

PROBLEMAS INVERSOS: CONCEITOS BÁSICOS E APLICAÇÕES

Haroldo Fraga de Campos Velho – haroldo@lac.inpe.br

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, Lab. de Computação e Matemática Aplicada
Av. dos Astronautas, 1758 – Cx. Postal 515 – 12201-970, São José dos Campos, SP.

***Resumo.** Estas são as notas do Mini-Curso apresentado durante o IV Encontro de Modelagem Computacional em Nova Friburgo (RJ), promovido pelo IPRJ-UERJ. O Mini-Curso apresenta uma introdução sucinta aos problemas inversos. Primeiramente, conceito e classificação de problemas inversos são descritos, para então serem comentadas algumas técnicas “clássicas” de solução – a ênfase do Mini-Curso estará centrada na técnica de regularização, onde vários exemplos são apresentados e discutidos. Contudo, a parte final do Mini-Curso está voltada a técnicas novas de solução de problemas inversos. Duas dessas técnicas serão analisadas: redes neurais e algoritmos genéticos. Estas duas técnicas serão testadas em problema inverso de condução de calor.*

***Palavras-chave:** Problemas inversos, Soluções regularizadas, Redes neurais, Algoritmos genéticos.*

1. INTRODUÇÃO

A partir de certo estágio do desenvolvimento da sociedade humana, o conhecimento tornou-se cada vez mais compartimentado, primeiramente a ciência é separada em grandes áreas: culturais, biomédicas e exatas. Estas por sua vez se subdividem em dois grandes grupos: ciências básicas e aplicadas; para se subdividirem mais ainda. Por exemplo, nas áreas de ciências exatas tem-se a matemática, a física e a química como exemplos de ciências básicas e as engenharias, geociências e astronomia podem ser encaradas como áreas de aplicação destas ciências. Todavia, cada uma destas ciências, sejam básicas e/ou aplicadas, também podem ser subdivididas em *pura* e *tecnológica*, teórica e experimental. O conhecimento humano é hoje um grande mosaico de especialidades. Há, porém, áreas de estudo que requerem conhecimento de várias especialidades: são as áreas (ciências) multidisciplinares. Problemas inversos (PIs) são exemplos de área multidisciplinar.

A distinção entre o que seja um problema direto ou inverso para um dado fenômeno, está ligada a nossa cultura, isto é, trata-se do que se interpreta como causa e efeito! É atribuído a Oleg Mikailivitch Alifanov (www.me.ua.edu/inverse/whatis.html), proeminente pesquisador russo na área de problemas inversos, a afirmação “a solução de um problema inverso consiste em determinar causas baseado na observação dos seus efeitos”. Do ponto

de vista prático, convencionou-se chamar problema direto àquele em que o estudo antecedeu-se historicamente. Tal ambigüidade (direto/inverso), pode ser exemplificada do seguinte modo, se o modelo matemático é expresso por $A(u) = f$, o modelo inverso pode ser representado por: $A^{-1}(f) = u$. Por outro lado, definindo-se $B \equiv A^{-1}$, o par problema direto-inverso torna-se: $B(f) = u \Rightarrow B^{-1}(u) = f$!

Como se percebe, a própria definição de PI pode apresentar controvérsias. Entretanto, neste trabalho, a observação de Oleg M. Alifanov é a base para a conceituação de PIs. Uma definição, bem como classificações de PIs, é apresentada na próxima seção. Algumas técnicas de solução de problemas inversos são apresentadas. Estes métodos são exemplificados em algumas aplicações: geofísica, meteorologia, oceanografia e transferência de calor. As últimas seções deste texto estão voltadas a duas técnicas novas: redes neurais e algoritmo genético.

Estas notas estão fortemente baseadas no *Curso de Problemas Inversos*, disciplina regular do Curso de Pós-graduação em Computação Aplicada (CAP) do Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE) (<http://www.lac.inpe.br/cap/>) - ministrada pelo Dr. Fernando M. Ramos, e na experiência do autor na área. Parte deste curso está sendo disponibilizado na internet, graças ao trabalho voluntário de Élcio H. Shiguemori. A seção de novas metodologias foi preparada a partir de material elaborado por Élcio H. Shiguemori (redes neurais) e Leonardo D. Chiwiacowsky (algoritmos genéticos), ambos alunos da CAP-INPE (mestrado e doutorado, respectivamente) realizando pesquisas na área de problemas inversos.

Durante os anos de pesquisa na área, muitos colegas do INPE e de outras instituições estão associados ao nosso trabalho: Atair Rios Neto, Ezzat S. Chalhoub, Fernando Manuel Ramos, José Demísio S. da Silva, Nandamudi L. Vijaykumar, Nelson J. Ferreira, Stephan Stephany, Domenico Anfossi, Gervásio A. Degrazia, Julio Cezar R. Claeysen, Marco Tulio Vilhena, Pedro P. B. de Oliveira; bem como estudantes de pós-graduação (atuais ou já formados) que trabalham (ou trabalharam) sob minha supervisão ou junto ao grupo de problemas inversos do INPE: Alexandre G. Nowosad, Débora R. Roberti, Élcio H. Shiguemori, Fabrício P. Härter, João C. Carvalho, Leonardo D. Chiwiacowsky, Marcelo R. de Moraes, Mario R. Retamoso, Wagner B. Muniz. A todos meu especial agradecimento. Deixo claro, entretanto, que somente ao autor deve ser creditado quaisquer erros ou imperfeições no texto.

Por último, quero agradecer ao convite do Instituto Politécnico da Universidade do Estado do Rio de Janeiro para ministrar este Mini-Curso, em particular ao amigo Prof. Antônio José da Silva Neto, exemplo de dedicação e competência.

2. PROBLEMAS INVERSOS: CONCEITOS BÁSICOS

É creditado ao astrofísico georgiano Viktor Amazaspovich Ambartsumian (<http://www.phys-astro.sonoma.edu/BruceMedalists/Ambartsumian/>) como aquele que cunhou a expressão *problema inverso* (PI). Uma definição bastante abrangente, porém, é apresentada no livro de Engl et al. (1996): “*Resolver um problema inverso é determinar causas desconhecidas a partir de efeitos desejados ou observados*”. Note-se que a área de projeto ótimo ou projeto inverso (*inverse design*) também está incluída nesta definição. Em geral, as observações são *imprecisas* (dados contaminados com ruídos ou erros

classificação tinha em mente como estimativa de função a noção de *função contínua*, desta forma a determinação de coeficientes c_k da expansão de uma função $f(x) = \sum_k c_k f_k(x)$ caracterizar-se-ia como estimação de parâmetros e não estimação de função.

