PARÂMETROS APARENTES EM PROSPECÇÃO GEOELÉCTRICA

UMA NOVA TÉCNICA DE INTERPRETAÇAO



CARLOS M C ESPAIN O.

Oferta
do autor
2 Nov 84

PARÂMETROS APARENTES

EM

PROSPECÇÃO GEOELÉCTRICA

UMA NOVA TÉCNICA DE INTERPRETAÇÃO

DISSERTAÇÃO DE DOUTORAMENTO EM ENGENHARIA ELECTROTÉCNICA

NA FACULDADE DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE DO PORTO

INSTITUTO NACIONAL DE INVESTIGAÇÃO CIENTÍFICA
Centro de Electrotécnica e Electrotécnica da Universidade do Porto
C. D. U.
INV-LR-INIC 6 / 84,7-OF

T.SIST
1.5:15

Carlos Manuel Chaves Espain de Oliveira

550.8(043)/OLI c/PAR

UNIVERSIDADE DO PORTO
Faculdade de Engenharia
BIBLIOTECA
Nº 34481
CDU 550.8(043)
Data 26/02/92

1984
PUBLICAÇÃO SUBSIDIADA PELO
INSTITUTO NACIONAL DE INVESTIGAÇÃO CIENTIFICA

Ao meu próximo próximo

À minha filha

Joana Cacilda

Recherche scientifique: la seule forme de poësie qui soit retribuée par l'État

Jean Rostand, Inquiétudes d'un biologiste

Se outros per ventuira em esta cronica buscam fremosura e novidade de pallavras, e nom a certidom das estorias, desprazer lhe a de nosso rrazoado, muito ligeiro a elles douvir, e nom sem gram trabalho a nos de hordenar. Mas nos, nom curando de seu juizo, leixados os compostos e afeitados rrazoamentos, que muito deleitom aquelles que ouvem, antepoemos a simprez verdade que a afremosemtada fallssidade. Nem entemdaaes que certeficamos cousa, salvo de muitos aprovada, e per escprituras vestidas de fe; doutra guisa, ante nos callariamos, que escprever cousas fallssas.

Que logar nos ficaria pera a fremosura e afeitamento das pallavras, pois todo o nosso cuidado em isto despeso nom abasta pera hordenar a nua verdade?

Fernão Lopes, 1380-1460,

Cronica del Rei Dom Joham da Boa Memoria

Per esta hestoria o douctor nos demostra que nos nom deuemos d'ajudar os maaos homẽes, porque os maaos nom agradecem, nem ssom conhoçemtes do bom seruiço que lhe outrem faz, mais muytas vezes dam maao grado a quem lhe faz bom seruiço.

Fabulário português do século XV

Este trabalho teria sido impossível sem a contribuição de muitos amigos que me acompanharam ao longo da viagem, de muitas maneiras. Agradeço, em primeiro lugar, a Carlos Madureira que me acompanhou no início, no meio e no fim. Sem ele, eu teria ficado no cais ou, quiçá, perdido no mar. A ele, principalmente, devo o ter chegado a bom porto. A Pedro Regueiras devo muita luz em noites de nevoeiro. Foram vários os naufrágios de que me salvou. De muitas águas paradas saí com a ajuda de Jorge Madureira, e por isso lhe estou grato. A todo o pessoal do CIUP também o meu muito obrigado. Um trabalho destes exige espaço e tempo próprios. Se os tive, devo-o aos meus colegas que me substituíram entretanto em funções docentes. Para eles os meus agradecimentos. Maria Teresa Pinto e Joaquim Andrade fizeram dum manuscrito ilegível o texto que aqui é apresentado e isso com uma paciência e boa vontade que não esquecerei. Por último, mas não por menos, longe disso, a minha mais sentida gratidão vai para quantos, perto de mim de alguma forma, aguentaram algumas das mais difíceis tempestades da minha vida. A ternura entre as pessoas tem mil formas, as mais variadas, de se exprimir. Disso vive e cresce, mas nunca cessa de me espantar e comover.

Indice

CAPÍTULO I - OBJECTIVOS E SUMÁRIO

1.1 Objectivos do trabalho

1.1.1 Objectivo central 13

1.1.2 Objectivo complementar 13

1.2 Sumário 14

CAPÍTULO II - INTRODUÇÃO. QUESTÕES TEÓRICAS E CONCEITOS NOVOS. MÉTODOS INTERPRETATIVOS

2.1 Introdução 17

2.2 Prospecção geoeléctrica 17

2.3 Equações do campo e potencial à superfície

2.3.1 Hipóteses teóricas 21

2.3.2 Equação do potencial

2.3.2.1 Equação de Maxwell e potencial eléctrico 23

2.3.2.2 Condições fronteira na superfície de separação dos estratos 25

2.3.2.3 Equação do potencial 27

2.3.2.4 Integral geral da equação de Laplace 33

2.3.2.5 Integral particular da equação de Poisson 37

2.3.2.6 Introdução das condições fronteira 39

2.3.2.7 Terrenos de vários estratos 42

2.3.2.8 Diferença de potencial entre eléctrodos de toma de medidas 43

2.4 Métodos de interpretação 45

2.5 Um novo método de interpretação

2.5.1 Introdução do método 62

2.5.2 Novos conceitos 68

2.6 Estrutura da dissertação 71

CAPÍTULO III - CÁLCULO DE POTÊNCIAS E DERIVADAS. OPTIMIZAÇÃO

3.1 Introdução 75

3.2 Cálculo das potências e suas derivadas

3.2.1 Desenvolvimento em série da função nuclear 76

3.2.2 Cálculo das derivadas 84

3.2.3 Esquema de cálculo 86

3.2.4 Precisão do cálculo 87

3.2.5 Aceleração da convergência das séries 93

3.3 Optimização

3.3.1 Método de optimização utilizado 98

3.3.2 Decomposição em valores singulares e controlo do parâmetro λ 109

3.3.3 Análise espectral da decomposição 119

3.3.4 Constrições 127

3.3.5 Critério de paragem do algoritmo com sucesso 131

3.3.6 Precisão da solução 139

3.3.7 Minimização em norma máxima 142

3.3.8 Abortamento do algoritmo 144

3.3.9 Outros métodos 148

CAPÍTULO IV - CURVAS DE PARÂMETROS APARENTES. INTERPRETAÇÃO E TRATAMENTO ESTATÍSTICO

4.1 Introdução 154

4.2 Curvas de parâmetros aparentes e estratégia geral de interpretação

4.2.1 Escolha de medidas 154

4.2.2 Condições necessárias para o traçado das curvas de parâmetros aparentes 163

4.3 Erros de medidas 183

4.4 Estimador dos mínimos quadrados 188

4.5 Elipsóides de confiança e erros dos parâmetros. Análise espectral 196

4.6 Estimativa da variância dos erros. Séries de medidas

4.6.1 Estimativa da variância dos erros

4.6.1.1 Atribuição e estimação 202

4.6.1.2 Carácter aleatório das medidas 204

4.6.1.3 Normalidade da distribuição 206

4.6.1.4 Estimativa da variância. Homogeneidade e independência 208

4.6.1.5 Medidas aberrantes 209

4.6.2 Séries de medidas

4.6.2.1 Vantagens da sua utilização 212

4.6.2.2 Formação das séries 215

4.7 Análise das curvas de parâmetros aparentes

4.7.1 Séries de medidas. Medidas não correlacionadas. Definição do problema 217

4.7.2 Análise da variância 218

4.7.3 Comparação de dois pontos da curva 221

4.7.4 Variância não homogénea 222

4.7.5 Análise multidimensional 223

4.7.6 Estimativas correlacionadas 225

4.7.7 Uma única série de medidas 226

4.7.8 Solução final 227

4.7.9 Comportamento assimptótico das curvas 230

4.8 Enviesamento

4.8.1 Causas e precauções a tomar 232

4.8.2 Eliminação do enviesamento 237

4.9 Hipóteses iniciais ou "guesses" para os parâmetros 241

4.10 Outros processos de análise das curvas de parâmetros aparentes 243

4.11 Conclusões 245

CAPÍTULO V - PROGRAMAS E EXEMPLOS DE INVERSÃO DE TERRENOS

5.1 Introdução 250

5.2 Programas e rotinas

5.2.1 Considerações gerais 251

5.2.2 Programa JOANA 255

5.2.3 Subrotina CALCULA 259

5.2.4 Cálculo de potências e derivadas 265

5.2.5 Subrotina INVERTE 270

5.2.6 Saída de JOANA 271

5.2.7 Listagem de JOANA e rotinas 273

5.2.8 Programa CACILDA 317

5.2.9 Listagem de CACILDA 320

5.3 Exemplo de Inman

5.3.1 Escolha de medidas, construção das curvas e sua análise 334

5.3.2 Enviesamento e sua eliminação 337

5.3.3 Distribuição pseudo normal e séries de medidas 343

5.3.4 Modelos com mais estratos do que o terreno real 347

5.3.5 Medidas com erro muito grande 348

5.3.6 Hipóteses iniciais e avaliação da função objectivo 353

5.3.7 Comparação com outros métodos de mínimos quadrados 357

5.4 Outros exemplos

5.4.1 Introdução 366

5.4.2 Terreno do tipo Q 368

5.4.3 Terreno do tipo H 375

5.4.4 Terreno do tipo A 382

5.4.5 Outro terreno do tipo A 387

5.4.6 Algumas considerações gerais 391

CAPÍTULO VI - CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

6.1 Conclusões 396

6.2 Perspectivas futuras 398

ANEXO A - POTÊNCIAS E SUAS DERIVADAS NOS PARÂMETROS EM TERRENOS DE UM E DOIS ESTRATOS 401

ANEXO B - CÁLCULO DE MAJORANTES DO ERRO DE TRUNCATURA NOS DESENVOLVIMENTOS EM SÉRIE DE POTÊNCIAS E DERIVADAS EM TERRENO DE UM ESTRATO 407

ANEXO C - ELÉCTRODOS LINEARES 410

ANEXO D - EXEMPLO DE "OUTPUT" DE JOANA 417

BIBLIOGRAFIA 429

[NA CAPA: GEORGIUS AGRICOLA, DE RE METALLICA, 1555]

Vendi por 10, ganho 20 por 100; pergunto; se vendera por 15, quanto ganharia por 100?

Esta é uma das perguntas que me deram quando vim a esta cidade, e é muito enganosa; porém, tem regra geral.

Gaspar Nicolas

Tratado da Pratica Darysmetica, 1519

CAPÍTULO I

OBJECTIVOS E SUMÁRIO

1.1 Objectivos do trabalho.

1.1.1 Objectivo central

Partindo do método de Inman (1973, 1975) de inversão de terrenos horizontalmente estratificados, que constitui o progresso significativo mais recente neste domínio, é objectivo central deste trabalho superar as suas insuficiências mais óbvias, designadamente:

- Fornecendo um critério de aceitação ou rejeição dos modelos estratificados utilizados na inversão que seja mais seguro e independente de hipóteses prévias sobre a ordem de grandeza dos erros das medidas
- Definindo um estimador do erro da solução que não seja dependente de hipóteses prévias sobre a ordem de grandeza do erro das medidas e, em particular, que não exija, para ser válido, que essa ordem de grandeza seja baixa
- Estabelecendo um critério de identificação e eliminação dos pontos experimentais grosseiramente errados ("outliers")

1.2.2 Objectivo complementar

Conscientes de que os objectivos genéricos propostos - nomeadamente o 1º - implicam um acrescento significativo do consumo de recursos computacionais, propomo-nos também, especificamente:

- Formular o ataque ao problema por forma a obter soluções computacionalmente económicas e - dado que este não é, definitivamente, um trabalho de investigação em ciências de computação, mas sim um tra-

balho de Engenharia que utiliza as ferramentas da Física Aplicada e da Matemática Aplicada - consegui-lo mais por obra do seu tratamento analítico que numérico ou informático.

1.2 Sumário

No presente trabalho propõe-se, discute-se e implementa-se um novo método de inversão de terrenos horizontalmente estratificados, a partir de medidas obtidas em sondagem eléctrica vertical, com configurações tetraelectródicas de superfície, colineares, simétricas e de corrente contínua. O método assenta na consideração de modelos, sucessivamente mais complexos, até ao modelo de dois estratos (o de maior número de estratos que o trabalho contempla). A generalização a modelos de mais estratos não apresenta, porém, nenhum problema, qualitativamente novo, previsível. São introduzidos novos conceitos, como o de *eléctrodo aparente* e o de *potência consumida no terreno entre eléctrodos aparentes*, potência que passa a constituir a medida indirecta recolhida no campo. Para cada modelo, são utilizados, na definição dos seus parâmetros, sucessivos conjuntos de tantas medidas quantos aqueles, minimizando, de cada vez, a norma euclidiana quadrada dos resíduos, diferenças entre as potências medidas e calculadas com eles. São introduzidos os conceitos de *parâmetro aparente*, como generalização do de resistividade aparente, e de *curvas de parâmetros aparentes* associadas a cada modelo. O traçado dessas curvas de parâmetros aparentes é exaustivamente detalhado e fundamentado em considerações estatísticas, pormenorizando-se os critérios de rejeição de medidas grosseiramente erradas, como pretende o 3º objectivo genérico exposto atrás. Os pressupostos da decisão de

rejeição ou aceitação dum modelo como capaz de descrever o terreno, em função das curvas de parâmetros aparentes respectivas, obtidas com as medidas disponíveis, são estudados e, também, estatisticamente apoiados, dando assim cumprimento ao 1º objectivo genérico formulado. É analisado o erro da solução final obtida, em resposta ao 3º objectivo genérico apresentado. São descritos diversos exemplos de interpretação e, num caso, a eficiência do método é comparada com as de outros métodos similares, em particular o de Inman, podendo, então, o leitor adquirir uma ideia sobre o grau de cumprimento do objectivo específico de conseguir uma solução económica. Em anexo são brevemente relatados resultados análogos, obtidos com o mesmo tipo de configuração, mas utilizando eléctrodos lineares infinitos.

Ainda que todalas cousas passadas
Sejão notorias a Vossas Altezas,
A história de Deos tem taes profundezas,
Que nunca se perde em ser recontadas

Gil Vicente

Auto da história de Deos, 1527

CAPÍTULO II

INTRODUÇÃO. QUESTÕES TEÓRICAS E CONCEITOS NOVOS. MÉTODOS INTERPRETATIVOS

2.1 Introdução

O presente capítulo aborda quatro grandes questões introdutórias: algumas notas sobre a utilidade e funcionamento geral dos métodos geoeléctricos de corrente contínua; a fundamentação teórica e as equações que regem o campo eléctrico num terreno estratificado; uma breve resenha dos métodos interpretativos existentes; e, finalmente, a apresentação de alguns conceitos que vão ser utilizados nos capítulos seguintes.

2.2 Prospecção geoeléctrica

Orellana (1972, p. 23) dá da prospecção geoeléctrica a seguinte definição: "É um ramo da física aplicada que se ocupa do estudo das estruturas ocultas do interior da Terra e da localização neste de corpos delimitados por contraste de algumas das suas propriedades físicas com as do meio ambiente por meio de observações realizadas na superfície da Terra". Madureira (1968, p. 20) aponta como conceito fundamental da Prospecção Geofísica: "Conjunto de métodos físicos quantitativos que a partir do conhecimento da Geologia de superfície permitem obter dados sobre a natureza e disposição das formações geológicas subjacentes". As técnicas que a prospecção geoeléctrica utiliza permitem não só o estudo da constituição do subsolo, mesmo a regiões muito profundas, como a avaliação de jazigos minerais a pouca profundidade, e não dispensam, no seu aperfeiçoamento como na sua aplicação, as contribuições, quer de físicos, quer de geólogos. As definições pretenderão, naturalmente, cobrir métodos prospectivos que exigem a perfuração a pouca profundidade, como certos métodos resistivos de eléctrodos enterrados.

