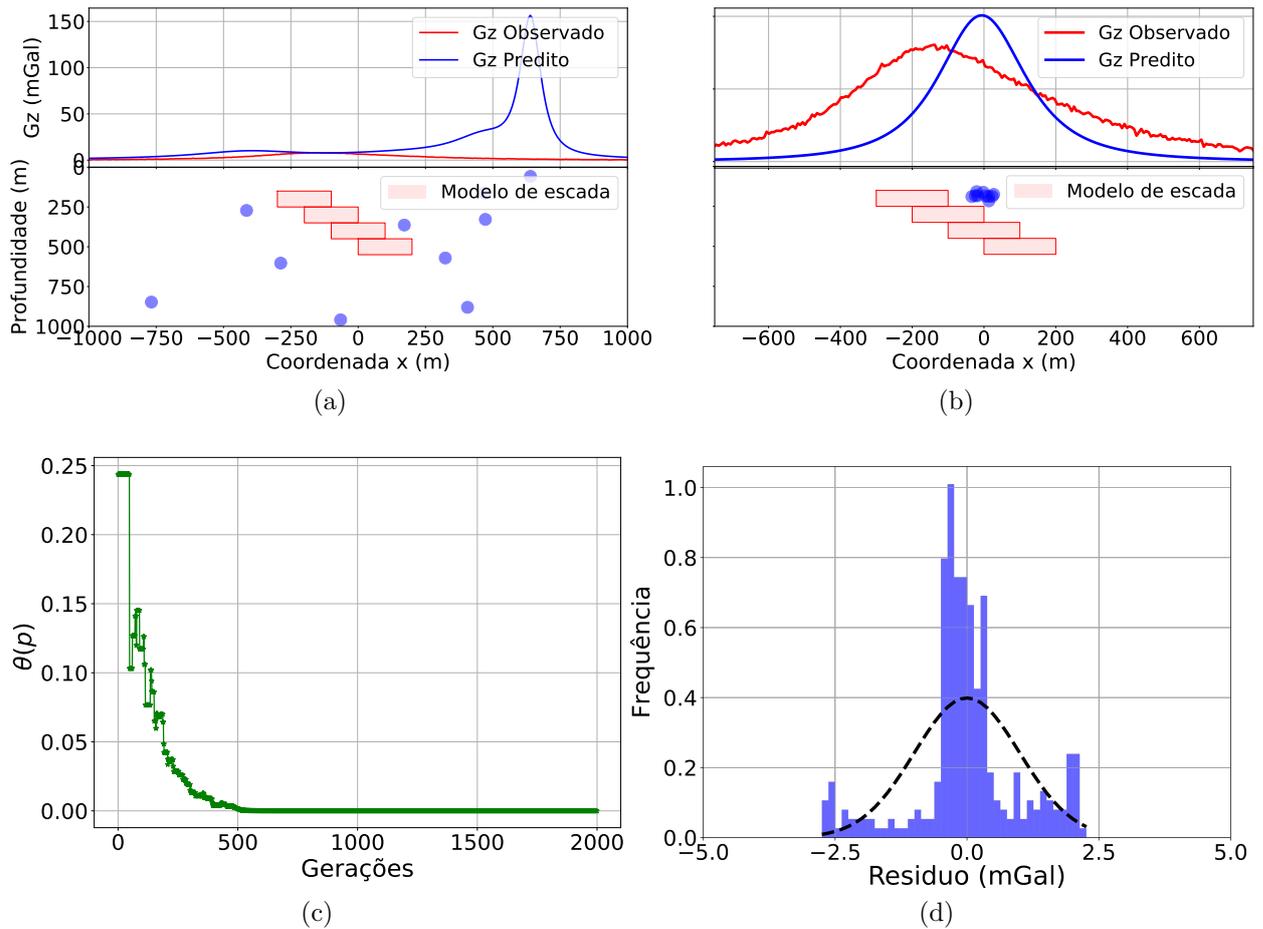


Figura 21 – Figura referente à norma de Mahalanobis e  $\mu = 1 \times 10^{10}$ , mostrando como o resíduo foi ajustado até certo ponto, porém o esqueleto do modelo não pôde ser recuperado.

direção preferencial canônica ( $\hat{x}$  ou  $\hat{z}$ ), a norma proposta foi eficiente a ponto de inverter o mergulho do modelo. O leitor deve atentar-se também a assimetria da curva  $G_z$  *Predito*, que tenta ajustar-se à curva em vermelho, como já era esperado. A Figura 22(c) mostra a curva de otimização de  $\theta(\mathbf{p})$ . Note na figura 22(d) que o erro gaussiano do resíduo foi ajustado.