A classificação do mostrada no item 5 foi proposta recentemente (1999) e está baseada na dimensão do modelo do fenômeno físico (problema direto – PD) e na dimensão da quantidade a ser estimada (problema inverso – PI) se finita (f) ou infinita (∞). Problemas inversos do tipo reconstrução de imagens são exemplos de PI do Tipo-1, estimação de parâmetros podem ser classificados como do Tipo-2 ou Tipo-3, enquanto que estimação de função contínua é sempre um problema do Tipo-3.

Matematicamente problemas inversos pertencem à classe de problemas mal-postos. No início deste século o matemático francês Jacques Hadamard definiu um problema bem-posto como sendo aquele cumpre as três condições abaixo:

- (i) Existe solução;
- (ii) A solução é única;
- (iii) A solução tem uma dependência contínua (suave) com os dados de entrada.

Assim, o problema é dito mal-posto se alguma das condições acima não é satisfeita. Problemas discretos e finitos são chamados mal condicionados, se a condição (iii) não se cumpre. Em geral, nenhuma das condições de Hadamard é satisfeita num problema inverso!

Exemplos simples podem ser usados para ilustrar os conceitos acima. Por exemplo, considere a solução da equação do 1º grau:

$$2x - 4 = 0 \tag{1}$$

o problema (direto) algébrico acima tem solução única: $x=2$. O problema algébrico inverso

$$ax + b = 0 \tag{2}$$

com $x=2$, não apresenta solução única. O problema de estabilidade é exemplificado por uma equação algébrica do 2º grau:

$$ax^2 - 2x + 1 = 0 \tag{3}$$

que para $a=1$, possui as seguintes soluções: $x_1 = x_2 = 1$. Introduzindo um erro de 1% no coeficiente a , isto é, $a = 1,01$ – a solução da Eq. (3) torna-se: $x_{1,2} = 1 \pm 0,1i$, sendo i a unidade dos números imaginários. Ou seja, 1% de ruído em a , Eq. (3) não tem mais solução no campo dos números reais!

Mesmo sendo uma área em franco desenvolvimento, PIs é um capítulo relativamente recente na ciência. Há legítimos PIs que não eram reconhecidos com tal. Contudo, existem várias outras áreas da ciência que estão correlacionadas com esta nova área, seja pela natureza do objetivo de estudo, seja pelo ponto de vista metodológico. A lista a seguir apresenta as áreas correlatas aos PIs:

- Identificação de Sistemas;
- Controle Ótimo em Sistemas Estocásticos;

- Álgebra Linear Computacional em Problemas de Posto Incompleto;
- Reconstrução de Imagens;
- Teoria de Filtragem;
- Assimilação/Iniciação de Dados;
- Teoria da Estimção.

Porque PIs emergiram como uma nova área da ciência? Devido a sua importância científica, econômica, social e mesmo política.

Por exemplo, *ondas de som* constituem-se um dos resultados mais significativos a partir de mapas da radiação cósmica de fundo em microondas (Hu, 2000), ou RCFM, sendo uma previsão de modelos de instabilidade gravitacional da teoria da relatividade geral. Mapa de RCFM é um modelo matemático, onde o padrão de flutuações de temperatura é dado por uma expansão em harmônicos esféricos. Outro exemplo, o telescópio espacial Hubble levou cerca de 10 anos para ser construído e custou cerca de US\$ 10 bilhões, depois de seu lançamento notou-se que as imagens produzidas não tinham a nitidez desejada (projetada). O problema apresentado na fabricação das lentes do telescópio tem sido solucionado por software (métodos matemáticos de PIs – ver Hanisch e White, 1993). Centenas de exemplos podem ser citados, para finalizar lembramos a revolução na medicina - e na sociedade, desde a introdução da tomografia computadorizada, um clássico problema inverso.

3. MÉTODOS DE SOLUÇÃO DE PROBLEMAS INVERSOS

Talvez a parte central do curso seja a descrição de métodos de solução de PIs. Embora as propriedades matemáticas sejam relevantes na exposição e desenvolvimento da metodologia, optou-se por uma apresentação sem muitos detalhes matemáticos, onde as técnicas são aplicadas e, espera-se, compreendidas com os exemplos do texto. Uma lista, não exaustiva, de métodos de solução de PIs segue:

- Inversão direta;
- Decomposição em valores singulares;
- Mínimos quadrados e variantes (mínimos quadrados ponderados);
- Métodos de regularização;
- Métodos variacionais;
- Outros (molificação, métodos bayesianos, filtros digitais, redes neurais, etc).

Métodos explícitos, ou inversão direta, não são métodos gerais e, em geral, existe mais um interesse acadêmico do que um esquema metodológico geral a ser seguido. Para exemplificar e para apresentar um problema que será usado para testar novas técnicas, seja o problema inverso de identificação da condição inicial em condução do calor:

$$T_t = \mathbf{a} T_{xx}; \quad \text{em } t > 0, x \in (0, L); \quad T(x, 0) = f(x), \quad T_x(0, t) = T_x(L, t) = 0 \quad (4)$$

cuja solução exata do problema direto é

$$T(x, t) = \sum_{m=0}^{\infty} e^{-b_m^2 t} \frac{X(\mathbf{b}_m, x)}{N(\mathbf{b}_m)} \int_0^1 X(\mathbf{b}_m, x') f(x') dx', \quad (5)$$

onde $X(\mathbf{b}_m, x)$ e $N(\mathbf{b}_m)$ são autofunção e norma características do problema (Ösizik, 1980; Muniz et al, 1999). A solução exata do problema inverso para um perfil de temperatura $T(x)$ medida num tempo $t=\mathbf{t}$ é:

$$f(x) = \sum_{m=0}^{\infty} e^{b_m^2 t} \frac{X(\mathbf{b}_m, x)}{N(\mathbf{b}_m)} \int_0^1 X(\mathbf{b}_m, x') T(x', \mathbf{t}) dx'. \quad (6)$$

Pode-se mostrar (Muniz et al., 1999) que a solução (6) define o PI como um problema mal posto, pois viola a 3ª condição de Hadamard.