A prospecção geoeléctrica constitui com os métodos magnético, gravimétrico e sísmico o grupo dos quatro principais processos clássicos de prospecção geofísica. Parece ter sido Robert Fox, em 1815, quem pensou primeiro em termos de prospecção geoeléctrica, ao associar fenómenos de polarização expontânea à presença de certos jazigos de cobre na Cornualha. Hoje há uma enorme variedade de métodos geoeléctricos. A maior parte deles não se baseia já na observação de potenciais expontâneos ou de correntes telúricas, mas fundamenta-se antes no comportamento eléctrico do terreno quando submetido a correntes impostas do exterior. Essas correntes podem ser contínuas (ou, pelo menos, de muito baixa frequência) ou alternas, explorando em bloco as características do campo electromagnético criado. Também a forma como são impostas as correntes, o número e a posição relativa dos eléctrodos por onde são injectadas, bem como o modo como são medidas à superfície grandezas eléctricas susceptíveis de fornecer informação sobre o terreno, divergem de método para método.

O método de que nos ocuparemos é um método *de corrente contínua* ou, para evitar polarização de eléctrodos, de muito baixa frequência. O objectivo geral destes métodos consiste em identificar a estrutura do terreno e formações anómalas que contenha, as dimensões que caracterizam essa estrutura ou formações e as resistividades envolvidas. A resistividade duma rocha ou mineral é uma característica física que, embora muito variável com a porosidade, grau de fracturação, maior ou menor impregnação de água, etc., permite muitas vezes a sua identificação.

Especificamente, estes métodos são utilizados com várias finalidades (Orellana, 1972, p. 35): localização de águas subterrâneas ou petróleo, estudo de bacias carboníferas, procura e avaliação de jazigos de minérios, in-

vestigação da estrutura do terreno em apoio a actividades de engenharia civil, localização a profundidades reduzidas de material de interesse arqueológico, estudo de zonas profundas da crusta terrestre, etc..

O problema que pretendemos abordar é um problema clássico da prospecção geoeléctrica: *o de definir resistividades e espessuras ou profundidades das superfícies de separação dum terreno estratificado horizontalmente*. Diz-se a uma dimensão, porque supomos, teoricamente, que a estrutura se prolonga indefinidamente, como se a superfície da Terra fosse plana, sempre com essa disposição de estratos.

Quer o número de eléctrodos de injecção de corrente, quer o número de eléctrodos de toma de medida, bem como a sua disposição relativa, têm originado diferentes variantes dos métodos de prospecção por corrente contínua.

Em geral os eléctrodos são 4, dois de injecção de corrente e dois de toma de medida. Mas muitas configurações comportam mais do que 4 eléctrodos; é o caso do conhecido dispositivo de LEE e dos dispositivos focados, entre outros. A configuração conhecida como Laterolog 7 (Doll, 1951) e a sua versão superficial, por exemplo, utilizam 7 eléctrodos ao todo, 3 de injecção de corrente e 4 de toma de medida. Dispositivos focados mais simples, como o chamado dispositivo unipolar (Gupta e Bhattacharya, 1963), utilizam 5 eléctrodos. Outras configurações, ao contrário, têm menos de 4 eléctrodos, especificamente 3. O método das equipotenciais de campo, e, aliás, bom número de métodos de 4 eléctrodos, pode ser implementado com apenas 3 eléctrodos. Mas há mesmo dispositivos em que os eléctrodos nem sequer são pontuais; podem ser segmentos de linha recta ou mesmo circunferências como no microlaterolog.

Os dispositivos que nos interessam aqui são os dispositivos a 4 eléctrodos. Também dentro deste grupo particular de configurações há variantes. O dispositivo dipolo-dipolo utiliza dois eléctrodos de corrente relativamente próximos e fixos e 2 eléctrodos de toma de tensões, também a pouca distância entre si, que são colocados por toda a superfície do terreno. A configuração conhecida pela designação de "dispositivo a dois eléctrodos" utiliza na verdade 4 mas dois, um de corrente e outro de toma de medida, situam-se a grande distância, praticamente infinita, e estão fixos.

A configuração que consideraremos aqui é *de 4 eléctrodos colocados em linha, à superfície e simétricos*, isto é, a configuração é centrada e colinear. São bem conhecidos os dois dispositivos principais com estas características: o de Wenner-Gish-Rooney e o de Schlumberger. O método que desenvolvemos, os algoritmos e os programas escritos, adaptam-se com alterações mínimas, não só a essas duas particulares configurações, como a quaisquer outras colineares simétricas de 4 eléctrodos. Como se sabe, o que distingue as configurações deste tipo é um único parâmetro, a distância entre um eléctrodo de corrente e o eléctrodo de toma de medida do mesmo lado, por exemplo. E é esse o único factor a alterar nos programas CACILDA e JOANA que apresentaremos no capítulo V.

Entretanto, os exemplos de interpretação que apontaremos supõem todos configuração de Schlumberger. De facto, é hoje quase universalmente aceite a superioridade da disposição de Schlumberger sobre a de Wenner, não só porque pode manter, em termos práticos, 2 eléctrodos fixos durante boa parte das medições, como também porque para a mesma distância interelectródica tem maior profundidade de investigação (ver secção 4.2). É curioso, todavia, assinalar que Roy e Apparao (1971) sustentam ter a configuração de Wenner

melhor resolução vertical que a de Schlumberger, ainda que seja algo discutível o critério utilizado para definir essa resolução vertical.

São geralmente distinguidas duas grandes classes de problemas de exploração ou prospecção geofísica: vertical e horizontal. No primeiro caso, sondagem eléctrica vertical, procura-se, alargando o tamanho da configuração electródica utilizada, explorar zonas do terreno cada vez mais profundas na vertical do centro do dispositivo. No segundo, "passeando" o dispositivo inalterado sobre a superfície, tenta-se fazer uma cartografia do terreno até uma certa profundidade determinada pelo tamanho da configuração, detectando-se variações na horizontal das suas características e parâmetros ou anomalias de interesse. O estudo que fizemos não se pode confinar a nenhuma dessas categorias em particular, embora a sua vocação seja de facto a sondagem eléctrica vertical.

O estudo do comportamento e utilização das configurações de 4 eléctrodos colineares e simétricas exige a resposta a uma questão fundamental que abordaremos na secção seguinte: injectada uma corrente através de 2 eléctrodos (o de injecção propriamente dita e o de retorno) num terreno estratificado horizontalmente, qual a diferença de tensões entre 2 eléctrodos colocados também à superfície, colineares com aqueles e igualmente distanciados do ponto médio da distância entre eles?

2.3 Equações do campo e potencial à superfície

2.3.1 Hipóteses teóricas

A Figura II-1 representa os três tipos de terrenos estratificados

que abordaremos: o terreno homogéneo, o terreno de um estrato e o terreno de dois estratos.

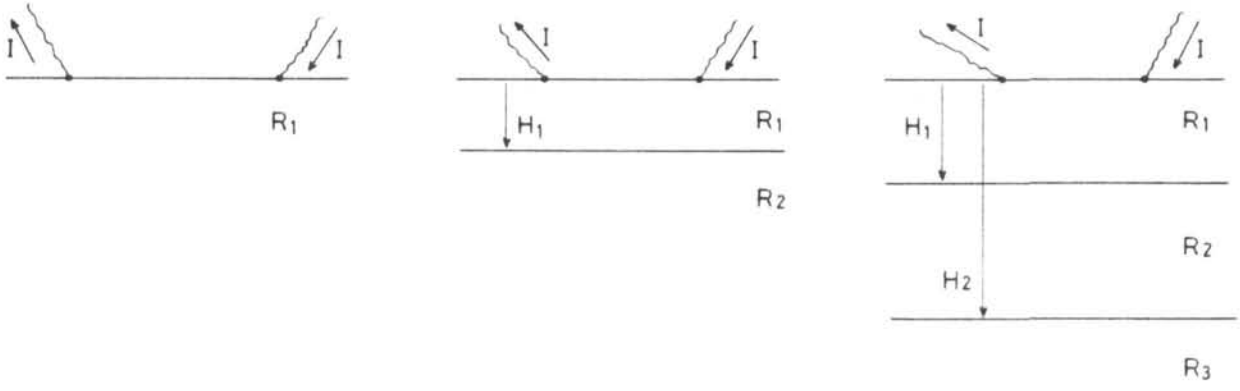


Figura II-1 - Terrenos horizontalmente estratificados estudados ao longo do trabalho. R_1, R_2 e R_3 são resistividades e H_1 e H_2, profundidades.

A corrente injectada provoca um campo eléctrico. Numa 1.ª fase, procuraremos a equação geral que define o potencial eléctrico em cada ponto do terreno, depois integrá-la-emos e, finalmente, consideraremos o valor desse potencial à superfície, acessível aos nossos eléctrodos de toma de medida.

As hipóteses fundamentais que suporemos cumpridas pelo terreno e pelo dispositivo são:

- superfícies de separação perfeitamente planas e horizontais, indefinidamente prolongadas.
- resistividade homogénea e isotropia dentro de cada estrato ou substrato
- ar perfeitamente isolante

- eléctrodos pontuais

- corrente injectada contínua.

2.3.2 Equação do potencial

2.3.2.1 Equações de Maxwell e potencial eléctrico

O campo electromagnético, para meios em repouso, é regido pelas equações de Maxwell:

$$\text{rot } \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \tag{2.1}$$

$$\text{rot } \vec{H} = \vec{i} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \tag{2.2}$$

$$\text{div } \vec{B} = 0 \tag{2.3}$$

$$\text{div } \vec{D} = \rho \tag{2.4}$$

onde, em geral, as grandezas consideradas são funções do tempo e do ponto, acrescidas das relações

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E} \tag{2.5}$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H} \tag{2.6}$$

$$\vec{i} = \sigma \vec{E} \tag{2.7}$$

onde, em muitos meios anisotrópicos, ε, μ e σ são tensores, funções do ponto e

eventualmente do tempo e, em muitos meios isotrópicos, escalares.

Nestas equações: $\vec{E}$ é o vector campo eléctrico; $\vec{D}$, deslocamento eléctrico; $\vec{H}$, excitação magnética; $\vec{B}$, campo magnético; $\vec{i}$, densidade de corrente eléctrica; ρ, densidade de carga eléctrica; ε, permeabilidade eléctrica do meio; μ, permeabilidade magnética do meio; e σ, condutibilidade eléctrica do meio.

Suporemos, no nosso caso, que, em cada estrato ou substrato, ε, μ e σ são escalares constantes e que o campo electromagnético é estacionário. Estas suposições fundamentam-se em os diferentes estratos serem considerados homogéneos e isotrópicos e a corrente injectada ser contínua.

Os vectores campo magnético e excitação magnética não nos interessam para efeito de medidas efectuadas sobre o terreno. As leis que regem o campo eléctrico reduzem-se então a

$$\text{rot } \vec{E} = 0 \tag{2.8}$$

$$\text{div } \vec{D} = \rho \tag{2.9}$$

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E} \tag{2.10}$$

$$\vec{i} = \sigma \vec{E} \tag{2.11}$$

A primeira destas equações mostra-nos que o campo eléctrico é gradiente de um campo potencial escalar, isto é, que se pode pôr

$$\vec{E} = \text{grad } (-V) = -\text{grad } V \tag{2.12}$$

É este campo escalar, a tensão ou potencial eléctrico, que nos interessa conhecer em função do ponto.

2.3.2.2 Condições fronteira na superfície de separação dos estratos

Felizmente, o nosso meio, o terreno estratificado (e o ar, suposto isolante perfeito), tem uma estrutura relativamente simples e o problema da resolução das equações que definem integralmente o campo eléctrico, e em particular da equação que nos virá a dar o potencial, pode ser encarado separadamente em cada um dos estratos, desde que se respeitem as condições de compatibilidade nas superfícies de separação entre eles (condições fronteira). Procuremos essas condições.

Imaginemos dois meios separados por uma superfície Σ e um contorno fechado ℓ, como documenta a Figura II-2. Seja S a superfície delimitada por esse contorno e $\vec{n}$ o versor da normal a essa superfície em cada seu ponto. Seja também $d\vec{\ell}$ o vector deslocamento ao longo do contorno ℓ.

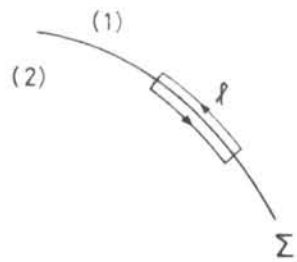


Figura II-2 - Superfície de separação Σ e contorno ℓ

Então do teorema de Stokes e de 2.8 resulta

$$\int_S \text{rot } \vec{E} \left| \vec{n} \, ds = \oint_\ell \vec{E} \right| d\vec{\ell} = 0$$

Fazendo tender os lados menores do contorno ℓ para zero, conclui-se, então, que as componentes tangenciais do campo eléctrico são iguais em Σ, dum

e doutro dos seus lados. Sobre Σ:

$$E_{1_t} = E_{2_t} \tag{2.13}$$

Esta é portanto uma condição fronteira sobre a superfície de separação Σ.

Antes de deduzirmos a segunda condição, apliquemos o operador divergência à equação de Maxwell 2.2. Vem

$$\text{div rot } \vec{H} = \text{div } \vec{i} + \text{div } \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = 0$$

atendendo a que a divergência do rotacional de um vector é nula. Então, conjugando esta equação com 2.4, resulta

$$\text{div } \vec{i} + \frac{\partial}{\partial t} \text{ div } \vec{D} = \text{div } \vec{i} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

equação conhecida como equação de continuidade da corrente eléctrica que, no caso de a carga eléctrica não variar com o tempo, como supomos que o não faz nas nossas superfícies de separação, se pode escrever

$$\text{div } \vec{i} = 0$$

Consideremos então, como mostra a Figura II-3, um volume cilíndrico com faces planas acompanhando a superfície de separação Σ.

Vem, de acordo com o teorema de Gauss e com o último resultado obtido

$$\int_V \text{div } \vec{i}\, dv = \oint_S \vec{i}\,|\vec{n}\, ds = 0$$

onde S é a superfície que limita V e $\vec{n}$ o versor da sua normal.



Figura II-3 - Superfície de separação Σ e volume V.

Fazendo tender para zero a altura do cilíndro, fica provado que as componentes normais do vector densidade de corrente são iguais em Σ, dum e doutro dos seus lados (tomando o mesmo sentido para as normais). Em Σ

$$i_{1_n} = i_{2_n} \qquad (2.14)$$

o que constitui outra condição.

O leitor poderá verificar, utilizando as equações de Maxwell, que destas duas condições é possível retirar, de facto, todas as relações necessárias sobre Σ, para todos os vectores considerados $\vec{E}$, $\vec{D}$ e $\vec{i}$, componentes normais e tangenciais. De modo que, cumpridas essas duas condições, estão compatibilizados os campos dum lado e doutro de Σ.

2.3.2.3 Equação do potencial

Procuraremos resolver primeiro o problema mais complexo, isto é, achar as equações que regem o potencial nos três diferentes meios em que se divide um terreno de 2 estratos, e integrá-las, após o que será simples obter

resultados no caso de um estrato e no caso homogéneo.

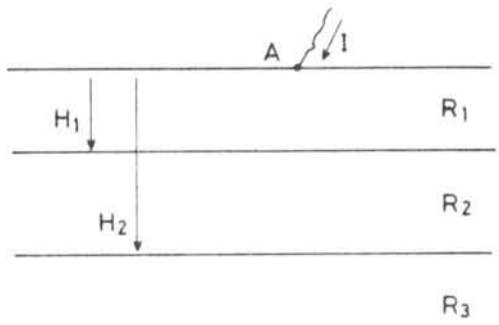


Figura II-4 - Terreno de dois estratos.