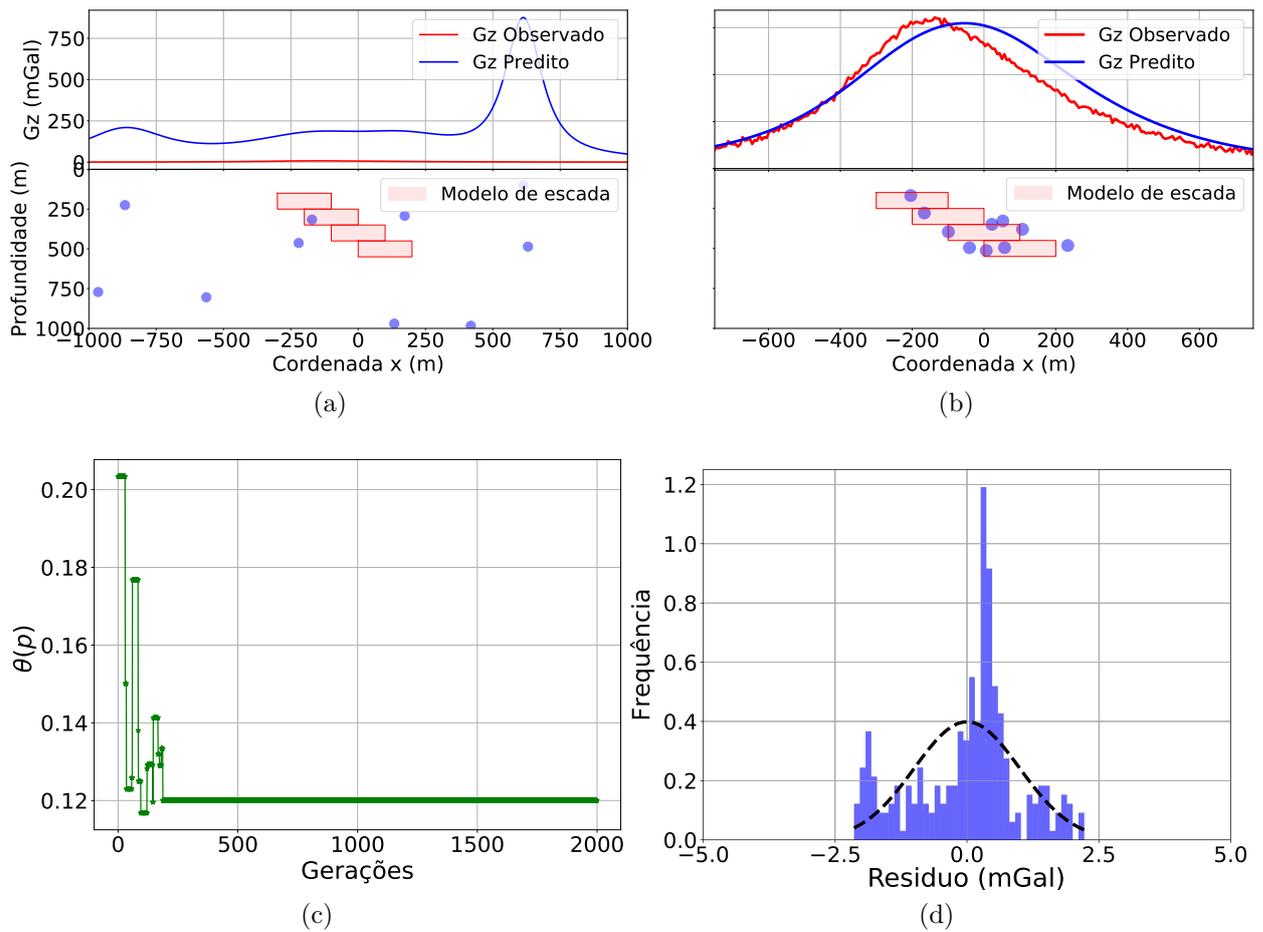


Figura 22 – Figura referente à norma de Mahalanobis e  $\mu = 5 \times 10^1$  mostrando como a inversão regularizada por esta norma foi capaz de recuperar o mergulho do modelo, ainda que abrindo problemas de interpretações para mais de um corpo em subsuperfície.

## 7 Conclusões e Perspectivas Futuras

Revisitamos o trabalho de [Bijani et al. \(2015\)](#) e apresentamos uma nova abordagem para o estabilizador proposto baseada na norma de Mahalanobis. A fim de estudar a influência desta norma para os resultados da inversão estabilizada, sintetizamos dois modelos a serem invertidos. Além disso, comparamos as normas de Mahalanobis e Euclidiana para a função de estabilização  $\theta(\mathbf{p})$ . Para realizar a inversão, devido a complexidade do problema, trabalhamos com o Algoritmo Genético, que foi implementado em linguagem Python. A facilidade desta abordagem se deve ao fato do Python ser uma linguagem multi-objetivo, i.e., capaz de performar algoritmos com muitos cálculos, ao mesmo tempo de ser talvez uma das melhores ferramentas de visualização de dados na atualidade.