Outro problema resolvido explicitamente é a solução de Burgraff para identificação de fluxo superficial em problemas de condução de calor (ver Beck et al., 1985, página 67). Há ainda outros exemplos, porém, o caso mais importante é o de problemas lineares de dimensão finita. Neste caso destaca-se o método da decomposição de valores singulares.

2.2 Decomposição de Valores Singulares

Considerando o modelo linear discreto expresso por $\mathbf{d}=\mathbf{G}\mathbf{m}$, onde $\mathbf{d} = [d_1 \ d_2 \ \dots \ d_D]^T$ é o vetor de dados ou observações, $\mathbf{m} = [m_1 \ m_2 \ \dots \ m_M]^T$ é o vetor de parâmetros a ser determinado e

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} g_{11} & \dots & g_{1M} \\ \vdots & & \vdots \\ g_{D1} & \dots & g_{DM} \end{bmatrix} \quad \text{é matriz } D \times M. \quad (7)$$

Se $D=M$ a solução formal é dada pela inversão direta: $\mathbf{m}=\mathbf{G}^{-1}\mathbf{d}$. Na prática porém a matriz \mathbf{G} é frequentemente quase-singular ou mesmo singular e o procedimento é inaplicável. Para avaliar como uma matriz mal condicionada por degenerar a solução do PI, usa-se a decomposição de \mathbf{G} em valores singulares (*singular value decomposition* - SVD) (Press et al, 1992, página 52; ver também na internet: <http://www.nr.com/>)

$$\mathbf{G} = \mathbf{U} [\text{diag}(\mathbf{w}_j)] \mathbf{V}^T = \mathbf{U}\mathbf{W}\mathbf{V}^T \quad (8)$$

onde \mathbf{U} e \mathbf{V} são matrizes quadradas ortogonais, isto é: $\mathbf{U}^T\mathbf{U} = \mathbf{I}_D \cdot D$ e $\mathbf{V}^T\mathbf{V} = \mathbf{I}_M \cdot M$. As colunas de \mathbf{U} são autovetores de $\mathbf{G}\mathbf{G}^T$ e as colunas \mathbf{V} são autovetores de $\mathbf{G}^T\mathbf{G}$. Os w_j^2 são autovalores ordenados ($w_1 \geq w_2 \geq \dots \geq w_M$) da matriz $\mathbf{G}^T\mathbf{G}$. A inversa da matriz \mathbf{G} é

$$\mathbf{G}^{-1} = \mathbf{V}[\text{diag}(\mathbf{w}_j^{-1})] \mathbf{U}^T. \quad (9)$$

Se \mathbf{G} é matriz não singular. Se \mathbf{G} é matriz quase-singular $w_{r+1} \approx w_{r+2} \approx \dots \approx w_M \approx 0$ $\text{posto}(\mathbf{G}) = r$ ($\text{nulo}(\mathbf{G}) = M-r$). Erros experimentais em \mathbf{d} (erros de arredondamento, etc) serão enormemente amplificados e contaminarão a solução inversa! A análise pode ser

repetida para problemas indeterminados ($M > D$). A indeterminação neste caso aparecerá de forma explícita na decomposição de G :

$$G = U \begin{bmatrix} \text{diag}(w_j) \\ 0 \end{bmatrix} V^T \quad (10)$$

implicando que a inversa não existe.

Mínimos Quadrados ($M < D$). Se a matriz G é singular ou quase-singular, uma abordagem natural (mas não única e nem sempre a mais correta) é determinar a solução do sistema $Gm = d$ pelo método dos mínimos quadrados:

$$\hat{m} \Rightarrow \min_m \|d - Gm\|_2^2 \Leftrightarrow \hat{m} = (G^T G)^{-1} G^T d = G^+ d \quad (11)$$

a solução geométrica do problema de otimização é dado pela solução algébrica com a ajuda da inversa generalizada de Moore-Penrose G^+ , no qual $\text{posto}(G) = M$. Antes de prosseguir, é importante destacar algumas observações relevantes:

1. Se $\text{nulo}(G) = 0$, então \hat{m} existe e é única para sistemas lineares.
2. Se os erros associados as medidas experimentais d forem independentes, aditivos e gaussianos, \hat{m} corresponde ao estimador de máxima verossimilhança, resumindo: Máxima Verossimilhança + Hipótese Gaussiana = Mínimos Quadrados!
3. Mínimos Quadrados Ponderados. É somente uma generalização da função custo $J(m)$ expressa na Eq. (11):

$$\hat{m} \Rightarrow \min_m \|d - Gm\|_W^2 \quad \text{ou,} \quad J(m) = (d - Gm)^T W (d - Gm) \quad (12)$$

onde a matriz W é matriz simétrica positiva definida como dimensão $D \times D$.

4. Dois importantes casos de problemas lineares finitos são:
 - Problemas indeterminados ($D > M$): solução é dada pela *norma mínima de mínimos quadrados* (*minimum norm least square*): Min. Quad. + $\min(m^T m)$.
 - Problemas mal-condicionados: Este caso é mais simples: se $w_{r+1} \approx w_{r+2} \approx \dots \approx w_M \approx 0$ a solução é obtida fixando-se $w_{r+1}^{-1} = \dots = w_M^{-1} = 0$; e a inversa generalizada será dada por:

$$\hat{m} = G^+ d = V \begin{bmatrix} \text{diag}(w_j^{-1}) \\ 0 \end{bmatrix} U^T d. \quad (13)$$

2.3 Métodos de Regularização

Vimos que no caso particular de sistemas lineares indeterminados ($D < M$) a solução proposta apresenta um termo adicional: $m^T m$ - a norma L_2 do vetor de parâmetros! Isto pode ser generalizado: para resolver problemas mal-postos é necessário fornecer informação adicional! Na década de 60 vários pesquisadores também notaram este fato. Nomes como V.K. Ivanov (1962), D.L. Phillips (1962) e S. Twomey (1963) merecem destaque, mas foi com o trabalho de Andrei Nikolaevich Tikhonov em 1963, o início de uma formulação geral para problemas mal-postos, chamada *regularização* ou *método de regularização*. O Prof. Tikhonov foi um matemático proeminente e trabalhou no prestigioso Instituto de Matemática Steklov da Academia Russa de Ciências (matemáticos como A.N. Krylov, D.K. Faddeev, L.S. Pontryagin, S.L. Sobolev, A.N. Kolmogorov, A.A. Markov, formam uma pequena lista de importantes cientistas do mesmo Instituto), tendo trabalhos importantes em topologia, análise funcional, matemática computacional e física-matemática.