E fá-lo-emos considerando primeiro um único eléctrodo de injecção de corrente I situado no ponto A. Naturalmente que terá que haver um eléctrodo de retorno de corrente mas, para o momento, supô-lo-emos tão longe que não afecta o campo eléctrico nas proximidades de A.

De 2.11 e 2.12 conclui-se

$$\vec{i} = \sigma\vec{E} = - \sigma \text{ grad } V$$

e então a equação de continuidade, para todos os pontos excepto o ponto A, onde se dá a injecção de corrente, reduz-se a

$$- \text{div } (\sigma \text{ grad } V) = 0$$

ou, no caso de σ ser constante (o que é válido, suposto o meio homogéneo),

$$\nabla V = 0.$$

No eléctrodo é injectada uma corrente I. Tudo se passa como se houvesse uma geração de carga eléctrica - I (pois a corrente entra e portanto retira carga negativa que pode ser considerada gerada no meio) e então

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -I$$

pelo que a equação de continuidade se escreve nesse ponto

$$\text{div } \vec{i} = I$$

donde

$$\text{div } (-\sigma \text{ grad } V) = I$$

$$\sigma \nabla V = - I$$

$$\nabla V = - \frac{I}{\sigma}$$

Em resumo, o potencial é definido pela equação de Poisson

$$\nabla V = f\ (P)$$

onde f (P) é uma função do ponto:

$$f\ (P) = - \frac{I}{\sigma} \qquad \text{para } P \equiv A,$$

$$f\ (P) = 0 \qquad \text{para } P \neq A.$$

Utilizando uma "função" do ponto de tipo Dirac

$$\delta(P-A) = \infty \qquad \text{se} \qquad P \equiv A$$

$$\delta(P-A) = 0 \qquad \text{se} \qquad P \not\equiv A$$

a equação pode escrever-se, de forma sucinta:

$$\nabla V = -\frac{1}{\sigma}\,\delta\,(P-A)$$

A forma "natural" como esta notação com uma "função" de Dirac surge é sugestiva; de facto, o tratamento rigoroso deste problema exige, não a utilização de funções como, de certa forma algo simplista, temos feito e faremos (por permitir, embora sem rigor formal, atingir as conclusões que nos interessam), mas o recurso à teoria das distribuições. Essa exigência é já particularmente evidente, como o leitor atento terá certamente notado, no estabelecimento das condições fronteira entre meios, que resulta um pouco discutível nos termos em que foi feito.

Ora, no formalismo convencional, a solução da equação de Poisson pode obter-se somando à solução geral da equação homogénea uma solução particular da equação com segundo membro. A equação homogénea é a conhecida equação de Laplace, equação elíptica que tem solução única e que exige, naturalmente, condições fronteira para a sua completa especificação (Morse e Feshbach, 1953, p. 174). Convirá, desde já, tornar clara uma questão que, no fundo, se resume a um problema de notação. De facto, não é sempre viável nem, felizmente, necessário procurar um integral geral de uma equação às derivadas parciais, no sentido que habitualmente se dá ao termo na teoria das equações di-

ferenciais ordinárias. Por solução geral da equação de Laplace entenderemos aqui a mais geral das soluções particulares que satisfazem as condições fronteira impostas.

O meio onde procuramos a solução é constituído pelo terreno. Na sua fronteira, a derivada normal do potencial na superfície de separação com o ar é nula (condição homogênea de Neumann), pois supomos o ar isolante perfeito, e o potencial é, ele próprio, nulo (ou finito, mas constante) no infinito (condição homogênea de Dirichlet), imposição esta algo menos óbvia aqui, na equação de Laplace, do que nas equações hiperbólicas de onda (condição de Sommerfeld ou de radiação). Estas condições fronteira são, como se sabe, apropriadas para a equação de Laplace.

É possível, entretanto, traduzir as condições nas superfícies de separação encontradas em condições envolvendo o potencial, afinal condições fronteira para cada estrato.

Assim, de 2.13, conclui-se que

$$V^1 = V^2$$

isto é, que não pode haver descontinuidade do potencial dum meio ao outro.

E de 2.14, e com as mesmas precauções já então referidas na definição das normais, isto é, considerando um único versor da normal associada a Σ, $\vec{n}$, vem:

$$\sigma_1 \text{ grad } V^1 \mid \vec{n} = \sigma_2 \text{ grad } V^2 \mid \vec{n}$$

ou

$$\sigma_1 \frac{\partial V^1}{\partial n} = \sigma_2 \frac{\partial V^2}{\partial n}$$

onde σ_1 e σ_2 são as condutibilidades dos meios (1) e (2) (ver FiguraII-5).

Reservamos o índice superior a apor à letra V, que representa o potencial, para identificar o meio. Assim chamaremos, em particular, V^1, V^2 e V^3 aos potenciais nos meios (1), (2) e (3) que se podem considerar num terreno de dois estratos. Para melhor resumirmos as equações e suas condições fronteira para cada estrato definamos já um sistema de coordenadas para o problema.

A simetria da campo sugere coordenadas cilíndricas com origem em A (FiguraII-5).

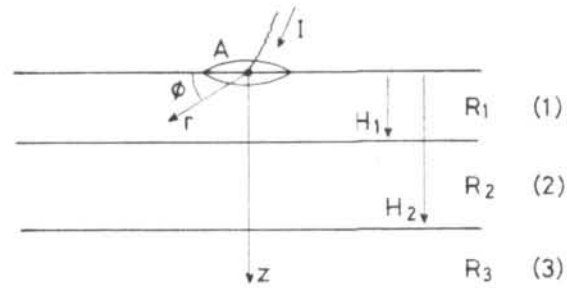


Figura II-5 - Coordenadas cilíndricas.

A equação que determina V^1 é a equação de Poisson

$$\nabla V^1 = R_1 \, I \, \delta(P-A)$$

e as que regem V^2 e V^3 são

$$\nabla V^2 = 0$$

$$\nabla V^3 = 0$$

As condições a que devem estar submetidos V^1, V^2 e V^3 são

$$\left.\frac{\partial V^1}{\partial z}\right|_{z = 0} = 0 \tag{2.15}$$

$$\left.V^1\right|_{z = H_1} = \left.V^2\right|_{z = H_1} \tag{2.16}$$

$$\left.\frac{1}{R_1}\ \frac{\partial V^1}{\partial z}\right|_{z = H_1} = \left.\frac{1}{R_2}\ \frac{\partial V^2}{\partial z}\right|_{z = H_1} \tag{2.17}$$

$$\left.V^2\right|_{z = H_2} = \left.V^3\right|_{z = H_2} \tag{2.18}$$

$$\left.\frac{1}{R_2}\ \frac{\partial V^2}{\partial z}\right|_{z = H_2} = \left.\frac{1}{R_3}\ \frac{\partial V^3}{\partial z}\right|_{z = H_2} \tag{2.19}$$

$$\left.V^1\right|_{r \to \infty} = \left.V^2\right|_{r \to \infty} = \left.V^3\right|_{r \to \infty} = 0 \tag{2.20}$$

$$\left.V^3\right|_{z \to \infty} = 0 \tag{2.21}$$

2.3.2.4 Integral geral da equação de Laplace

A equação de Laplace determina V^2 e V^3 e a solução geral homogénea da equação de Poisson que rege V^1, a que chamaremos V^{1H}.

A escolha de coordenadas feita foi particularmente feliz por duas razões que permitem a fácil integração da equação de Laplace. De facto, cons-

tituem um sistema ortogonal no qual a equação é separável, isto é, a solução geral da equação pode ser obtida a partir de soluções simples, cada uma dependente, apenas, de uma das coordenadas (Morse e Feshbach, 1953, p. 496--497). E, além disso, as superfícies que constituem as fronteiras são superfícies características do sistema e, portanto, de equação muito simples, como, aliás, já constatámos. Esta situação, e, até, o facto da solução ser já clássica, determinaram que utilizássemos este método de integração em desfavor do recurso às funções de Green, que a estrutura do problema, envolvendo uma única fonte pontual e fronteiras estigmáticas, por outro lado, aconselharia (pelo menos a função de fonte que, como se verá, aliás, acabaremos por determinar, implicitamente, ao construir a solução particular da equação de Poisson). Como veremos, o método de separação de variáveis conduz--nos, aqui, também, a uma solução integral, pois o respectivo espectro de valores próprios da constante de separação é contínuo.

A equação de Laplace em coordenadas cilíndricas escreve-se (Morse e Feshbach, 1953, p. 116)

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial V}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 V}{\partial \phi 2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} = 0$$

A simetria do problema implica que o potencial não varie com ϕ, de modo que a equação reduz-se a

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial V}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} = 0 \qquad (2.22)$$

Procuremos então uma solução do tipo

$$v = R\,(r)\ .\ Z\,(z)$$

Substituindo em 2.22 vem, após algumas manipulações,

$$\frac{1}{R}\ \frac{d^2R}{dr^2} + \frac{1}{Rr}\ \frac{dR}{dr} + \frac{1}{Z}\ \frac{d^2Z}{dz^2} = 0$$

Esta equação é satisfeita com

$$\frac{1}{Z}\ \frac{d^2Z}{dz^2} = \lambda^2 \qquad (2.23)$$

e

$$\frac{1}{R}\ \frac{d^2R}{dr^2} + \frac{1}{Rr}\ \frac{dR}{dr} = -\ \lambda^2 \qquad (2.24)$$

onde λ é a constante de separação da equação. A hipótese de trocar os sinais dos segundos membros de 2.23 e 2.24 conduz a soluções incompatíveis com as condições fronteira, nomeadamente Z resultaria uma soma de funções trigonométricas de z, impossível de conciliar, por exemplo, com $V^3 \to 0$ quando $z \to 0$.

As equações 2.23 e 2.24 são equações diferenciais de 2.ª ordem em Z e z e em R e r, respectivamente.

A equação 2.23 é de coeficientes constantes e as suas soluções são

$$Z = e^{\pm \lambda z}$$

A equação 2.24 é uma equação diferencial de Bessel de soluções

$$R = J_0 (\lambda r)$$

e

$$R = Y_0 (\lambda r)$$

onde J_0 é a função de Bessel de primeira espécie de ordem zero e Y_0 é a função de Webber-Bessel de segunda espécie de ordem zero. No entanto, $Y_0 (\lambda r)$ não constitui solução aceitável, porque originaria um valor infinito para o potencial quando r=0.

A família de soluções separadas da equação de Laplace consiste no produto das soluções de 2.23 e 2.24 para todos os valores de λ. A solução geral da equação de Laplace pode ser expressa em termos de uma combinação linear das soluções separadas, para todos os valores de λ (na verdade todos os valores positivos, pois os negativos dão soluções idênticas às dos positivos) (Morse e Feshbach, 1953, p. 498). Então a solução geral da equação de Laplace é, no nosso caso,

$$V = \int_0^\infty (A(\lambda)\ e^{-\lambda z} + B(\lambda)\ e^{\lambda z})\ J_0\ (\lambda r)\ d\lambda$$

Temos assim a expressão geral do potencial livre, solução da equação homogénea do 1º estrato

$$V^{1H} = \int_0^\infty (A_1(\lambda)\ e^{-\lambda z} + B_1(\lambda)\ e^{-\lambda z})\ J_0\ (\lambda r)\ d\lambda$$

e do potencial completo do 2º estrato

$$V^2 = \int_0^{\infty} (A_2(\lambda)\ e^{-\lambda z} + B_2(\lambda)\ e^{\lambda z})\ J_0\ (\lambda r)\ d\lambda$$

A expressão do potencial completo, total, para o 3º estrato, simplifica-se imediatamente, atendendo a 2.21, que implica $B_3(\lambda) = 0$, $\forall\lambda$, para

$$V^3 = \int_0^{\infty} A_3(\lambda)\ e^{-\lambda z}\ J_0\ (\lambda r)\ d\lambda$$

2.3.2.5 Integral particular da equação de Poisson

Para obter o potencial total no 1º estrato é preciso somar ao integral geral, V^{1H}, da equação homogénea de Laplace, uma solução particular da equação de Poisson, V^{1P}, de forma a obter o seu integral geral, $V^1 = V^{1H} + V^{1P}$.

A equação de Poisson é, como vimos,

$$\nabla V = - R_1\ I\ \delta(P-A)$$

mas resulta mais simples procurar uma solução particular a partir doutra equação, donde esta foi aliás deduzida, a equação de continuidade, que podemos escrever, de forma válida para todo o ponto P,

$$\text{div}\ \vec{i} = I\ \delta(P-A) \qquad (2.25)$$

Suponhamos uma semi esfera de terreno com centro em A (Figura II-6). Se for V o volume dessa semi esfera e S a superfície, de versor normal $\vec{n}$, o teorema de Gauss diz-nos que

$$\int_V \text{div}\ \vec{i} = \oint_S \vec{i} \mid \vec{n}\ ds$$

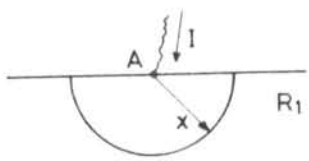


Figura II-6 - Semi-esfera centrada no eléctrodo A

Aceitemos, como temos feito, que não pode haver corrente eléctrica no ar, isto é, a componente normal da densidade de corrente é nula na superfície de contacto com o ar. Então o integral do 2º membro resume-se à superfície formada pela calote esférica de área $2\pi x^2$ e $\vec{i}$ é, aí, constante, dada a simetria do problema, e dirigido segundo a normal. O 2º membro vale então, com i_x como valor da densidade de corrente na superfície da calote de raio x,

$$i_x \ 2\pi\ x^2$$

Quanto ao 1º membro, sabemos que div $\vec{i}$ é nula em todo o ponto excepto em A, onde vale I, de modo que vem, atendendo a 2.25,

$$i_x = \frac{I}{2\pi x^2}$$

O campo eléctrico é, com o sentido de $\vec{i}$,

$$E_x = R_1\ i_x = \frac{R_1\ I}{2\pi x^2}$$

e a diferença de potencial entre dois pontos a distancias X e X' do centro

da esfera é

$$V_X - V_{X'} = \int_X^{X'} \frac{R_1 \; I}{2\pi x^2} \, dx = \frac{R_1 \; I}{2\pi} \left(\frac{1}{X} - \frac{1}{X'} \right)$$

Se impusermos que o potencial seja nulo a distância infinita do centro da esfera, vem, para expressão do potencial no ponto X,

$$V_X = \frac{R_1 \; I}{2\pi X}$$

De modo que a solução particular que procuramos, atendendo a que $X^2 = z^2 + r^2$, é

$$V^{1P} = \frac{R_1 \; I}{2\pi \sqrt{r^2+z^2}}$$

e o integral geral da equação de Poisson para o 1º estrato é, de $V^1 = V^{1H} + V^{1P}$,

$$V^1 = \frac{R_1 \; I}{2\pi \sqrt{r^2+z^2}} + \int_0^{\infty} (A_1(\lambda) \; e^{-\lambda z} + B_1(\lambda) \; e^{\lambda z}) \; J_0 \; (\lambda r) \; d\lambda$$

2.3.2.6 Introdução das condições fronteira

Não será difícil ao leitor verificar que as únicas condições fronteira ainda não utilizadas durante o cálculo das soluções V^1, V^2 e V^3 são as que dizem respeito às separações entre estratos, 2.16, 2.17, 2.18 e 2.19

e a que se refere à fronteira com o ar, 2.15, na parte que toca à parcela V^{1H} de V^1, ao todo 5 equações. Ora as 3 soluções comportam 5 funções desconhecidas de λ que serão determinadas por essas 5 condições.