Os resultados mostraram que a norma Euclidiana, quando utilizada, homogeneiza a solução, i.e., não abre espaço para múltiplos grupos de fontes pontuais. Este aspecto reduz a ambiguidade na interpretação, resultado que também foi obtido por [Bijani et al. \(2015\)](#) para o caso 3-D. Por outro lado, a utilização da norma de Mahalanobis foi decisiva para encontrar eixos preferenciais e de simetria quanto a geometria das soluções, i.e., apresentou-se melhor no momento da inversão de corpos alongados, ainda que não tenha sido eficiente para reduzir a ambiguidade **forma geométrica**  $\times$  **propriedade física** intrínseca ao problema inverso gravimétrico.

Para manter a continuidade do trabalho, o próximo passo claro é tentar implementar uma inversão multi-objetiva, valorizando não só soluções pouco esparsas, mas também, quando necessário, soluções cujos eixos preferenciais sejam alongados. Além disso, a complexidade computacional, assim como o espaço de memória do AG implementado, não foi estudado a fundo neste trabalho, deixando a perspectiva para um possível estudo da complexidade e como otimizá-la. Por último, deixamos em aberto a questão sobre a possibilidade de modelar fontes de anomalias magnéticas utilizando a mesma metodologia proposta neste trabalho.

# Referências

- ABREU, N. et al. Teoria espectral de grafos-uma introdução. *Notas do IIIo Colóquio de Matemática da Região Sul, Florianópolis, Santa Catarina, Brasil*, 2014. Citado 3 vezes nas páginas 5, 21 e 23.
- AYANI, M.; MACGREGOR, L.; MALLICK, S. Inversion of marine controlled source electromagnetic data using a parallel non-dominated sorting genetic algorithm. *Geophysical Journal International*, 2019. Citado na página 19.
- BACKUS, G. E.; GILBERT, J. Numerical applications of a formalism for geophysical inverse problems. *Geophysical Journal International*, Blackwell Publishing Ltd Oxford, UK, v. 13, n. 1-3, p. 247–276, 1967. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 20.
- BAR-HILLEL, A. et al. Learning a mahalanobis metric from equivalence constraints. *Journal of Machine Learning Research*, v. 6, n. Jun, p. 937–965, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 26.
- BIJANI, R. et al. Physical-property-, lithology-and surface-geometry-based joint inversion using pareto multi-objective global optimization. *Geophysical Journal International*, Oxford University Press, v. 209, n. 2, p. 730–748, 2017. Citado na página 19.
- BIJANI, R. et al. Three-dimensional gravity inversion using graph theory to delineate the skeleton of homogeneous sources. *Geophysics*, Society of Exploration Geophysicists, v. 80, n. 2, p. G53–G66, 2015. Citado 12 vezes nas páginas 5, 11, 12, 13, 14, 17, 19, 20, 25, 26, 33 e 47.
- BLAKELY, R. J. *Potential theory in gravity and magnetic applications*. [S.l.]: Cambridge university press, 1996. Citado 4 vezes nas páginas 13, 15, 20 e 33.
- BONDY, J. A.; MURTY, U. S. R. et al. *Graph theory with applications*. [S.l.]: Macmillan London, 1976. v. 290. Citado na página 21.
- BOSCHETTI, F.; MORESI, L. Interactive inversion in geosciences. *Geophysics*, Society of Exploration Geophysicists, v. 66, n. 4, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 28.
- COGGON, J. Electromagnetic and electrical modeling by the finite element method. *Geophysics*, Society of Exploration Geophysicists, v. 36, n. 1, p. 132–155, 1971. Citado na página 13.
- CORMEN, T. H. *Introduction To Algorithms*. [S.l.]: MIT Press, 2001. ISBN 9780262032933. Citado na página 25.
- COSTA, P. P. d. Teoria dos grafos e suas aplicações. Universidade Estadual Paulista (UNESP), 2011. Citado 5 vezes nas páginas 5, 14, 21, 22 e 23.
- FARQUHARSON, C. G.; OLDENBURG, D. W. A comparison of automatic techniques for estimating the regularization parameter in non-linear inverse problems. *Geophysical Journal International*, Blackwell Science Ltd Oxford, UK, v. 156, n. 3, p. 411–425, 2004. Citado na página 19.