O método da regularização consiste na determinação da solução aproximada mais suave compatível com os dados de observação, para certo nível de ruído. A busca da solução mais suave (regular) é uma informação adicional, que transforma o problema mal-posto num problema bem-posto (ver Figura 2).

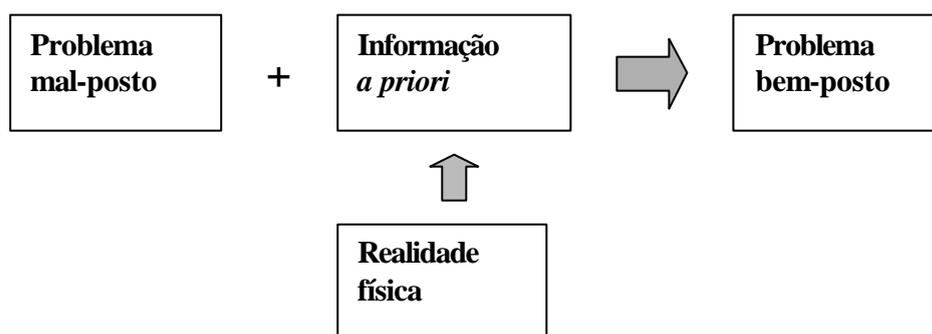


Figura 2: Idéia básica do método da regularização.

Na implementação matemática do método o PI é formulado como um problema de otimização com restrições:

$$\min_{u \in U} \|A(u) - f^d\|_2^2 \quad \text{sujeito a} \quad O[u] \leq r \quad (14)$$

onde $A(u) = f^d$ representa o modelo direto e $W[u]$ é o operador de regularização (Tikhonov e Arsenin, 1977). A técnica dos multiplicadores de Lagrange permite colocar na mesma função custo os objetivos de fidelidade dos parâmetros com o modelo direto e a de regularidade (suavidade) exigida da quantidade desconhecida:

$$\min_{u \in U} \left\{ \|A(u) - f^d\|_2^2 + \alpha \|W[u]\| \right\} \quad (15)$$

onde \mathbf{a} é o parâmetro de regularização. Note que para $\mathbf{a} \rightarrow 0$ o termo de fidelidade dos dados na função objetivo é superestimado, enquanto que para $\mathbf{a} \rightarrow \infty$ toda a informação contida no modelo matemático é perdida.

Vários tipos de operadores de regularização foram sendo investigados, desde o trabalho dos pioneiros na área. Aqui somente serão comentadas duas classes destes operadores de regularização.

Regularização de Tikhonov: o operador é expresso por:

$$W[u] = \sum_{k=0}^p \mathbf{m}_k \|u^{(k)}\|_2^2 \quad (16)$$

onde $u^{(k)}$ denota a k -ésima derivada (diferença) e $\mathbf{m}_k > 0$. Em geral $\mathbf{m}_k = \delta_{kj}$ (delta de Kronecker) e o operador torna-se

$$W[u] = \|u^{(j)}\|_2^2.$$

e a técnica é chamada de regularização de Tikhonov de ordem j . O efeito da regularização de Tikhonov-0 é reduzir oscilações na função u (busca por funções suaves). Já na regularização de 1ª ordem torna $u^{(1)} \approx 0 \Rightarrow u$ é aproximadamente constante.

Regularização pelo Princípio da Máxima Entropia: De maneira similar à técnica de Tikhonov, o método da máxima entropia busca regularidade global, produzindo as reconstruções as mais suaves com os dados disponíveis.

O princípio da máxima entropia foi proposto por Jaynes (1957) como um critério geral de inferência, baseado na teoria matemática da informação de Shannon (Shanon e Weaver, 1949). A figura 3 mostra diferentes probabilidades num fenômeno em que 8 estados são possíveis, a condição de máxima entropia ocorre quando todos os estados são igualmente prováveis, Figura 3a, enquanto que o estado de mínima entropia é ilustrado na Figura 3b: todos os estados tem probabilidade nula de ocorrer, com exceção um único estado.

Da mesma forma que a regularização de Tikhonov, pode ser estabelecida operadores de entropia de várias ordens. Uma expressão genérica para regularização entrópica é:

$$S(u) = \sum_{q=1}^N s_q \log(s_q), \quad \text{com} \quad s_q = r_q^{(k)} / \sum_{q=1}^N r_q^{(k)}; \quad (17)$$

válida para o caso discreto. Neste contexto as diferentes ordens do operador são (Campos Velho e Ramos, 1997; Ramos et al., 2000, Campos Velho et al., 2000):

$$r_q^{(k)} = \begin{cases} u_q & \text{para } k = 0 \\ u_{q+1} - u_q + (u_{\max} - u_{\min}) + V & \text{para } k = 1 \\ u_{q+1} - 2u_q + u_{q-1} + 2(u_{\max} - u_{\min}) + V & \text{para } k = 1 \end{cases} \quad (18)$$

onde $r_q^{(k)}$ representa a k -ésima diferença (derivada) da quantidade a ser estimada. A função de entropia atinge seu valor máximo $S_{\max} = \log(N_q)$ quando a função de densidade de probabilidade é uniforme e tem seu valor mínimo $S_{\min} = 0$ se os valores de r_q estiverem distribuídos por uma delta de Dirac (Muniz et al., 2000).

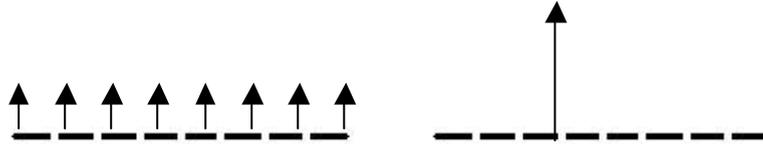


Figura 3: (a) estados igualmente prováveis, (b) todos estados tem probabilidade nula de ocorrência exceto um único estado com probabilidade de 100% de ocorrência.