Para conseguir esse objectivo é preciso exprimir V^{1P} num integral entre 0 e ∞ de uma variável muda, λ. Ora, com (Angot, 1965, p. 594)

$$\frac{1}{\sqrt{r^2+z^2}} = \int_0^\infty e^{-\lambda z} J_0 (\lambda r)\, d\lambda$$

isso é exequível, ficando então

$$V^1 = \int_0^\infty [(A_1(\lambda) + \frac{R_1 I}{2\pi}) e^{-\lambda z} + B_1(\lambda) e^{\lambda z}] J_0 (\lambda r)\, d\lambda$$

As 5 condições podem então escrever-se:

$A_1(\lambda) = B_1(\lambda)$ (de 2.15, atendendo a que V^{1P} já satisfaz essa condição),

$$(A_1(\lambda) + \frac{R_1 I}{2\pi}) e^{-\lambda H_1} + B_1(\lambda) e^{\lambda H_1} = A_2(\lambda) e^{-\lambda H_1} + B_2(\lambda) e^{\lambda H_1} \text{ (de 2.16)},$$

$$\frac{1}{R_1} [-(A_1(\lambda) + \frac{R_1 I}{2\pi}) e^{-\lambda H_1} + B_1(\lambda) e^{\lambda H_1}] = \frac{1}{R_2} [-A_2(\lambda) e^{-\lambda H_1} + B_2(\lambda) e^{\lambda H_1}]$$

(de 2.17),

$$A_2(\lambda) e^{-\lambda H_2} + B_2(\lambda) e^{\lambda H_2} = A_3(\lambda) e^{-\lambda H_2} \quad \text{(de 2.18), e}$$

$$\frac{1}{R_2}\left[-A_2(\lambda)\ e^{-\lambda H_2} + B_2(\lambda)\ e^{\lambda H_2}\right] = -\frac{1}{R_3}\ A_3(\lambda)\ e^{-\lambda H_2} \qquad \text{(de 2.19)}$$

O sistema assim constituído é resolúvel. Como só nos interessa o conhecimento de V^1, pois é V^1 que é medido à superfície, apresentamos aqui um único resultado

$$A_1(\lambda) = B_1(\lambda) = \phi(\lambda) =$$

$$= \frac{R_1\ I}{2\pi}\ \frac{K_1\ e^{-2\lambda H_1} + K_2\ e^{-2\lambda H_2}}{1 + K_1K_2\ e^{-2\lambda(H_2-H_1)} - K_1\ e^{-2\lambda H_1} - K_2\ e^{-2\lambda H_2}}$$

onde

$$K_1 = \frac{R_2 - R_1}{R_2 + R_1}\ ,$$

$$K_2 = \frac{R_3 - R_2}{R_3 + R_2}$$

são os chamados coeficientes de reflexão das resistividades.

Chamando V_2 ao potencial do 1º estrato do terreno de dois estratos, como chamaremos V_0 ao potencial no terreno homogéneo e V_1 ao potencial no 1º estrato (e único) do terreno de 1 estrato, fica então

$$V_2 = \frac{R_1\ I}{2\pi\sqrt{r^2+z^2}} + \frac{R_1\ I}{2\pi\sqrt{r^2+z^2}} \int_0^\infty \frac{K_1\ e^{-2\lambda H_1} + K_2\ e^{-2\lambda H_2}}{1 + K_1K_2\ e^{-2\lambda(H_2-H_1)} - K_1\ e^{-2\lambda H_1} - K_2\ e^{-2\lambda H_2}}$$

$$(e^{-\lambda z} + e^{\lambda z})\ J_0(\lambda r)\ d\lambda$$

2.3.2.7 Terrenos de vários estratos

A determinação do potencial para terrenos de um estrato não oferece qualquer dificuldade específica e limitamo-nos aqui a reproduzir a expressão do potencial no estrato superficial, V_1:

$$V_1 = \frac{R_1 \, I}{2\pi\sqrt{r^2+z^2}} + \frac{R_1 \, I}{2\pi\sqrt{r^2+z^2}} \int_0^{\infty} \frac{K_1 \, e^{-2\lambda H_1}}{1-K_1 \, e^{-2\lambda H_1}} \left(e^{-\lambda z} + e^{\lambda z}\right) J_0 \, (\lambda r) \, d\lambda$$

Para o terreno homogéneo, a solução particular V^{1P} satisfaz a equação de Poisson e todas as condições fronteira que o terreno impõe e que são, para além da criada pela fronteira com o ar isolante, o anulamento do potencial para distâncias infinitas em todas as direcções a partir de A. Nestas condições (Morse e Feshbach, 1953, p. 39), a solução é única e geral, quando se impõe a condição de Sommerfeld, e, portanto,

$$V_0 = \frac{R_1 \, I}{2\pi\sqrt{r^2+z^2}}$$

Para terrenos com mais de dois estratos a solução não é também difícil de encontrar, uma vez que se reproduzem, para todos os estratos intermédios, as condições do 2º estrato do terreno de dois estratos. Apenas resulta um sistema de condições fronteira, a impor, de dimensões cada vez maiores. Na realidade cada novo estrato acrescenta 2 equações a esse sistema. Stefanesco (Stefanesco, S.S. e Schlumberger, C e M, 1930), que primeiro obteve os resultados expostos nesta secção, desenvolveu explicitamente no seu trabalho os casos dos terrenos de 2 e 3 estratos. Posteriormente, outros autores, como Flathe (1955) e Onodera (1960), apresentaram úteis e rápidas fórmulas de re-

corrência que permitem, a partir dos exemplos de menos estratos, mais simples, determinar a chamada função "Kernel" ou nuclear, $\theta(\lambda)$, do integral de Stefanesco para qualquer número de estratos e, portanto, a solução pretendida:

$$V_n = \frac{R_1 I}{2\pi\sqrt{r^2+z^2}} + \frac{R_1 I}{2\pi\sqrt{r^2+z^2}} \int_0^{\infty} \theta(\lambda) \ (e^{-\lambda z} + e^{\lambda z}) \ J_0 \ (\lambda r) \ d\lambda$$

2.3.2.8 Diferenças de potencial entre eléctrodos de toma de medida.

O resultado que nos interessa não foi ainda atingido porque, de facto, o eléctrodo de retorno da corrente não está, como tem vindo a ser admitido, a distância teoricamente infinita de A, mas a distância finita.

Como a corrente sairá do terreno nesse outro eléctrodo A', se considerarmos um sitema de eixos centrado nele e paralelo ao considerado para o eléctrodo A, obteremos, para os potenciais criados num ponto qualquer do terreno, expressões simétricas das já obtidas com o eléctrodo A.

Entretanto, as medições de potencial vão ser feitas à superfície ($z = 0$) e segundo uma configuração electródica colinear simétrica (Figura II-7)

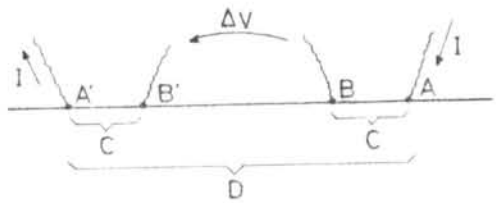


Figura II-7 - Configuração tetraelectródica colinear simétrica

É a diferença de potencial ΔV que medimos.

O potencial no ponto B, criado por A, obtém-se fazendo nas expressões de V_0, V_1 ou V_2 (ou V_n), confor-

me o caso, $z = 0$ e $r = C$.

O potencial criado no mesmo ponto por A' obtém-se das mesmas expressões, trocando-lhes o sinal, e pondo $z = 0$, $r = D-C$.

O potencial total será, dado que a linearidade da equação de Laplace permite sobrepor as soluções, a soma daqueles dois potenciais.

Entretanto, a introdução do eléctrodo A' obriga, naturalmente, o potencial total, criado pelos dois eléctrodos, a anular-se a meio do dispositivo electródico e a ser anti simétrico, de modo que a diferença de potencial entre B e B', ΔV, será o dobro do potencial de B.

As diferenças de potencial medidas à superfície entre os eléctrodos B e B' resultam então para os três tipos de terreno que nos interessam:

$$\Delta V_0 = \frac{R_1 L}{\pi} \left(\frac{1}{C} - \frac{1}{D-C}\right)$$

$$\Delta V_1 = \frac{R_1 I}{\pi} \left(\frac{1}{C} - \frac{1}{D-C}\right) + \frac{2 R_1 I}{\pi} \int_0^\infty \frac{K_1 e^{-2\lambda H_1}}{1 - K_1 e^{-2\lambda H_1}} \left(J_0(\lambda C) - J_0(\lambda(D-C))\right) d\lambda$$

$$\Delta V_2 = \frac{R_1 I}{\pi} \left(\frac{1}{C} - \frac{1}{D-C}\right) + \frac{2 R_1 I}{\pi} \int_0^\infty \frac{K_1 e^{-2\lambda H_1} + K_2 e^{-2\lambda H_2}}{1 + K_1 K_2 e^{-2\lambda (H_2 - H_1)} - K_1 e^{-2\lambda H_1} - K_2 e^{-2\lambda H_2}}$$

$$\left(J_0(\lambda C) - J_0(\lambda(D-C))\right) d\lambda$$

e para um número n de estratos, de uma forma geral,

$$V_n = \frac{R_1 I}{\pi} \left(\frac{1}{C} - \frac{1}{D-C}\right) + \frac{2 R_1 I}{\pi} \int_0^\infty \theta(\lambda) \left(J_0(\lambda C) - J_0(\lambda(D-C))\right) d\lambda$$

2.4 Métodos de interpretação

Supõe-se ter sido Wenner quem, em 1916, introduziu a ideia de tomar como medida correspondente a cada posição da configuração electródica, não a diferença de tensão entre os eléctrodos B e B', ΔV_0, ΔV_1, ΔV_2, mas uma outra grandeza dela dependente, bem como da geometria da configuração, a *resistividade aparente*, definida como a resistividade de um terreno homogéneo que originaria, nas mesmas circunstâncias, a diferença de potencial medida. Seja então ΔV a diferença de potencial medida, independentemente do tipo de terreno, com uma corrente injectada I. Se o terreno fosse homogéneo de resistividade r_1 (a resistividade aparente) seria

$$\Delta V = \frac{r_1 \, I}{\pi} \left(\frac{1}{C} - \frac{1}{D-C}\right)$$

o que permite determinar r_1

$$r_1 = \frac{\Delta V}{I} \frac{\pi}{\frac{1}{C} - \frac{1}{D-C}} \qquad (2.26)$$

Basta atendermos às expressões que dão ΔV_0, ΔV_1 e ΔV_2 para constatar que r_1 não depende da corrente injectada I. Assinale-se, naturalmente, que, se o terreno for de facto homogéneo, $r_1 = R_1$.

A sondagem eléctrica vertical processa-se então centrando o dispositivo sobre a vertical a sondar e aumentando progressivamente o seu tamanho, mas mantendo o seu parâmetro definidor C ou, noutros casos, C/D. São feitas, para cada tamanho considerado, as medidas das resistividades aparentes (directamente, usando aparelhagem apropriada, ou convertendo medidas

de tensão através de 2.26) e, normalmente, colocadas em gráfico em função das distâncias entre eléctrodos de corrente (medida do tamanho do dispositivo) que vão sendo utilizadas. Obtêm-se assim as curvas de resistividade aparente. O problema que se põe a seguir é o de interpretar essas curvas ou medidas, obviamente não exactas, problema que é conhecido como inverso, em oposição ao problema directo que constituiu e ainda constitui, se quisermos optimizar os cálculos, a obtenção dos valores teóricos das curvas, dados os parâmetros do terreno. O objectivo do problema inverso é o de, dadas as medidas, determinar os parâmetros, resistividades e espessuras ou profundidades, do terreno.

Os primeiros métodos de interpretação não formulavam a questão do problema inverso com esta precisão. O facto da resistividade aparente não depender da corrente injectada, mas apenas da geometria da configuração, levou vários autores a construírem curvas teóricas de resistividades aparentes, ligadas a configurações determinadas (em geral Schlumberger e Wenner) e correspondentes a vários tipos de terrenos estratificados com diferentes resistividades e espessuras de estratos. Construíram-se assim catálogos de curvas como os da Cie. Générale de Géophysique de 1933-36, a colecção Pylaev, as 3 colecções soviéticas de Geofisika de 1963, a colecção de Orellana e Mooney de 1966 e a de Mooney e Wetzel de 1956, a colecção holandesa do Rijwaterstaat de 1969, etc; algumas delas, como se pode ver, relativamente recentes. A interpretação fazia-se comparando simplesmente as curvas obtidas no campo com as do catálogo. Antes da utilização destes catálogos, as regras de interpretação eram fundamentalmente empíricas e a maior delas não sobreviveu a um estudo mais cuidado. A primeira publicação que aborda o método de comparação com curvas teóricas parece dever-se a Roman (1931).

Um segundo fôlego deste tipo de métodos interpretativos foi conseguido com a introdução da ideia do *ponto auxiliar*. Duma forma geral, os métodos de ponto auxiliar baseiam-se na possibilidade de substituir, num terreno de vários estratos, sucessivamente o primeiro e o segundo estratos por um outro equivalente. Se o terreno for, por exemplo, de 2 estratos, a primeira parte da curva de resistividade obtida no campo, por comparação com curvas de 1 estrato, dá indicações sobre R_1, H_1 e R_2. É então possível, através de relações semi-empíricas de redução, substituir esses dois estratos por um só e continuar o estudo da curva de campo, comparando agora a sua parte direita com curvas também de um estrato e levando em linha de conta a redução feita. As relações de redução podem ser colocadas em gráfico e toda a interpretação pode ser feita graficamente, utilizando, para além do catálogo normal das curvas, os gráficos das relações, ditos gráficos de pontos auxiliares. O estabelecimento dessas relações é facilitado quando se processa utilizando os parâmetros de Dar Zarrouk apresentados por Maillet (1947), a resistência unitária transversal T e a condutância unitária longitudinal S, para determinar, primeiro, a partir dos dois estratos, um único estrato pseudo-anisotrópico e, depois, o estrato equivalente, isotrópico (Orellana, 1963, Zohdy, 1965). A ideia de redução progressiva do número de estratos envolvidos na interpretação deve-se talvez a Hummel (1929, 1932), embora na altura parecesse ter maior e mais simples aplicabilidade do que na realidade se provou ter. Mas a publicação de curvas de pontos auxiliares, pela primeira vez, deve-se a Ebert (1943).

Talvez que o maior número de métodos de inversão propostos até hoje se baseie na determinação dos parâmetros através da função nuclear ou "Kernel" do integral de Stefanesco, ou duma sua transformada. Slichter (1933),

com base em trabalhos de Langer (1933), foi um dos primeiros a avançar neste domínio. A função com que desenvolveu o seu método não era a função característica ou nuclear de Stefanesco $\theta(\lambda)$, mas uma sua transformada,

$$T(\lambda) = R_1 (1 + 2\,\theta(\lambda)),$$

conhecida por função nuclear de Slichter ou, noutros autores, por transformada resistiva ("resistivity transform"), muito utilizada em trabalhos posteriores.

A ideia geral do método é simples. Suponhamos conhecida a resistividade (ou, duma forma geral, uma função da diferença de potencial ΔV) função da distância interelectródica D, $r_1(d)$. Para clarificar a exposição, tratemos a configuração de Schlumberger (ver, por exemplo, Kumar e Chowdary (1982) para o dispositivo de Wenner) onde é sabido que, no caso da distância entre eléctrodos de toma de medida ser muito menor que a distância interelectródica D, a resistividade aparente pode ser expressa por (Stefanesco et al., 1930; Hoversten, Dey e Morrison, 1982)

$$r_1(D) = R_1 \left(1 + \frac{D^2}{2} \int_0^{\infty} \theta(\lambda)\, J_1\left(\frac{\lambda D}{2}\right) d\lambda\right)$$

onde quer $r_1(D)$ quer $\theta(\lambda)$ são também funções dos parâmetros do terreno. Ora bem, se conseguirmos extrair, de $r_1(D)$, $\theta(\lambda)$, teremos uma função, agora não de D, mas de λ, que tem grandes vantagens sobre $r_1(D)$. Em primeiro lugar, é independente da configuração, é o Kernel do integral de Stefanesco, só dependente dos parâmetros e de λ (o facto de estarmos a abordar uma configuração particular só tem a ver com o processo da sua obtenção a partir de $r_1(D)$). Mas

sobretudo o que a torna aliciante é o ser uma função algébrica, relativamente simples, dos parâmetros do terreno.