- GOLDBERG, D. E.; HOLLAND, J. H. Genetic algorithms and. *Machine Learning*, v. 3, n. 2-3, p. 95–99, out. 1988. ISSN 0885-6125, 1573-0565. Disponível em: <<http://link.springer.com/article/10.1023/A%3A1022602019183>>. Citado na página 30.
- GOMES, J. da C. *GRAFOS: UMA MODELAGEM POSSÍVEL PARA AS PROVAS DO ENEM*. Tese (Doutorado) — UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 22.
- HANSEN, P. C. The truncatedsvd as a method for regularization. *BIT Numerical Mathematics*, Springer, v. 27, n. 4, p. 534–553, 1987. Citado na página 20.
- HOLLAND, J. H. et al. *Adaptation in natural and artificial systems: an introductory analysis with applications to biology, control, and artificial intelligence*. [S.l.]: MIT press, 1992. Citado na página 28.
- HOORY, S.; LINIAL, N.; WIGDERSON, A. Expander graphs and their applications. *Bulletin of the American Mathematical Society*, v. 43, n. 4, p. 439–561, 2006. Citado na página 23.
- IZMAILOV, A.; SOLODOV, M. Otimizacao, volume i. *IMPA, Rio de Janeiro*, 2009. Citado na página 28.
- KEAREY, P.; BROOKS, M.; HILL, I. *An introduction to geophysical exploration*. [S.l.: s.n.], 2013. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 15.
- KRUSKAL JR., J. B. On the shortest spanning subtree of a graph and the traveling salesman problem. *Proceedings of the American Mathematical Society*, v. 7, n. 1, p. 48–50, fev. 1956. ISSN 0002-9939. ArticleType: research-article / Full publication date: Feb., 1956 / Copyright © 1956 American Mathematical Society. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/2033241>>. Citado na página 25.
- LIMA, E. L. *Espaços métricos*. [S.l.]: Instituto de Matemática Pura e Aplicada, CNPq Rio de Janeiro, 1983. v. 4. Citado na página 14.
- LIMA, E. L. *Álgebra linear*. [S.l.: s.n.], 2006. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 26.
- MAESSCHALCK, R. D.; JOUAN-RIMBAUD, D.; MASSART, D. L. The mahalanobis distance. *Chemometrics and intelligent laboratory systems*, Elsevier, v. 50, n. 1, p. 1–18, 2000. Citado na página 20.
- MAHALANOBIS, P. C. On the generalized distance in statistics. In: NATIONAL INSTITUTE OF SCIENCE OF INDIA. [S.l.], 1936. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 26.
- MCLACHLAN, G. J.; MCLACHLAN, G. Mahalanobis distance. *Resonance*, Indian Academy of Sciences Bengaluru, v. 4, n. 06, 1999. Citado na página 20.
- MKHLENBEIN, H.; MAHNIG, T. Mathematical analysis of evolutionary algorithms for optimization. 2001. Citado na página 28.
- PARKER, R. L. Understanding inverse theory. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences*, v. 5, n. 1, p. 35–64, 1977. Citado na página 19.
- SCALES, J. A.; SMITH, M. L.; TREITEL, S. *Introductory geophysical inverse theory*. [S.l.]: Samizdat Press Golden, 1994. Citado na página 18.

- SCHNAIDT, S. et al. Pareto-optimal multi-objective inversion of geophysical data. *Pure and Applied Geophysics*, Springer, v. 175, n. 6, p. 2221–2236, 2018. Citado na página 19.
- TARANTOLA, A. *Inverse problem theory and methods for model parameter estimation*. [S.l.]: siam, 2005. v. 89. Citado 3 vezes nas páginas 13, 18 e 20.
- TELFORD. *Applied geophysics*. [S.l.]: Cambridge university press, 1990. v. 1. Citado na página 13.
- TIKHONOV, A. N.; ARSENIN, V. I. *Solutions of ill-posed problems*. [S.l.]: Winston, Washington, DC, 1977. v. 14. Citado 3 vezes nas páginas 13, 19 e 20.
- UIEDA, L.; BARBOSA, V. C. Robust 3d gravity gradient inversion by planting anomalous densities. *Geophysics*, Society of Exploration Geophysicists, v. 77, n. 4, p. G55–G66, 2012. Citado na página 17.
- VALENCIA, P. E. Optimizacion mediante algoritmos geneticos. In: *Anales del Instituto de Ingenieros de Chile*. [S.l.: s.n.], 1997. v. 109, n. 2. Citado na página 28.
- WHITE, J. E. *Underground sound: Application of seismic waves*. [S.l.]: Elsevier Amsterdam, 1983. v. 253. Citado na página 13.
- ZHDANOV, M. S. *Inverse theory and applications in geophysics*. [S.l.]: Elsevier, 2015. v. 36. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 20.