Determinação do Parâmetro de Regularização. Para se ter uma teoria completa é necessário ter-se métodos para calcular o parâmetro \mathbf{a} na Eq. (20). O parâmetro de regularização é que vai realizar o balanço entre o termo da diferença quadrática entre os dados e o modelo – termo de fidelidade dos dados - e o termo de regularização, termo de suavidade dos dados. A literatura registra vários métodos para a determinação do multiplicador de Langrange (Bertero e Bocaccio, 1998), como o método da curva L e o da validação cruzada. Outra metodologia empregada está baseada no critério da discrepância de Morozov .

O critério baseia-se no fato de que a diferença, ou *discrepância*, entre os dados observacionais e os dados do modelo devem ter a mesma magnitude do erro de medida. Desta maneira, se \mathbf{d} é erro no processo de medida, \mathbf{a}^* é a raiz da equação

$$\|A(u) - f\|_{\mathbf{a}^*} = \mathbf{d} . \quad (19)$$

O critério da discrepância foi validado também para o caso do Operador de entropia de alta ordem (Muniz et al., 2000).

Solução do Problema de Otimização. A solução é obtida resolvendo o problema de otimização (15). Há uma grande variedade de métodos na literatura, divididos em 2 grandes grupos: métodos determinísticos e estocásticos:

- **Deterministas:** máxima descida, método de Newton, quase-Newton. Gradiente Conjugado, Método de Levenberg-Marquadt, Método Simplex.
- **Estocásticos:** Recozimento simulado (SA), Algoritmos genéticos (GA), busca Tabu, otimização extrema.
- **Métodos híbridos:** Combinam a estratégia de busca global dos métodos estocásticos com busca local dos métodos deterministas (GAPlex, SAPlex)

4. APLICAÇÕES

Há hoje um número explosivo de aplicações de problemas inversos usando soluções regularizadas. Aqui veremos somente 3, com o intuito de exemplificar o método.

4.1 Inversão Magnetotelúrica (IM)

Áreas clássicas de problemas inversos são: geofísica, transferência de calor, reconstrução de imagens. A área de geofísica está ligada ao maior negócio do planeta, a área do petróleo, em particular em prospecção. Há outras aplicações relevantes em geofísica, como mineração e busca de água subterrânea. A metodologia mais empregada nesta área é o uso de métodos sísmicos, onde cargas (excitação artificial no sistema) são detonadas e registros são captados pelo geofones. Inversão magnetotelúrica está baseada em fontes eletromagnéticas naturais – raios cósmicos por exemplo – onde magnetômetros são usados para registrar o campo geomagnético na superfície da Terra. O problema direto é estabelecido pelas equações de Maxwell do eletromagnetismo.

Uma idéia para resolver o problema é a busca de soluções regulares, mas com descontinuidade de forma. Um operador de regularização com esta propriedade é obtido *minimizando* a entropia de 1ª ordem (Campos Velho e Ramos, 1997).

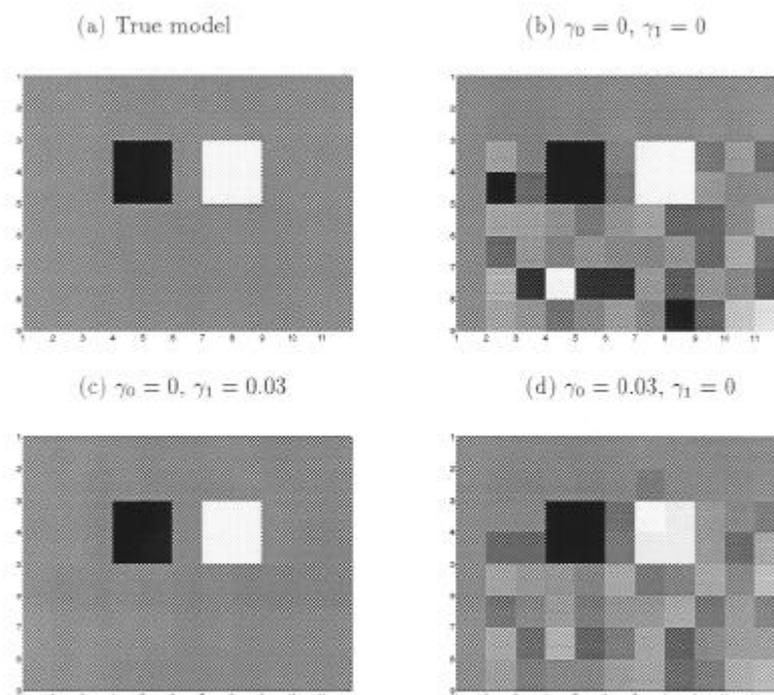


Figura 4: Mapas de condutividade elétrica em IM: (a) modelo verdadeiro, (b) inversão sem regularização, (c) regularização MinEnt-1, (d) regularização MaxEnt-0.

4.2 - Estimação de Perfis de Temperatura Atmosféricos

Uma das conquistas da tecnologia moderna foi a capacidade de melhorar significativamente a previsão do tempo. Uma das etapas essenciais neste processo foi a

melhoria do sistema de observação da Terra. Assim satélites meteorológicos fazem parte deste sistema. Dividindo a atmosfera em vários níveis de estratificação e usando a aproximação do corpo negro para cada camada atmosférica, a energia radiante é transferida de acordo com a equação de Schwarschild:

$$\tilde{I}_l(t_l) = I_l(t_l) - I_l(t_l^{(s)}) = - \int_{t_l^{(s)}}^{t_l} B_l(t_l) dt_l \quad (20)$$

$$B_l(T) = \frac{2hI^3}{c^2 [e^{hI/(KT)} - 1]} \quad (\text{função de Planck})$$

O problema inverso foi resolvido com um operador entrópico de regularização de 2ª ordem (Ramos et al., 1999)