Teoricamente, é fácil obter $\theta(\lambda)$, e consequentemente, por exemplo, $T(\lambda)$, a partir de $r_1(D)$. O chamado integral de Fourier- Bessel ou fórmula integral de Hankel ou ainda fórmula de inversão de Hankel (Erdélyi et al., 1953, vol. II, p. 73) garante-nos que, se

$$\phi(\frac{D}{2}) = \int_0^\infty \theta(\lambda)\ J_\upsilon(\frac{\lambda D}{2})d\lambda$$

então

$$\theta(\lambda) = \frac{\lambda}{4} \int_0^\infty D\ \phi(\frac{D}{2})\ J_\upsilon(\frac{\lambda D}{2})dD \qquad (2.27)$$

No caso presente será $\phi(\frac{D}{2}) = \frac{r_1(D) - R_1}{D^2/2}$ e $\upsilon = 1$.

As dificuldades práticas do método são duas. Primeiro: a obtenção de $\theta(\lambda)$ a partir de $r_1(D)$ que, recorde-se, é dado sob a forma duma colecção de pontos. Segundo: a avaliação ou determinação dos parâmetros do terreno a partir duma curva, $\theta(\lambda)$, onde λ não é uma grandeza física que nos seja de "visualização" fácil. Vozoff (1958) parece ter sido o primeiro a fazer notar que λ, com dimensões do inverso dum comprimento, é, de alguma forma, equivalente ao número de onda das equações às derivadas parciais hiperbólicas.

Tem havido várias sugestões para resolver quer uma quer outra das dificuldades. O método de Slichter (1933), como o de Langer (1933), foram originalmente propostos para resistividades variando continuamente com a profundidade. O núcleo ou Kernel era obtido por integração numérica a par-

tir da curva de resistividades aparentes utilizando expressões do tipo 2.27. A solução, numa série de potências, era depois utilizada para, a partir dos respectivos coeficientes, determinar os coeficientes duma outra série de potências que exprimia a resistividade do terrenc em função da profundidade. Pekeris (1940) determina, para um terreno estratificado horizontalmente, a função nuclear por integração numérica (sugere também, curiosamente, a integração mecânica, com uso do planímetro) e utiliza depois processos gráficos para, da função nuclear, determinar os parâmetros do terreno. Para isso, representa, em função de λ, sucessivas curvas (à medida que vai determinando os parâmetros mais "superficiais" do terreno), funções simples da curva de Kernel, e vai encontrando os parâmetros a partir das assímptotas dessas curvas. O método revelou-se eficaz com a restrição, porém, de cada estrato ser de maior espessura que os que lhe são superiores. No entanto, a sua principal dificuldade de aplicação reside no cálculo da curva do núcleo que exige, para cada valor de λ escolhido, uma integração numérica envolvendo funções oscilantes, as funções de Bessel. Vozoff (1958) não resolve essa dificuldade, continuando a utilizar a integração numérica para obter o Kernel, mas aborda de forma diversa o problema de passagem deste para os parâmetros: ajusta, pelo método dos mínimos quadrados, a curva do núcleo obtida a curvas teóricas determinadas com parâmetros que se vão aproximando dos reais, à medida que o ajuste se vai processando. Trata-se portanto já dum método de mínimos quadrados aplicado, não à curva de resistividades aparentes, mas à da função nuclear. Koefoed (1965), ao contrário, utiliza o método de Pekeris para obter, a partir da curva de Kernel, os parâmetros do terreno, mas apresenta nada menos de 4 processos de obter aquela curva a partir da das resistividades aparentes: por integra-

ção numérica com a integranda transformada de modo a torná-la mais rápida; aproximando a curva de resistividades aparentes por curvas assimptóticas de um estrato e procurando a curva do núcleo a partir das correspondentes a essas curvas assimptóticas; aproximando a curva de resistividades aparentes em cada ponto com somas de funções algébricas, de contribuição para a curva de Kernel facilmente calculável; e, seguindo o mesmo método, mas aproximando a curva das resistividades com somas de funções exponenciais. A via de aproximar as curvas de resistividades aparentes por somas de funções integráveis analiticamente segundo 2.27, de forma a poder determinar as suas contribuições para a curva de função nuclear, tem-se revelado frutuosa, acompanhada pela aplicação do método dos mínimos quadrados para determinação dos coeficientes dessas funções (Santini e Zambrano, 1981).

Mas a mais poderosa contribuição dada a este género de métodos, que utilizam a função característica como passo intermédio de interpretação, foi trazida pela teoria dos filtros lineares digitais aplicada à obtenção da curva de Kernel a partir da curva de resistividade aparente. Para compreendermos melhor os métodos propostos, resumamos os pontos principais da teoria dos filtros lineares aplicada ao caso presente (Murakami e Uchida, 1982).

Fazendo em 2.27 a transformação de variáveis

$$\lambda = e^{x}$$

$$\frac{D}{2} = e^{-y}$$

adaptada, aliás, à situação corrente das medidas serem tomadas em pontos logaritmicamente equidistantes, resulta

$$\frac{\theta(e^x)}{e^x} = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\bar{e}^y)\ J_U\ (e^{x-y})\ \bar{e}^{2y}\ dy$$

ou, pondo

$$0(x) = \frac{\theta(e^x)}{e^x} \quad ,$$

$$I(y) = \phi(\bar{e}^y)\ \bar{e}^{2y},$$

$$F\ (x-\ y) = J_U\ (e^{x-y}),$$

$$0(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} I\ (y)\ F\ (x-\ y)\ dy = \int_{-\infty}^{+\infty} I\ (x-\ y) F\ (y)\ dy \qquad (2.28)$$

forma conhecida do integral de convolução. A I(y), apenas dependente das resistividades e das distâncias interelectródicas, chamar-se-à função de entrada; a 0(x) que, escolhido um valor de λ, e portanto de x, nos dá o valor do núcleo correspondente, chama-se função de saída; e à função F(x-y), função de filtro linear, pois o integral de convolução formula uma relação linear entre as duas funções, de entrada e de saída.

Ora, se o espectro de Fourier duma função f(t) não comporta frequências acima de uma certa frequência 1/2T (Brigham, 1974, p. 83), é

$$f(t) = \sum_{K=-\infty}^{+\infty} f\ (KT-\alpha)\ \text{sinc}\ \frac{t\ -\ KT\ +\ \alpha}{T}$$

onde $\text{sinc}\ \frac{a}{b} = \frac{\text{sen}\ \frac{\pi a}{b}}{\pi \frac{a}{b}}$

A nossa função de filtro, envolvendo funções de Bessel, é fortemente oscilante, portanto longe de satisfazer aqueles requisitos, pelo menos para uma frequência 1/2T baixa. Mas a função de entrada ligada à curva da resistividade aparente é relativamente suave. As muito altas frequências são devidas ao ruído ou erro das medições, que temos todo o interesse em eliminar. Então podemos pôr

$$I(x-y) = \sum_{K=-\infty}^{+\infty} I(x-KT+\alpha)\ \text{sinc}\ \frac{y - KT + \alpha}{T}$$

e, substituindo em 2.28,

$$O(x) = \sum_{K=-\infty}^{+\infty} I\ (x-KT+\alpha)\ C\ (k) \qquad (2.29)$$

onde

$$C\ (K) = G\ (KT - \alpha) \qquad (2.30)$$

com

$$G\ (a) = \int_{-\infty}^{+\infty} \text{sinc}\ \frac{a-y}{T}\ F\ (y)\ dy \qquad (2.31)$$

C(K) são os coeficientes do filtro linear. O filtro fica caracterizado, naturalmente, pela função G(a), pelo número de coeficientes C(K) utilizados, pela frequência 1/2T e pela fase α. A G(a) chama-se resposta "sinc." do filtro e a 1/2T, frequência de Nyquist.

Referiremos alguns dos filtros mais importantes utilizados, atendendo, apenas ou principalmente, à forma como são obtidos os coeficientes do filtro.

Foi Gosh (1971) quem primeiro introduziu a teoria dos filtros lineares em métodos de inversão de medidas geoeléctricas. E determinou os coeficientes do seu filtro directamente a partir do espectro da função do filtro. De facto, e representando a transformada de Fourier de uma função y(t) por $\hat{y}(f)$, é sabido que, de 2.28 ,

$$\hat{O}(f) = \hat{I}(f)\ \hat{F}(f).$$

Gosh (1971) tomou então duas funções relacionadas uma com a outra como as funções de entrada e de saída no integral de convolução (Koefoed (1968) publicou conjuntos de pares de funções nestas condições) e determinou os respectivos espectros. Determinou depois por simples divisão a transformada de Fourier da função de filtro. Truncou depois esse espectro e inverteu a transformada de Fourier, obtendo os coeficientes pretendidos.

Já Koefoed (1972) apresentou outro filtro, obtido a partir duma forma simplificada de G(a), conseguida obtendo a transformada de 2.31, simplificando o espectro de F(y), em particular desprezando frequências mais altas que 1/2T, e voltando por transformação inversa a escrever G(a), que ainda simplificou posteriormente. Bernabini e Cardarelli (1978) calcularam os seus coeficientes integrando numericamente G(a), aliás como fizeram também Bichara e Lakshmanan (1976).

Mas outro grande contributo à aplicação dos filtros lineares em

interpretação geoeléctrica, via função nuclear, foi dado por Koefoed e Dirks (1979). O processo consiste, utilizando igualmente 2 funções relacionáveis pela convolução, em calcular os coeficientes do filtro, em número previamente fixado, naturalmente, minimizando o valor médio da soma dos quadrados das diferenças entre a função de saída real e a obtida com o filtro. Trata-se dum método de mínimos quadrados, conhecido como método de Wiener-Hopf, de projecto de filtros e para o qual há um algoritmo bastante eficiente desenvolvido por Levinson. Há alguns problemas ligados a esta abordagem do problema. Por um lado, o filtro e as suas características ficam muito dependentes das duas funções utilizadas para o gerar e, por outro, como a sua determinação não utiliza o domínio das frequências, ficam por definir a frequência de Nyquist e a fase a introduzir. Vários autores, como Murakami e Uchida (1982) e Guptasarma (1982), têm vindo a propor soluções para essas dificuldades, nuns casos, como fizeram os primeiros autores com base em trabalho de Johansen e Sørensen (1979), retirando dados do domínio das frequências, noutros, o do 2º autor, procurando com funções de teste encontrar erros mínimos para cada classe de funções.

Todo este desenvolvimento trazido aos métodos interpretativos através das funções características, métodos hoje conhecidos como métodos de interpretação directa, tem sido acompanhado por algumas propostas interessantes na sua segunda parte, isto é, na passagem do Kernel para os parâmetros do terreno. Aí os métodos de ajuste por mínimos quadrados têm encontrado certo sucesso, uma vez que o Kernel é uma expressão simples dos parâmetros, permitindo o recurso a métodos de optimização com derivadas de maior ordem (Ginzburg, Loewenthal e Shoham, 1976). Mais recentemente, Szaraniec (1980, 1982) propôs a passagem aos parâmetros por um método do tipo Pekeris, a que

chamou de acumulação de estratos, e por aplicação do algoritmo de deconvolução dinâmica utilizado em prospecção sísmica.

Entretanto, outros métodos de índole completamente diferente foram também estudados. Citaremos, para já, 3 deles que são, ao que nos parece, muito prometedores. O primeiro (aliás seria melhor falar já numa classe de métodos) procura fazer a interpretação, não a partir da resistividade aparente, mas a partir da sua derivada em relação à distância interelectródica. O leitor pode encontrar em Zohdy (1969), não só uma descrição dos métodos, como também das suas vantagens e inconvenientes. Outro método que queríamos referir, extremamente curioso, deve-se a Kunetz e Rocroi (1970) e parte da função característica ou Kernel que surge no cálculo da resistividade aparente através da chamada segunda forma da equação de prospecção (Maillet, 1974), pouco utilizada até hoje. Normalizando distâncias e parâmetros e supondo o terreno dividido em camadas de igual espessura, os autores desenvolvem um método de cálculo das resistividades das diferentes camadas a partir da transformada de Fourier da função característica referida. O terceiro método é também aliciante. Deve-se a Coen e Wang-Ho Yu (1981) e reduz o problema da inversão, engenhosamente, ao problema da resolução de uma equação de Schroëdinger, num caso simples e já solucionado. O método, teoricamente concebido para resistividades variando continuamente com a profundidade, é adaptado depois a terrenos estratificados.

Deixamos propositadamente para o fim desta sucinta resenha a última classe de métodos que queríamos tratar, pelo facto de serem parentes do método que desenvolveremos ao longo do trabalho. São métodos que procuram obter os parâmetros directamente da curva de resistividades aparentes, ajustando curvas teóricas à curva do campo pelo método dos mínimos quadrados (ou méto-

dos próximos). O primeiro trabalho deste tipo foi apresentado por Inman, Ryu e Ward (1973), e caracteriza-se pela utilização da inversa generalizada na resolução dos sistemas que o método de mínimos quadrados acarreta. Por serem atributo do nosso próprio método e por representarem um progresso em relação aos métodos existentes, permitimo-nos apresentar algumas características do método nas próprias palavras do texto de Inman et al. (1973):

"Nenhuma das investigações acima lida com o método da inversa generalizada, que é completamente discutido por Backus e Gilbert (1967, 1968, 1969). Eles mostram que o método funciona muito bem em problemas geofísicos, fornecendo informação sobre a resolução dos parâmetros do modelo e o ajuste por mínimos quadrados dos dados. Em muitos casos a solução é única relativamente a uma hipótese inicial de partida. Soluções alternativas, se existem, são muitas vezes tão afastadas de soluções geologicamente aceitáveis que são facilmente ignoradas. O método não quebra, como alguns dos métodos mencionados acima, se os dados tiverem muito ruído ou forem insuficientes, mas pode dar um modelo com parâmetros pobremente definidos. O método dará a melhor solução com base nos dados medidos. Por estas razões decidimos utilizar a teoria da inversa generalizada na resolução do problema inverso para terrenos estratificados horizontalmente".

Ward (1980) acrescenta: "Inman et al. (1973) introduziram o uso do último método (o da inversa generalizada), demonstrando que era a mais potente técnica para estimar os parâmetros dum solo estratificado e para descrever a não unicidade das soluções inversas".

Não especificaremos o método em detalhe, apenas as suas linhas mestras, uma vez que muitos dos conceitos envolvidos são extensivamente utili-

zados ao longo do presente trabalho e resultarão então perfeitamente claros. Basta-nos assim dizer que os parâmetros são obtidos a partir do estimador de mínimos quadrados aplicado *globalmente* a todas as medidas efectuadas. Como a expressão das resistividades aparentes é não linear, a solução é encontrada após algumas iterações, num processo de minimização da soma dos quadrados dos resíduos da ordem de convergência do método de Newton-Raphson. A matriz do sistema, que em cada iteração é preciso resolver, vem, em muitos casos, singular, impedindo a continuação das iterações. O problema é resolvido introduzindo, oportunamente, nos cálculos, a matriz inversa generalizada da matriz das derivadas das resistividades aparentes, em todos os pontos medidos, em ordem aos parâmetros. No seu trabalho Inman et al. (1973) introduzem também os conceitos de análise espectral, de matriz de densidade de informação e de matriz de resolução.

São os próprios autores que chamam a atenção para algumas dificuldades do método. Uma, é que, em muitos casos, é preciso limitar o passo de cada iteração sob pena de divergência do algoritmo de optimização. Outra, é que a solução fica algo dependente da hipótese inicial de partida, de "guesses" para os parâmetros. Uma terceira, é que o método pressupõe que se conhece o número de estratos do terreno. Se, eventualmente, nos enganarmos e tentarmos inverter um terreno de n estratos com um modelo de menos estratos, o algorítmo actua normalmente, e a solução obtida só se pode distinguir da correcta a partir da qualidade do ajuste entre a curva do campo e a curva obtida com os parâmetros que constituem a solução. Se, ao contrário, tentarmos impor um modelo de mais estratos do que os presentes no terreno, o algoritmo tem um comportamento ambíguo, embora os valores próprios da matriz das derivadas correspondentes (em termos de análise espectral) a esses eventuais es-

tratos em excesso se tornem muito pequenos, em geral (mas nem sempre). Sobre o problema de escolha do modelo, Inman et al. (1973) terminam dizendo:

"Se o modelo assumido tem demasiados estratos, o tamanho dos valores próprios associados com os estratos em excesso será muito pequeno. Deste ponto de vista parece melhor aceitar o modelo mais complexo que não tenha valores próprios muito pequenos como modelo correcto em vez de escolher o modelo mais simples como é frequentemente feito".

Inman (1975) publicou um segundo trabalho propondo algumas alterações ao método de mínimos quadrados que foi exposto acima. São três as alterações fundamentais: a substituição do método da inversa generalizada pelo chamado método de "ridge regression" (Marquardt, 1970; Hoerl e Kennard, 1970 a, b); o cálculo das potências e derivadas, que no trabalho anterior era feito segundo desenvolvimento em série, passa a ser feito por integração numérica; um cuidado especial é posto no cálculo dos erros com que os parâmetros são obtidos, a partir do estimador dos mínimos quadrados que fornece uma aproximação à matriz de covariâncias das soluções, conhecida ou estimada a variância dos erros das medidas; e é analisado o problema dos parâmetros altamente correlacionados. O problema do erro da solução é assim, pela primeira vez, abordado de forma eficiente.

A substituição do método da inversa generalizada pelo da "ridge regression" é assim justificada: "Marquardt (1970) mostra a semelhança entre o método de "ridge regression" e o método da inversa generalizada. Ele conclui que o método de "ridge regression" é preferível para problemas com alguns valores próprios muito pequenos, enquanto que o método da inversa generalizada é preferível para problemas com alguns valores próprios nulos. A maior parte dos problemas de resistividade envolve valores próprios pequenos,

mas raramente nulos".

No entanto, Inman (1975) não procurou um algoritmo que ajustasse o valor do parâmetro de Marquardt de iteração para iteração. Diz textualmente: "Bons resultados têm sido obtidos utilizando a técnica de Marquardt (1963) com um valor grande de K (parâmetro de Marquardt), da ordem de 1.0, quando a hipótese inicial está longe da solução. Um valor mais pequeno para K, da ordem de .01 ou menos, o que é equivalente a incluir os valores próprios mais pequenos no estimador, é utilizado perto da solução". Isso, infelizmente, não só pode tornar o algoritmo mais moroso, pois não se tenta a convergência quadrática, como introduz um erro sistemático nos parâmetros finais que foge ao controlo estatístico do erro, já que o estimador linear de "ridge regression", com o respectivo parâmetro (multiplicador de Lagrange) diferente de zero, é enviesado e não se procura atingir a solução, na última iteração, com ele nulo. É certo que, com este estimador, se podem obter erros médios quadráticos menores do que com o estimador de mínimos quadrados, mas o facto só é vantajoso se, como é, aliás, o caso, se fizer apenas uma optimização global, utilizando todas as medidas, e se o parâmetro for bem escolhido. Aliás, a técnica original de Marquardt não exclui a hipótese de, se necessário, atingir a solução com um valor elevado do parâmetro.

Entretanto, ganhou-se um certo controlo sobre a qualidade de ajuste da curva teórica com a retirada do campo, através da possibilidade de estimar, a partir dos resíduos, a variância dos erros das medidas. Todavia, a comparação dessa variância estimada com a variância real exige o conhecimento desta última, o que nem sempre é o caso.

Oldenburg (1978), ao desenvolver, com base na teoria da inversa generalizada, um método interpretativo capaz de sugerir, ele próprio, os mo-

delos a aplicar (embora o método tenha muito pouco a ver com os que temos vindo a tratar, ditos métodos de mínimos quadrados), faz a seguinte apreciação do método de Inman (1975): "Com este método, dados de diferentes geometrias (e na verdade dados de medições geofísicas inteiramente diferentes) podem ser invertidos simultaneamente, e erros nas observações podem ser relacionados com erros na resistividade e espessura de cada estrato. Também as matrizes de densidade de informação e de resolução fornecem informação sobre que parâmetros (resistividade e espessura de cada estrato individual) são melhor determinados e que observações dão a maior parte da informação para a determinação desses parâmetros. Há, contudo, algumas dificuldades nesta aproximação. É requerido que o número de parâmetros seja especificado a priori, todavia a especificação de um número demasiadamente baixo de parâmetros significa que não pode ser encontrado nenhum modelo que se ajuste às observações, enquanto que a super-parametrização causa problemas com a estabilidade numérica.

Recentemente, Hoversten, Dey e Morrison (1982) compararam o método de Inman com outros, também globais de mínimos quadrados mas utilizando outros algoritmos de optimização: o método simplex; um método de optimização sem constrições devido a Bremermann (1970); o método de Peckham, sem cálculo das derivadas; e o algoritmo espiral (Jones, 1970). O método de "ridge regression" de Inman provou ser o melhor, no sentido de atingir o mesmo erro na aproximação dos parâmetros com o menor número de avaliações da função objectivo. Entretanto uma contribuição importante, a nosso ver, para a aplicabilidade deste tipo de métodos foi dada por Johansen (1975, 1977), ao propor um método de interpretação dividido em duas partes: uma primeira, que procura uma aproximação à solução utilizando interactivamente um "display"

gráfico de computador; uma segunda, em que faz uma optimização global, mas tomando como resíduos as diferenças dos logaritmos das resistividades aparentes medidas e calculadas e minimizando a soma dos seus quadrados como função dos logaritmos dos parâmetros do terreno. O método permite ainda "congelar" alguns parâmetros sobre os quais haja informação suplementar, mantendo-os constantes. Chyba (1983) alargou essa possibilidade a combinações lineares de parâmetros, em particular somas de espessuras.

Ainda uma referência a uma classe de métodos de interpretação, os que utilizam modelos reduzidos para experimentação e estudo de hipóteses de estrutura do terreno e do comportamento de configurações, referência breve, não porque não tenham contribuído decisivamente para o avanço da prospecção geoeléctrica, mas porque sugerem uma via de ataque do problema completamente diferente da nossa. Entre os trabalhos dedicados a estes métodos merecem referência, de entre os mais recentes, os de Clara (1964), Roy e Elliott (1980) e Majumbar e Datta (1981).

2.5 Um novo método de interpretação

2.5.1 Introdução do método

Ao analisar o método de Inman, encontra-se, como seu ponto mais fraco, a questão da distinção de qual o modelo correcto que representa o terreno. Para a ultrapassar, ocorre imediatamente uma metodologia. Suponhamos que temos n medidas num lote de sondagem eléctrica vertical retirado do campo. Que o terreno não é homogéneo, caso o não seja, é fácil de verificar. Para averiguar da hipótese do terreno ser de um estrato podemos ir efectuando inversões, a começar, por exemplo, com as quatro primeiras medidas, de-

pois com cinco e assim sucessivamente, juntando de cada vez uma medida e actuando como se, em cada inversão, esse fosse o lote de que dispusésse-mos. Rejeitada a hipótese de um estrato (ou não, se fosse esse o caso), o modelo de 2 estratos seria então ensaiado a partir da medida que determi-nou essa rejeição. Entretanto, isso teria a vantagem de irmos conhecendo as sucessivas camadas do terreno e de os resultados da inversão com um modelo serem assim boas estimativas para os parâmetros correspondentes do modelo seguinte. Essa vantagem é muito importante porque para cada novo modelo ficamos a precisar, apenas, de apresentar "guesses" para os dois novos pa-râmetros que o modelo introduz, o que é salutar em sistemas de muitos parâ-metros. Outra vantagem suplementar seria a de que, encontrado o modelo que realmente representa o terreno, dispúnhamos, a partir da amostragem cons-tituída pelos parâmetros obtidos nas sucessivas inversões, de uma estimati-va do erro com que eles ficaram determinados, que se podia inclusivamente comparar com a obtida através da matriz de covariâncias do estimador, até porque, se o erro das medidas for muito grande, a aproximação através da ma-triz de covariâncias perde validade. Podemos também mais facilmente elimi-nar medidas aberrantes.

Para além de outras dificuldades práticas, paralelas aliás às que o método que desenvolvemos enfrenta e que na devida altura abordaremos, a meto-dologia enunciada apresenta dois grandes problemas.

A primeira dificuldade prende-se com a mudança de filosofia na acei-tação ou rejeição de uma hipótese que a metodologia pressupõe. De facto, essa decisão deixa de ser feita a partir da qualidade de ajuste das curvas teórica e prática ou, o que não difere muito, a partir da comparação da es-timativa dos erros das medidas, obtida dos resíduos do ajuste, com os erros

que se supõe elas terem realmente, para depender do "andamento" dos parâmetros virtuais que a hipótese ou modelo implica, à medida que vamos alargando a parte do lote utilizada. Se os parâmetros se mantiverem os mesmos, o terreno é compatível com o modelo. Se, ao contrário, evoluírem a partir duma medida (ou desde o princípio), é porque vai aumentando a influência de um novo estrato que o modelo em ensaio não supõe. Mas exige-se, naturalmente, que o estudo da hipótese de um determinado modelo seja feito a partir duma medida que seja suficiente para, com o sub-lote de que é limite, determinar completamente os parâmetros do modelo. Isto é, não podemos, por exemplo, testar o modelo de um estrato utilizando um sub-lote em que todas as medidas sejam apenas dependentes da resistividade superficial. Melhor dizendo, há todo o interesse em evitar essa e outras situações que, além do mais, colocam os algoritmos em zonas de instabilidade numérica.

A outra grande dificuldade é a do esforço computacional que representa a optimização de todos esses sob-lotes. Esse problema merece algumas considerações. A utilização do método de mínimos quadrados aplicado em bruto às curvas de resistividadesaparentes constitui uma abordagem muito mais robusta do que a feita, por exemplo, através da mesma metodologia aplicada ao Kernel. No entanto, é, também, computacionalmente mais pesada e só possível de implementar quando se dispõe de computadores com a velocidade e capacidade modernas. Até há bem pouco tempo uma das finalidades da ciência, e em particular da engenharia, era a de, a partir das grandes leis teóricas que regiam um determinado fenómeno, encontrar simplificações e conjecturas que as reduzissem, pelo menos em casos particulares, a fórmulas tratáveis com o máximo de economia de cálculo, ainda que com resultados menos perfeitos. Os computadores modernos libertam-nos, em parte, desse esforço. E, ho-

je, faz mesmo sentido estudar um método, desde que potencialmente prometedor, mesmo que ele seja impossível de implementar com as características das máquinas actuais, porque a velocidade, melhor, a aceleração, de melhoria dessas características é tal que, em pouco tempo, questão de alguns anos, a sua implementação passa a ser possível. Sossegue, entretanto, o leitor porque o método aqui apresentado não é, todavia, desses, e, como veremos, não só é implementável (e economicamente), como se compara de certo modo favoravelmente com outros, em particular com o de Inman. De facto, se a constatação da realidade que apresentámos nos permite com certo optimismo abordar problemas e métodos que até aqui infundiam algum temor, ela não nos dispensa de procurar conseguir sempre a maior economia de esforços, sem o que nos ocuparíamos todos, com toda a lógica, no desenvolvimento do grande computador capaz de resolver em detalhe as equações gerais do Universo, se é que as há!

A economia de esforço que pensamos conseguir baseia-se em várias alterações introduzidas. Em primeiro lugar, *num desenvolvimento em série para cálculo de potências e suas derivadas que se revela mais eficaz para cálculo simultâneo a diferentes distâncias interelectródicas* e na adaptação dum, provadamente eficiente, algoritmo de aceleração dessas séries específicas. No algoritmo de optimização, por outro lado, introduziu-se o *controlo automático do parâmetro de Marquardt* com o resultado de o tornar mais rápido e eficiente, ensaiando-se com sucesso, inclusivamente, o controlo directo a partir dos valores próprios da matriz do estimador, isso sem perder de vista a necessidade de o algoritmo convergir ultimamente com parâmetro nulo, garantindo o carácter quadrático final dessa convergência e o não enviesamento das estimativas. Naturalmente, os programas escritos não estarão, sob

o ponto de vista da linguagem utilizada, Fortran 5, inteiramente optimizados e deverão ser encarados, sobretudo, como uma ilustração dos algoritmos preconizados.

Mas a principal economia é obtida utilizando, não sub-lotes de p, p + 1, p + 2, etc. medidas, mas apenas, para cada medida de limite de sub-lote, de ordem p, p + 1, p + 2 , etc., *tantas medidas quantos os parâmetros do modelo*, retiradas do sub-lote respectivo.

Inman (1973) já tratou o problema do uso de tantas medidas quantos os parâmetros do modelo e opôs-lhe duas objecções de fundo. A propósito do ajuste dum modelo de dois estratos diz: "teoricamente apenas são precisos 5 pontos (de dados, 5 medidas) para univocamente determinar os 5 parâmetros. Os dados serão ajustados de forma perfeita uma vez que o sistema é criticamente constrangido. É importante notar que, se só 5 pontos forem utilizados, o ruído de cada ponto tem muito maior efeito no modelo do que se os 17 pontos (todos os do lote) forem utilizados". Esta afirmação de Inman é verdadeira, mas só ganha importância decisiva no contexto do método de Inman, que pressupõe uma única utilização do seu algoritmo de optimização. Logicamente, deve então utilizar toda a informação disponível residente em todas as medidas do lote. Ora nós propomo-nos fazer várias optimizações, também vamos utilizar toda a informação disponível, mas a eliminação ou controlo do erro é feita depois, quando obtidos os resultados de todas as optimizações. O erro deixa de ser importante porque a multiplicação das amostras e o conhecimento da sua distribuição permitem o seu *tratamento estatístico* (e também não especificamente estatístico como, breve e oportunamente, referiremos no fim do Capítulo IV).

Ainda na referida afirmação de Inman há uma parte que merece reflexão. É aí dito que os dados são então ajustados de forma perfeita. À parte problemas de condicionamento, isso é verdade, partindo do princípio, o que Inman fez, de que o terreno tem, de facto, a estrutura que o modelo supõe. Ora o nosso método pressupõe o ensaio de todos os modelos com menos estratos que o modelo real. Esperamos tornar aceitável, mais à frente (capítulo IV), a conjectura de que, pelo menos nas situações que nos interessam, *é sempre possível ajustar um modelo a tantas medidas quantas as necessárias para definir os seus parâmetros*, isto é, a tantas medidas quantos os parâmetros. Não há pois lugar a instabilidades numéricas, se a conjectura é verdadeira.

Mas Inman (1973) apresenta outra objecção. A partir do estudo das matrizes de densidade de informação e de resolução (matrizes, aliás, que se reduzem à matriz identidade se o número de medidas igualar o de parâmetros) ele havia conseguido definir as medidas do lote que fornecem mais informações sobre a estrutura do terreno. Mas esse conhecimento só era obtenível após conclusão da inversão. Previamente, só seriam demarcáveis os pontos mais informativos se a estrutura do terreno fosse a assumida pela hipótese inicial. Ora Inman constatou que, a menos que se conhecessem e utilizassem os pontos mais informativos sobre a estrutura real, em geral tantos quantos os parâmetros, a convergência com tantas medidas quaisquer quantos os parâmetros era mais lenta do que utilizando todas as medidas. A conclusão parece-nos correcta e de acordo com as nossas próprias experiências.