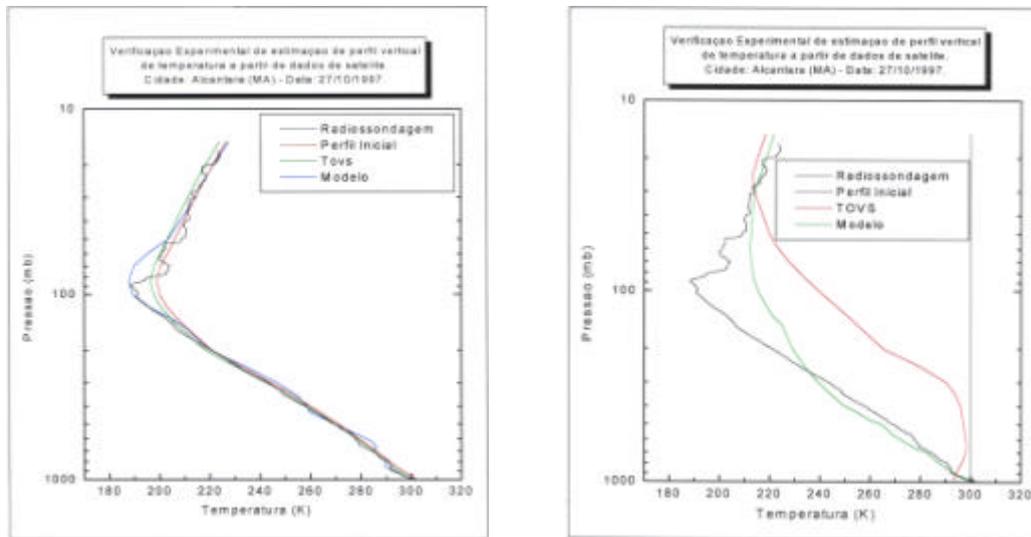


Figura 5: Estimação do perfil vertical de temperatura atmosférica onde é mostrado a dependência da estimativa inicial

4.3 Estimação de Propriedades em Ótica Hidrológica

O modelo matemático para representar a intensidade luminosa pode ser expresso pela equação de Boltzmann linear:

$$m \frac{dL(\mathbf{z}, \mathbf{x})}{dz} + L(\mathbf{z}, \mathbf{x}) = \frac{\overbrace{b}^{v_0}}{a+b} \int_{\mathbf{x}'} \mathbf{b}(\mathbf{z}, \mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}) d\mathbf{W} + S \quad (21)$$

onde L é a radiância, \mathbf{z} é a espessura ótica, a e b são os coeficientes de absorção e espalhamento, respectivamente (a razão $b/(a+b)$ é o albedo), S é o termo de fonte ou sumidouro, \mathbf{x} é a direção do fóton. Três métodos tem sido usados para resolver o problema

direto: inserção invariante (Stephan et al., 1998; 2000), método S_N analítico (Chalhoub et al., 2000; Chalhoub e Campos Velho, 2001 e 2002) e LTS_N (Retamoso et al., 2000 e 2001).

Vários parâmetros (funções) na Eq.(21) tem importância econômica, ecológica e militar. A tabela abaixo ilustra alguns casos resolvidos no grupo de problemas inversos do INPE, onde CC significa *condição de contorno*.

Tabela 2: Estimação de propriedades em ótica hidrológica.

Casos	Propriedade	Método Direto	Otimizador	Regulariz.
(1)	$S(\zeta)$	Inser. Inv.	Q-Newton (Nag)/GA	-
(2)	$S(\zeta), a, b$	Inser. Inv.	Q-Newton (Nag)	MaxEnt-0
(3)	$\mathbf{b}(\mathbf{x})$	S_N padrão	Q-Newton (Nag)	MaxEnt-0
(4)	$\mathbf{b}(\mathbf{x}), \omega_0$	S_N analítico	L-M (IMSL)	-
(5)	C.C.	LTS_N	Q-Newton (Nag)	MaxEnt-0

5. NOVAS METODOLOGIAS

Praticamente a cada dia surge uma nova metodologia de resolução de problemas inversos, por exemplo a aplicação de uma nova função de regularização usando a entropia não-extensiva (Shiguemori et al, 2002). Mas neste texto nos restringimos a comentar duas técnicas que emergiram da inteligência artificial (computacional).

5.1 Algoritmo Genético

A idéia de *computação evolucionária* apareceu na década de 60, mas foi com o livro de Holland (1975) é que nasce o algoritmo genético (AG). Estes algoritmos usam como modelos a teoria da evolução de Charles Darwin: elementos computacionais *gerando* descendentes para no final sobreviverem os mais *aptos*. Na verdade AG são algoritmos de busca estocástica de uma solução ótima para uma função custo. Desta forma, os elementos computacionais da *população* são elementos do espaço de busca, que serão avaliados e combinados, de tal forma, que processo deverá tender (indivíduos restantes após várias gerações) ao ótimo da função custo (aptidão).

Em essência há 3 fases importantes na técnica de AG: seleção dos *pais*, cruzamento (*crossover*) e a mutação. Para muitos autores, a mutação é a etapa mais importante.

Num pseudocódigo os passos do algoritmo são

- (i) Avalia e seleciona a $P(t)$ a partir de $P(t-1)$;
- (ii) Altera $P(t)$: cruzamento e mutação;
- (iii) Volta ao passo (i) até atingir convergência.

Embora os AG tenham sido aplicados para problemas de otimização combinatória, por ser mais simples combinar uma cadeia de caracteres de 0's e 1's, há hoje algoritmos usando números reais, que é o caso mais comum da comunidade de PIs. Um pseudo-código para um AG usando números reais é descrito abaixo:

- (i) Avalie os elementos da população e faça uma ordenação; após promover a seleção (algoritmo tipo roleta ou torneio)
- (ii) Faça o cruzamento: há várias maneiras, uma delas é o cruzamento geométrico: $filho = (pai_1)^d (pai_2)^{1-d}$, $d \in [0, 1]$, assim pode-se fixar: $d = 0,5$.

(iii) Mutaç o: $x'_i = \begin{cases} x_i + D(t, l_{\text{sup}} - x_i) & \text{se digito aleat rio for 0} \\ x_i - D(t, x_i - l_{\text{inf}}) & \text{se digito aleat rio for 1} \end{cases}$ no qual:

$$D(t, y) = \left[1 - r^{(t-T)^{\gamma}} \right].$$

Este procedimento pode ser aplicado no problema inverso da Se o 3, problema direto representado pela Eq. (4). Na fun o objetivo foi usada a regulariza o de Tikhonov-0.