Esta objecção e a exigência de que haja estabilidade numérica, em particular a de que os parâmetros sejam visíveis por, pelo menos, uma medida, revelam que *o problema de escolha das medidas a utilizar nas optimizações é*

crucial. Acreditamos que a estratégia, que apresentaremos, de escolha de medidas resolve o problema de forma a garantir estabilidade numérica e rapidez de convergência. Um dos exemplos de Inman (1973), sobre o qual ele baseou, aliás, boa parte das conclusões a que chegou nesta matéria, foi também submetido ao nosso método. O leitor interessado pode verificar que as medidas ricas em informação, como Inman as determina, não têm distâncias interelectródicas muito afastadas das das medidas fixas que utilizamos. A nossa estratégia define as medidas fixas a partir das curvas de parâmetros anteriores e sabe portanto, antes da inversão, quais as medidas a adoptar.

2.5.2 Novos conceitos

O método que sucintamente descrevemos associa a cada medida (através do sub-lote de que é a última medida e do qual se extraem os dados para cada optimização, e para cada modelo em ensaio) um jogo de parâmetros, os parâmetros do modelo, que são aparentes, pois o terreno pode ou não ter a estrutura do modelo. Tudo se passa como se, dadas n medidas, se determinassem os n *parâmetros aparentes* dum terreno virtual de estrutura igual à do modelo em ensaio e que daria as mesmas medidas que o terreno real deu. Esta definição alarga a noção de resistividade aparente, resistividade que um terreno virtual homogéneo deverá ter para fornecer uma medida igual a outra dada pelo terreno real, a modelos mais complexos que o homogéneo.

Não faz, então, muito sentido manter como medida indirecta, obtida a partir da diferença de potencial efectivamente medida, a resistividade aparente. A resistividade aparente, agora rebaptizada de *resistividade aparente homogénea* ou *resistividade aparente de modelo homogéneo ou de zero estratos*, é apenas um dos parâmetros aparentes possíveis, como a resistividade

aparente superficial, a espessura aparente do estrato e a resistividade aparente do substrato, serão parâmetros aparentes ligados ao modelo de um estrato, por exemplo.

Então que medida indirecta considerar? O que nos parece mais "natural" é ser uma grandeza com dimensões de uma potência, pois a potência dissipada no terreno tem uma ligação íntima com a sua estrutura. É, de facto, conhecido que as correntes e tensões num meio excitado do exterior, através duma fonte de tensão ou corrente, se distribuem no meio de acordo com um princípio de acção mínima, o de minimizar a potência. É possível dar um significado ao produto $\Delta V.I$, produto da corrente injectada pela diferença de potencial directamente medida no terreno.

Ele é, na verdade, *a potência consumida no terreno entre as equipotenciais do campo que passam pelos eléctrodos de tensão* (ver Figura II-8 construída segundo Lasfargues, 1957, p. 61). E é esta potência, fácil de obter, $\Delta V.I$, que tomaremos como medida indirecta efectuada sobre o terreno.

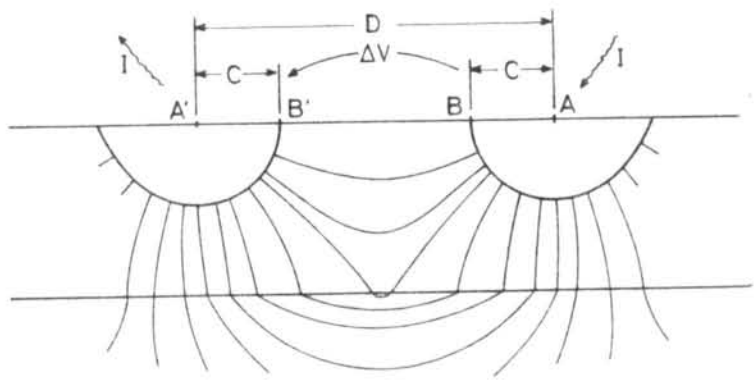


Figura II-8 - Corte vertical duma formação de um estrato mostrando linhas de fluxo da corrente entre os eléctrodos A e A'. Os eléctrodos de tensão estão colocados em B e B' e desenham-se as equipotenciais do campo. A condutividade do substrato é 50 vezes superior à do estrato. (segundo W. Weaver).

Os eléctrodos de corrente utilizados não são pontuais. A nossa melhor hipótese é, ou que tenham as dimensões exactas duma equipotencial, que perto de A é semi-esférica, ou que, não as tendo, sejam, no entanto, suficientemente pequenos para que o campo que criam não se afaste, a razoável distância de A, do campo teórico dedutível para eléctrodos pontuais.

Também a potência $\Delta V.I$ pode ser considerada como a potência dissipada entre dois eléctrodos, imaginados com as dimensões das equipotenciais que passam pelos eléctrodos reais de tensão, colocados à mesma diferença de potencial destas, ΔV, e injectando e recolhendo no terreno a mesma corrente, I, que os eléctrodos de corrente reais injectam e recolhem. A estes eléctrodos chamaremos *eléctrodos aparentes*.

À distância D chama-se distância entre eléctrodos de corrente. Poderíamos, coerentemente, chamar a D, distância entre eléctrodos reais, e a D-2C, distância entre eléctrodos aparentes. Preferimos no entanto utilizar C como parâmetro de configuração. Note-se que os eléctrodos aparentes, como os definimos, não têm forma geométrica simétrica nem definida. Ao longo do texto chamaremos a C, *semi-largura interna horizontal do eléctrodo aparente* ou apenas *semi-largura do eléctrodo aparente* ou ainda *semi-dimensão horizontal do eléctrodo*.

A diferença fundamental entre tomar potências ou resistividades aparentes como medidas indirectas reside em que aquelas dependem da corrente I e estas não. As resistividades aparentes são univocamente determinadas pela estrutura do terreno e, como vimos, podem até ser catalogadas numa colecção utilizada para comparação. Porém, essa vantagem não nos é útil aqui, pois o nosso método, como os de mínimos quadrados em geral, embora seja na sua essência ainda um método de comparação, vai gerando as curvas com que com-

para, em sucessivas iterações, a curva real das medidas. Ao contrário, e como veremos, o método é facilitado se as medidas forem todas da mesma ordem de grandeza, pois isso igualiza os erros absolutos que as afectam. Uma técnica de medição que, através da corrente I variável, permita esse resultado, equivalente no fundo a multiplicar as resistividades aparentes por uma matriz que as escala, é vantajosa. Aliás, sob esse aspecto, a potência tomada como medida é superior à simples diferença de potencial, pois envolve o quadrado de corrente, permitindo atingir esse objectivo com menor gama de variação de corrente. Outro atractivo da resistividade aparente como medida indirecta é (Orellana, 1972, p. 108) o seu carácter de anomalia, em tudo análogo ao que se encontra nos métodos de prospecção magnético e gravimétrico, isto é, o de desvio em relação à situação homogénea, considerada padrão. No entanto, este conceito é prático, sobretudo, quando se pensa em termos de cartografia, mais do que em sondagem eléctrica vertical.

A introdução destes conceitos novos é importante e abre perspectivas novas no tratamento do problema que ultrapassam as ambições e conclusões deste trabalho. Basta pensar na enorme variedade de estudos e de conclusões empíricas e até de "arte" de interpretação, obtidas a partir do conceito de resistividade aparente (homogénea), para ter uma ideia do que podem suscitar as noções de parâmetros aparentes do modelo de um estrato, por exemplo, fáceis de determinar como são.

2.6 Estrutura da dissertação

No Capítulo III será desenvolvido o algoritmo de optimização que pretende, dadas n medidas, determinar n parâmetros do modelo de 1/2 (n-1)

estratos que ajustem as potências medidas às calculadas, com esses parâmetros, a menos da precisão com que aquelas foram medidas, preferencialmente a menos de um décimo dessa precisão. Do algoritmo de optimização fazem, de certo modo, parte os desenvolvimentos em série que calculam potência e derivadas e a sua aceleração. Só se tratarão em todo o trabalho terrenos até ao máximo de dois estratos.

O Capítulo IV aborda e define a estratégia para o traçado de curvas de parâmetros aparentes, em tudo análogas às familiares curvas de resistividade aparente (homogénea). Todo o ênfase é, naturalmente, colocado na escolha das medidas utilizadas, de entre as que o lote fornece. Os critérios de escolha dessas medidas são ainda apoiados pela introdução do tratamento estatístico que, em situações dúbias, os pode fundamentar. A ferramenta estatística necessária à análise das curvas, que permite aceitar ou rejeitar hipóteses de modelos, é também desenvolvida, em ligação directa com essa análise.

Os programas concretos utilizados serão apresentados no Capítulo V e comentados. Um exemplo de um terreno será exaustivamente interpretado, mostrando as potencialidades do método e comparando-o com outros existentes de mínimos quadrados. Finalmente outros quatro exemplos, tentando cobrir, em casos difíceis, os quatro tipos fundamentais de terreno de dois estratos, serão resolvidos e comentados. Não reproduziremos aqui as análises estatísticas do capítulo anterior, de forma a aligeirar a exposição, sem perda de rigor, porque elas são, nos casos tratados, dispensáveis.

Para além do Capítulo I, que contém um sumário do trabalho, e do Capítulo VI, que relata as conclusões, juntamos 4 anexos ao corpo da dissertação: expressões das potências e derivadas, em todos os casos tratados; deter-

minação do erro com que são truncados certos desenvolvimentos em série; tratamento dos eléctrodos lineares; saída tipo de resultados do programa, numa situação tratada no corpo da tese.

Now, if a Muse cannot run when she is unfettered,

it is a sign she has but little speed

John Dryden, 1697

CAPÍTULO III

CÁLCULO DE POTÊNCIAS E DERIVADAS. OPTIMIZAÇÃO

3.1 Introdução

O problema que será resolvido neste capítulo é o de, admitida uma hipótese de estrutura de um terreno estratificado, de n estratos, encontrar os 2 n + 1 parâmetros estruturais, n + 1 resistividades e n profundidades, que essa hipótese implica, de modo a minimizar as diferenças entre as potências medidas no terreno e as calculadas com esses parâmetros, para 2 n + 1 distâncias interelectródicas. *As potências supõem-se todas medidas com a mesma precisão relativa* ; mais concretamente, admite-se que *os erros relativos seguem uma distribuição de média nula e variância igual para todas as medidas* . A determinação dos parâmetros estruturais é, assim, um problema de optimização não linear. *A função objectivo que se decidiu minimizar é a soma dos quadrados das diferenças entre as potências calculadas e as medidas*. Uma tal escolha, que corresponde a uma minimização em norma L_2 do vector diferença das potências calculadas para as medidas, conduz a uma estimativa dos parâmetros isenta de viés. Pretende-se garantir que os parâmetros determinados sejam tais que, para as 2 n + 1 distâncias interelectródicas consideradas, nenhuma potência, com eles calculada, difira da respectiva potência medida mais do que o erro absoluto desta, e prefere-se que tais diferenças não ultrapassem um décimo desse erro. Isso apontaria para uma *minimização em norma infinita*, L_∞. No entanto, como as potências, graças à possibilidade de injectar correntes diferentes criteriosamente escolhidas, são obrigadas a ter valores muito próximos para todas as distâncias, e como os resíduos ou diferenças esperados na solução são pequenos, um algoritmo projectado para minimização em norma euclidiana resulta, em termos gerais, aceitável. E tem a vantagem de recorrer a técnicas muito mais eficientes, económicas e, sobretudo, experimentadas. No entanto, algumas modifi-

cações serão introduzidas de forma a preencher os requisitos originais. Os problemas de cálculo de potência e suas derivadas e de optimização propriamente dita serão tratados em partes distintas.

3.2 Cálculo das potências e suas derivadas

3.2.1 Desenvolvimento em série da função nuclear

A potência consumida pelo terreno, entre dois eléctrodos aparentes de dimensão horizontal interna C, colocados a distância D, é dada, como vimos, por

$$P = \frac{r_1 I^2}{\pi} \cdot \left(\frac{1}{C} - \frac{1}{D-C}\right) + 2 \frac{r_1 I^2}{\pi} \int_0^\infty \theta(\lambda) \left(J_0(\lambda C) - J_0(\lambda(D-C))\right) d\lambda \quad (3.1)$$

onde r_1 é a resistividade superficial do terreno, I é a corrente injectada, J_0 é a função de Bessel de primeira espécie e $\theta(\lambda)$ é a função nuclear ("Kernel").

No caso do terreno ser constituído por um único estrato superficial de resistividade r_1 e por um substrato de resistividade r_2 a partir da profundidade h_1, a função nuclear reveste a forma

$$\theta_1(\lambda) = \frac{K_1 e^{-2\lambda h_1}}{1 - K_1 e^{-2\lambda h_1}} \quad (3.2)$$

onde

$$K_1 = \frac{r_2 - r_1}{r_2 + r_1}$$

é o coeficiente de reflexão entre os dois meios de resistividade r_1 e r_2.

No caso do terreno ser formado por dois estratos, o primeiro de resistividade r_1 até à profundidade h_1, o segundo de resistividade r_2 até à profundidade h_2, e por um substrato de resistividade r_3 a partir daí, a função nuclear pode ser escrita na forma

$$\theta_2(\lambda) = \frac{K_1 e^{-2\lambda h_1} + K_2 e^{-2\lambda h_2}}{1 + K_1 K_2 e^{-2\lambda(h_2-h_1)} - K_1 e^{-2\lambda h_1} - K_2 e^{-2\lambda h_2}} \qquad (3.3)$$

onde

$$K_2 = \frac{r_3 - r_2}{r_3 + r_2}$$

é o coeficiente de reflexão entre os dois meios de resistividade r_2 e r_3.

Os integrais de Stefanesco de 3.1 não são susceptíveis de integração analítica directa, mas o problema pode ser resolvido se a função nuclear for desenvolvida numa série de funções exponenciais em λ, pois (Sneddon, 1961, p. 125):

$$\int_0^\infty e^{-a\lambda} J_0(\lambda b)\, d\lambda = \frac{1}{\sqrt{a^2+b^2}} \qquad (3.4)$$

Van Dam (1965) propôs o seguinte desenvolvimento

$$\theta(\lambda) = \frac{P(\lambda)}{Q(\lambda)} = \frac{P(\lambda)}{1-(1-Q(\lambda))} = P(\lambda) \sum_{p=0}^{\infty} (1-Q(\lambda))^{p} \qquad (3.5)$$

onde é imediato verificar que os termos da série só contêm funções exponenciais, quando muito de expoente nulo.

Para garantir, no entanto, que

$$\int_0^{\infty} \theta(\lambda) \left(J_0(\lambda C) - J_0(\lambda(D-C))\right) d\lambda = \sum_{p=0}^{\infty} \int_0^{\infty} P(\lambda) (1-Q(\lambda))^{p}$$

$$(J_0(\lambda C) - J_0(\lambda(D-C)))\, d\lambda$$

é preciso garantir que a série convirja para todo o $\lambda \geq 0$, e então é uniformemente convergente para $\lambda \geq 0$.

Isto é, é preciso que seja

$$|1 - Q(\lambda)| < 1 \ , \quad \forall\, \lambda \geq 0.$$

Para o caso de um estrato, esta condição verifica-se, pois é $|K_1| < 1$, $h_1 > 0$ e

$$1 - Q_1(\lambda) = K_1 e^{-2\lambda h_1}$$

No caso de dois estratos, é

$$Q_2(\lambda) = 1 + K_1 K_2 e^{-2\lambda(h_2-h_1)} - K_1 e^{-2\lambda h_1} - K_2 e^{-2\lambda h_2}, \ \lambda \geq 0.$$

Van Dam apresentou num quadro os máximos e mínimos potenciais de $Q_2(\lambda)$, isto é, os extremos nas estruturas envolvendo profundidades mais susceptíveis de, justamente, extremar $Q_2(\lambda)$:

		$Q_2(\lambda)$	
K_1	K_2	máximo	mínimo
+	+	$1 + K_1 K_2$	$(1 - K_1)(1 - K_2)$
	-	1 ou $(1-K_1)(1-K_2)$	$1 - K_1$
-	+	$1 - K_1$	$1 + K_1 K_2$ ou $(1-K_1)(1-K_2)$
	-	$(1 - K_1)(1 - K_2)$	1

Quadro III-1 - Extremos potenciais de $Q_2(\lambda)$.