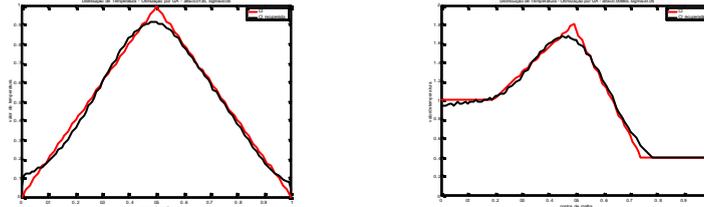


Figura 5: Resultados de estimac o de condi o inicial com AG.

5.2 Redes Neurais

As redes neurais artificiais (RNA) s o outro exemplo de ferramenta computacional inicialmente baseada em modelos naturais: o c rebro humano. As RNA s o arranjos de elementos de processamento (neur nios), o modelo de neur nio artificial consiste de uma combina o linear seguida de uma fun o de ativa o – o componente n o linear do processamento. Os neur nios est o interconectados, com diferentes pesos de conex o.   um sistema de processamento altamente paralelo e de controle distribuido. V rios arranjos podem e tem sido pensado para redes neurais. O mais popular deles   o perceptron de multicamadas. Outras redes (Fun o de Base Radial e Correla o em Cascata) tamb m foram testadas na estimac o de condi es de contorno.

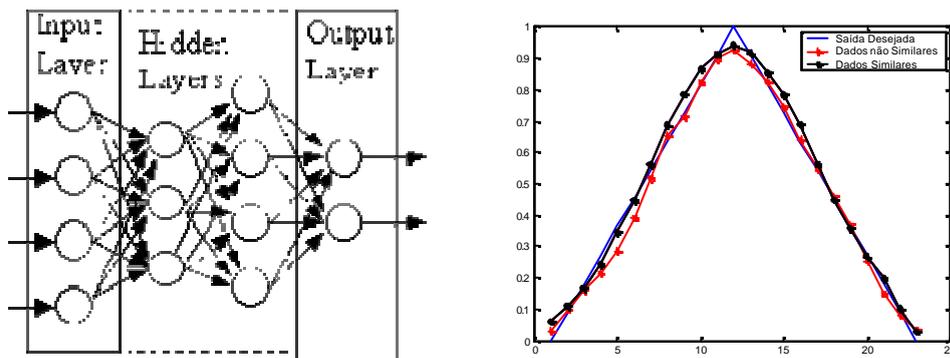


Figura 6: Representa o de RNA perceptron de multicamada e estimac o de fluxo de calor no contorno, onde o problema direto   dado pela Eq. (4).

5. COMENT RIOS FINAIS

  fascinante conhecer operadores relativamente simples, mas com a capacidade de transformar um problema mal-posto em um problema com solu es suaves e depend ncia cont ua dos dados! O Prof. M. Bertero chama a solu o do tipo da Eq. (15) como o

método dos mínimos quadrados generalizado. A diferença entre os métodos está no tipo de regularização usada. Nos contextos dos PIs os AGs não constituem um novo método, mas estão concorrendo com outros otimizadores estocásticos pela preferência dos usuários. Um aspecto interessante, foi notar que mesmo com ausência de ruído nos dados, o otimizador de AG não foi capaz de encontrar uma boa solução, já usando o operador de regularização bons resultados foram obtidos. Nestes casos não o parâmetro de regularização é nulo: $\mathbf{a} = 0$. Todavia, obtém-se uma boa inversão com AG com dados contaminados com ruídos usando-se um funcional com regularização $\mathbf{a} \neq 0$ (Figura 5).

A situação já não é a mesma com as redes neurais. O uso das RNAs em PIs vem crescendo e as redes podem ser usadas mesmo quando não se tem idéia do modelo direto, o custo irá recair sobre uma intensa bateria de testes experimentais. Em aplicações práticas RNAs podem ser ainda mais rápidas do que os métodos tradicionais, pois uma vez *treinada* (fase de identificação dos pesos das conexões) o processo torna-se muito rápido (fase de ativação). Além disso, as RNA permitem a sua implementação totalmente em hardware: neurocomputadores.

Finalizando, chamo a atenção que muitos conceitos refletem a visão particular do autor destas notas. Por exemplo, o Prof. McCormick (2001) apresenta uma classificação de problemas inversos semelhante ao da do item 3 - Seção 2, com agregação de mais 2 tipos de problema inverso: projeto ótimo e identificação de equações para o modelo direto.

REFERÊNCIAS

- Beck, J.V., Blackwell, B. & St. Clair, C. R. Jr., 1985, *Inverse Heat Conduction: Ill-Posed Problems*, John Wiley & Sons.
- Bertero, M. & Boccacci, P., 1998, *Introduction to Inverse Problems in Imaging*, Institute of Physics.
- Campos Velho, H. F., Retamoso, M. R. & Vilhena, M. T. (2001): Several experimental arrays and different radiometric measurements for estimating boundary conditions in natural waters, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **54**(9), 1357-1368.
- Campos Velho, H. F., Moraes, M. R., Ramos, F. M., Degrazia, G. A. & Anfossi, D., 2000, An automatic methodology for estimating eddy diffusivity from experimental data, *Il Nuovo Cimento*, **23-C**(1), 65-84.
- Campos Velho, H. F., Silva, J. D. S., Nowosad, A. G. & Rios Neto, A., 2000, Experiences with neural network in inverse problems, [Congresso Brasileiro de Matemática Aplicada e Computacional](#) - Minisymposium on Inverse Problems on Medicine, Engineering, and Geophysics (Edição especial do Boletim da SBMAC), 11-15 de Setembro, Santos (SP), Brasil.
- Campos Velho, H. F., Stephany, S., Chalhub, E. S., Ramos, F. M., Retamoso, M. R. & Vilhena, M. T., 2000, New approaches on inverse hydrological optics, [Congresso Brasileiro de Matemática Aplicada e Computacional](#) - Minisymposium on Inverse Problems on Medicine, Engineering, and Geophysics (Edição especial do Boletim da SBMAC), 11-15 de Setembro, Santos (SP), Brasil.
- Campos Velho, H. F. & Ramos, F. M., 1997, Numerical inversion of two-dimensional geoelectric conductivity distributions from electromagnetic ground data, *Brazilian Journal of Geophysics*, **15**(2), 133-143.

- Chalhoub, E. S., Campos Velho, H. F., 2002, Estimation of the optical properties of sea water from measurements of exit radiance, *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, **72**(5), 551-565.
- Chalhoub, E. S., Campos Velho, H. F., 2001, Simultaneous estimation of radiation phase function and albedo in natural waters, *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, **69**(2), 137-149.
- Chalhoub, E. S., Campos Velho, H. F., Ramos, F.M. & J.C.R. Claeysen, J. C. R., 2000, Phase function estimation in natural waters using discrete ordinate method and maximum entropy principle, *Hybrid Methods in Engineering*, **2**(4) 373-388.
- Engl, H. W., Hanke, M. & Neubauer, A., 1996, *Regularization of Inverse Problems: Mathematics and its Applications*, Kluwer.
- Groetsche, C. W., 1984, *The Theory of Tikhonov Regularization for Fredholm Integral Equation of the 1st Kind*, Pitman.
- Hanisch, R. J. & White, R. L., 1993, *The Restoration of HST Images and Spectra II*, Space Telescope Science Institute (<http://resources.stsci.edu/>), Baltimore (MA), USA, November 18-19.
- Holland, J. H., 1975, *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, MIT Press.
- Hu, W., 2000, Ringing in the new cosmology, *Nature*, 404(6781), 939-940.
- Özisik, M. N., 1980, *Heat Conduction*, Wiley Interscience.
- McCormick, N. M., 2001, Inverse Problems: Methods and Applications, *TEMA: Tendências em Matemática Aplicada e Computacional*, SBMAC, vol. 2, 1-12.
- Muniz, W. B., Ramos, F. M. & Campos Velho, H. F., 2000, Entropy- and Tikhonov-based regularization techniques applied to the backwards heat equation, *Computers & Mathematics with Applications*, **40**(8/9), 1071-1084.
- Muniz, W. B., Campos Velho, H. F. & Ramos, F. M., 1999, A Comparison of Some Inverse Methods for Estimating the Initial Condition of the Heat Equation, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **103**(1), 145-163.
- Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T. & Flannery, B. P., 1992, *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press.
- Ramos, F. M., Campos Velho, H. F., Carvalho, J. C. & Ferreira, N. J., 1999, Novel approaches on entropic regularization, *Inverse Problems*, **15**(5), 1139-1148.
- Ramos, F. M. & Giovannini, A., 1995, Résolution d'un problème inverse multidimensionnel de diffusion de la chaleur par la méthode des éléments analytiques et par le principe de l'entropie maximale, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **38**(5), 1139-1148.
- Retamoso, M. R., Vilhena, M. T., Campos Velho, H. F. & Ramos, F. M., 2001, Estimation of boundary condition in hydrologic optics, *Applied Numerical Mathematics*, **40**(1/2), 87-100
- Retamoso, M. R., Vilhena, M. T., Campos Velho, H. F. & Ramos, F. M., 2000, An implicit inversion method for estimating boundary conditions in hydrologic optics, *TEMA: Tendências em Matemática Aplicada e Computacional* (Trabalhos selecionados do Congresso Brasileiro de Matemática Aplicada e Computacional, 1999, 13-17 Setembro, Santos, SP, Brasil), vol. 1, parte 2, 455-462.
- Roberti, D. R., Campos Velho, H. F. & Degrazia, G. A. (2002): Identifying counter-gradient term in atmospheric convective boundary layer, *4th International Conference on Inverse Problems in Engineering: Theory and Practice (ICIPE-2002)*, Maio 26-31, Angra dos Reis (RJ), Brasil – Anais in CD-Rom: código do papel 098.

- Shiguemori, R. H., Campos Velho, H. F. & Silva, J. D. S., 2002, Estimation of Initial Condition in Heat Conduction by Neural Network, *4th International Conference on Inverse Problems in Engineering: Theory and Practice (ICIPE-2002)*, Maio 26-31, Angra dos Reis (RJ), Brasil, Anais in CD-Rom: código do paper 093.
- Silva Neto, A. J. & Moura Neto, F. D., 2000, Escolha de Modelos – Problemas Inversos em Engenharia – Mini-curso, *Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, SBMAC*, Santos (SP), Brasil.
- Stephany, S., Campos Velho, H. F., Ramos, F. M. & Mobley, C. D., 2000, Identification of inherent optical properties and bioluminescence source term in a hydrologic optics problem, *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, **67**(2), 113-123.
- Stephany, S., Ramos, F. M., Campos Velho, H. F. & Mobley, C. D., 1998, A methodology for internal light sources estimation, *Computer Modeling and Simulation in Engineering*, **3**(3), 161-165.
- Tarantola, A. 1987, *Inverse Problem Theory*, Elsevier.
- Tikhonov, A. N. & Arsenin, V.Y., 1977, *Solution of Ill-posed Problems*, John Wiley & Sons.
- What are inverse problem?, <http://www.me.ua.edu/inverse/whatis.html>, (K.A. Woodbury's web-page, 1995).
- Woodbury, K.A., 2000, Neural Networks and Genetic Algorithms in the Solution of Inverse Problems, (http://www.sbmac.org.br/a_sbmac/publicacoes/frames.htm) *Boletim da SBMAC*, vol. 4.
- Wuensche, C. A., Lubin, P. M. & Villela, T., 1994, An alternative algorithm for cosmic microwave background radiation sky harmonic analysis, *Astronomical Data Analysis Software and Systems III*, A.S.P. Conference Series, Vol. 61, 1994, Dennis R. Crabtree, R.J. Hanisch, and Jeannette Barned (Eds.), pp. 269-272 (também disponível na internet: <http://www.das.inpe.br/~alex/papers.html>)

INVERSE PROBLEMS: BASIC CONCEPTS AND APPLICATIONS

Abstract. *Short-Course notes presented at V EMC (Meeting on Computational Modeling), Nova Friburgo (RJ), organized by IPRJ-UERJ, representing a brief introduction on the subject. Firstly, the concept and classification on inverse problems are outlined, after that some “classical” methods for solving these problems are described, with an emphasis on regularization techniques. In this section several examples are shown and discussed using the regularization operators. However, new techniques are also commented. Two of these new techniques are analyzed: neural network and genetic algorithm applied to inverse problems. The latter schemes are applied to an inverse heat conduction problem.*

Key words: *Inverse problems, Regularized solutions, Neural network, Genetic Algorithm.*