Se procurarmos agora os extremos de $Q_2(\lambda)$, para os mais desfavoráveis valores possíveis para K_1 e K_2, valores tendenciais -1, 0 ou 1, encontramos num novo quadro os valores limites dos extremos potenciais de $Q_2(\lambda)$. O quadro mostra também os valores limites dos extremos potenciais de $1 - Q_2(\lambda)$.

K_1	K_2	$Q_2(\lambda)$ máximo	$Q_2(\lambda)$ mínimo	$1 - Q_2(\lambda)$ máximo	$1 - Q_2(\lambda)$ mínimo
+	+	2	0	1	-1
	-	2	0	1	-1
-	+	2	0	1	-1
	-	4	1	0	-3

Quadro III-2 - Valores limites dos extremos potenciais de $Q_2(\lambda)$ e $1 - Q_2(\lambda)$

Constata-se, assim, que a condição de convergência da série para todo o λ positivo pode não ser verificada no caso de ser $K_1 < 0$ e $K_2 < 0$, isto é, no caso de resistividades decrescentes com a profundidade. No entanto, é suficiente para garantir a convergência, independentemente da profundidade envolvida, que

$$(1-K_1)\ (1 - K_2) < 2$$

ou, após algumas manipulações algébricas,

$$\frac{1}{3} < \frac{r_3}{r_1} + \frac{r_3}{r_2} + \frac{r_2}{r_1}$$

Propôs, então, Van Dam o desenvolvimento

$$\theta_2(\lambda) = \frac{\alpha P_2(\lambda)}{\alpha Q_2(\lambda)} = \frac{\alpha\ P_2(\lambda)}{1-\ (1-\alpha\ Q_2(\lambda))} = \alpha P_2(\lambda) \sum_{p=0}^{\infty} (1-\alpha\ Q_2(\lambda))^p \qquad (3.6)$$

e (Van Dam, 1967)

$$\alpha = \frac{2}{Q_2(\lambda)_{max} + Q_2(\lambda)_{min}} \qquad (3.7)$$

Na verdade, com este desenvolvimento e este valor de α, é sempre

$$|1 - \alpha Q_2(\lambda)| < 1 \ , \quad \forall\ \lambda \geq 0$$

pois

$$1 - \alpha Q_2(\lambda)_{min} = \frac{Q_2(\lambda)_{max} - Q_2(\lambda)_{min}}{Q_2(\lambda)_{max} + Q_2(\lambda)_{min}} = -\ (1 - \alpha Q_2(\lambda)_{max})$$

e a série é uniformemente convergente para todo o λ não nulo.

Apresentou Van Dam (1967) duas variantes, aliás bem distintas, do seu método, a que chamou primeira e segunda "denotações".

Na primeira variante simplesmente passou a desenvolver a função nuclear numa série de exponenciais

$$\theta(\lambda) = \sum_{d=1}^{\infty} K\ (d)\ e^{-2\lambda d}$$

cujos coeficientes se determinam pelo método dos coeficientes indeterminados.

Este desenvolvimento, que tem a vantagem de ser sempre uniformemente convergente, excepto para o caso de ser uma das resistividades realmente nula ou infinita, foi também explorado por Mooney, Orellana et al. (1966). Outra sua vantagem, e não pequena, é a possibilidade de determinação de um majorante aceitável para o erro resultante da truncatura da série, ao fim dum número finito de termos.

A segunda "denotação" de Van Dam mantém a filosofia inicial e foi, pela primeira vez, implementada em programa por Argelo (1967).

O nosso método segue, também, essa filosofia. Van Dam (1965) mostrou a grande vantagem deste procedimento ao separar completamente as profundidades, que surgem nos expoentes das exponenciais, das constantes de reflexão, que surgem nos factores. Métodos anteriores, a maior parte dos quais baseada na teoria dos polos eléctricos, ou não o conseguiam, ou eram pouco precisos, ou muito lentos. Mooney, Orellana et al. (1966) salientaram a possibilidade de implementar a primeira "denotação" separando os parâmetros ligados à estrutura do terreno, K_i e h_i, dos parâmetros ligados à configuração electródica utilizada, entre os quais as distâncias interelectródicas.Essa possibilidade é aqui retida. Mas vai-se mais longe: na implementação agora desenvolvida, com pequeno esforço computacional suplementar, *são simultaneamente calculadas as derivadas das potências em ordem aos parâmetros estruturais* (resistividades e profundidades). E isso é, no nosso caso, uma inestimável vantagem.

Argelo relatou, no seu trabalho, algumas dificuldades com a implementação da segunda "denotação" de Van Dam, em particular a perda de precisão quando o número de termos da série somados aumenta para além de um certo valor óptimo. Ele próprio atribui isso a possíveis problemas numéricos. De facto, a nossa implementação foi feita em dupla precisão com cerca de 29 algarismos significativos, mas experiências feitas em precisão simples, que nos abstemos de relatar aqui em pormenor, parecem justificar algum cuidado. No entanto, ou porque a implementação é diferente, ou porque se calculam potências e não resistividades aparentes, ou porque a precisão utilizada é muito superior, o certo é que não se encontraram as dificuldades receadas. Encontraram-se, naturalmente, outras que, oportunamente serão referidas. Mas para distâncias interelectródicas sensatas, os nossos resultados coincidiram, a menos das tolerâncias estipuladas, e traduzidas resistividades aparentes em potências, com os de outros autores, em particular com os de Orellana e Mooney.

Para além da implementação e da construção do algoritmo respectivo, outra diferença importante nos separa de Van Dam e Argelo. Estes autores utilizam sempre o desenvolvimento 3.6 com α dado por 3.7, mesmo que o desenvolvimento 3.5 seja possível. Ora, para além de o desenvolvimento 3.6 ser muito mais pesado computacionalmente, ele nem sempre é o mais conveniente. Nem sequer, na hipótese de ser necessário recorrer a ele, é pacífico escolher α de acordo com 3.7. Na realidade, tal α garante a convergência uniforme para todo o $\lambda \geq 0$, mas não assegura a mais rápida convergência da série numérica que resulta da integração, termo a termo, do desenvolvimento multiplicado pelas funções de Bessel. Várias experiências de cálculo do desenvolvimento com diferentes valores de λ, e que também não detalhamos aqui, comprovam-no. A de-

terminação do valor óptimo para α, o que, eventualmente, podia conduzir ao abandono de 3.5, constitui um problema em aberto, ao que sabemos.

O trabalho presente só englobou a consideração de terrenos até dois estratos. No entanto, neste aspecto, o alargamento a terrenos de mais estratos não oferece dificuldades teóricas, uma vez que é possível estabelecer uma forma simples de recorrência permitindo calcular a função nuclear para uma estrutura com qualquer número de estratos (Flathe, 1955).

3.2.2 Cálculo das derivadas

Como veremos, o nosso algoritmo de optimização exige o cálculo, não só das potências, como das derivadas destas em ordem aos parâmetros estruturais. A expressão 3.1 mostra que, à parte r_1, todos os eventuais parâmetros h_1, r_2, h_2, r_3 só surgem na função nuclear $\theta(\lambda)$. Assim, excepto as derivadas em ordem a r_1, todas as derivadas das potências em ordem a esses parâmetros são expressões do mesmo tipo de 3.1, apenas com o termo integral, e com $\theta(\lambda)$ substituída pela derivada de $\theta(\lambda)$ em relação aos mesmos parâmetros. As derivadas em r_1 terão mais uma parcela, P/r_1.

A análise pode ainda ser levada mais longe. Tomemos um dos desenvolvimento de $\theta(\lambda)$, sendo a escolha irrelevante para as conclusões. Suponhamos que calculávamos a derivada de $\theta(\lambda)$ em ordem a um parâmetro genérico x. Sabemos que, tomando, a título de exemplo, o desenvolvimento 3.5:

$$\theta(\lambda) = \sum_{p=0}^{\infty} P(\lambda) \, (1 - Q(\lambda))^p$$

onde $P(\lambda)$ e $Q(\lambda)$ são funçõesde λ e dos parâmetros estruturais (e, eventualmente terão de ser multiplicados por α se o desenvolvimento for 3.6). Então

$$\frac{\partial\,\theta(\lambda)}{\partial x} = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{\partial\,P(\lambda)}{\partial x}\,(1 - Q(\lambda))^{P} - \sum_{p=0}^{\infty} p\,P(\lambda)\,(1 - Q(\lambda))^{p-1}\,\frac{\partial\,Q(\lambda)}{\partial x}$$

As séries, assim obtidas, são convergentes, porque a série que derivámos termo a termo era uniformemente convergente.

A segunda série tem o termo inicial, para p=0, nulo e, reformulando o índice de termos, pode-se escrever:

$$\frac{\partial\,\theta(\lambda)}{\partial x} = \sum_{p=0}^{\infty} \left[\frac{\partial\,P(\lambda)}{\partial x} - (p+1)\,P(\lambda)\,\frac{\partial\,Q(\lambda)}{\partial x}\right](1 - Q(\lambda))^{P}$$

Assim as potências e as derivadas têm uma mesma estrutura:

$$f(C,D,I) + g(I) \sum_{p=0}^{\infty} \int_{0}^{\infty} \phi(p,\lambda)\,(1 - Q(\lambda))^{P}\,(J_0(\lambda C) - J_0(\lambda(D-C)))\,d\lambda \qquad (3.8)$$

onde f, g, ϕ e Q são também funções dos parâmetros estruturais e, eventualmente, $f \equiv 0$.

A função $\phi(p,\lambda)$,é constituída por uma soma de exponenciais, com expoentes apenas dependentes das profundidades e com factores multiplicativos dependentes dos coeficientes de reflexão das resistividades e, quando muito, de primeira ordem em p e λ. As exponenciais com factores de primeira ordem em λ surgem nas derivadas em relação às profundidades e dão origem a

integrais do tipo

$$\int_0^{\infty} \lambda\, e^{-a\lambda}\, J_0(\lambda b)\, d\lambda = \frac{b}{\sqrt{(a^2+b^2)^3}} \qquad \text{(Sneddon, 1961, p.125)} \qquad (3.9)$$

As expressões completas das potências e derivadas são dadas em apêndice.

O cálculo das derivadas em estruturas de maior número de estratos não apresenta dificuldades particulares, embora se torne laborioso. Inman, Ryu et al. (1973) utilizaram, para o cálculo das derivadas, com um número qualquer de estratos envolvidos, fórmulas de recorrência análogas às encontradas por Flathe para o cálculo das potências.

3.2.3 Esquema de cálculo

A estrutura 3.8 permite, dado um terreno com parâmetros r_1, h_1, r_2, h_2, r_3, um processo de cálculo que abrange, simultaneamente, todas as potências e derivadas, para um qualquer número de distâncias interelectródicas, correntes injectadas e dimensões horizontais dos eléctrodos aparentes. Naturalmente o processo é mais simples no caso de só existir um estrato.

As parcelas f(C, D, I) são calculadas inicialmente para todas as distâncias, por conveniência nossa. Os factores g(I) têm todos uma estrutura

$$g(I) = h\, I^2$$

onde h é apenas função dos parâmetros estruturais.

Para calcular o termo integral começamos, então, por calcular todos os factores h. Para cada valor de p calculamos os factores e os expoentes das exponenciais do desenvolvimento de $(1 - Q(\lambda))^p$, *pois são comuns a todas as distâncias e a todo o tipo de derivada ou potência que vamos calcular.* Este cálculo é efectuado a partir dos termos anteriores do desenvolvimento para p-1. Para cada tipo de derivada ou potência, fazemos, então, o produto desse desenvolvimento por $\phi(p,\lambda)$ e calculamos expoentes e factores, *cálculo que é comum a todas as distâncias.* Depois, para cada distância, usando os factores e os expoentes obtidos, vamos resolvendo e somando todos os integrais do tipo 3.4 ou 3.9. Finalmente, multiplicamos pelos factores g e podemos prosseguir com as parcelas p+1, se necessário.

A implementação em programa, como veremos, permite ainda maior economia de cálculo, em particular no caso do terreno ter apenas um estrato.

No caso de se pretender abordar terrenos com maior número de estratos, é possível que o processo se torne bastante pesado. Uma solução é calcular as derivadas por um método de diferenças finitas, embora isso acarrete consideráveis alterações no algoritmo de optimização utilizado. Mas mais radical é utilizar um algoritmo de optimização que prescinda do cálculo das derivadas e mantenha a precisão obtida nos resultados, um método quase-Newton, por exemplo. Voltaremos ao assunto.

3.2.4 Precisão do cálculo

Como já foi escrito, o cálculo dos termos da série é feito em dupla precisão. Não consideraremos erros resultantes da aritmética finita do com-

putador mas tão só o erro de truncatura da série numérica que vamos criando, de acordo com o processo de cálculo exposto na secção anterior, e que interrompemos a um certo valor de p.

O resto do desenvolvimento

$$\sum_{p=0}^{\infty} (1 - Q(\lambda))^p$$

truncado no termo de ordem n, é dado por

$$\frac{(1 - Q(\lambda))^{n+1}}{1 - (1 - Q(\lambda))}$$

Atendendo a que as séries das derivadas são formadas pelas derivadas, termo a termo, da série da potência, e à reformulação de índice efectuada, é fácil concluir que os nossos desenvolvimentos do tipo

$$\sum_{p=0}^{\infty} \phi(p,\lambda) \quad (1 - Q(\lambda))^p$$

têm erro de truncatura

$$R_n \ (n,\lambda) = \psi(n,\lambda) \ \frac{(1 - Q(\lambda))^{n+1}}{1 - (1 - Q(\lambda))}$$

com $\psi(n,\lambda)$ de primeira ordem em n (o leitor não terá dificuldade em definir ψ).

Como as séries são uniformemente convergentes no intervalo de integração, o erro da série numérica resultante (ver 3.8) vem majorado por

$$\left| g\ (I)\ \int_0^{\infty} R_n(n,\lambda)\ (J_0\ (\lambda C) - J_0\ (\lambda(D-C)))\ d\lambda \right| \leq$$

$$\leq |g\ (I)\ | \int_0^{\infty} \left| R_n(n,\lambda)\ (J_0\ (\lambda C) - J_0\ (\lambda(D-C))) \right| d\lambda$$

Foi talvez Gomes Teixeira (1888), embora noutro contexto, com intervalos de integração finitos, o primeiro a salientar que um majorante do erro podia ser obtido, a partir do majorante da expressão anterior, passando para fora do integral um majorante do módulo de qualquer das funções factores da integranda, embora este resultado seja uma consequência directa do teorema do valor médio do cálculo integral.

Ainda que o nosso estudo não tivesse sido exaustivo, não foi, infelizmente, por esta via, possível encontrar um majorante razoável, isto é, de cálculo simples e relativamente vizinho do valor real do erro, pelo menos para uma gama suficientemente larga de séries.

De facto, a solução mais simples é a de tentar um majorante do tipo

$$|g\ (I)\ | . \underset{(\lambda)}{maj} |\ R_n\ (n,\lambda)| \int_0^{\infty} \left| J_0\ (\lambda C) - J_0\ (\lambda(D-C)) \right| d\lambda$$

Infelizmente, a função $Q(\lambda)$ apresenta frequentemente um valor mínimo muito próximo de zero, o que proporciona majorantes demasiado altos.

A estrutura da série é, muitas vezes, um elemento simplificador no processo de determinação de um majorante do erro de truncatura. As séries alternadas, por exemplo, dão um erro de truncatura inferior, em módulo, ao módulo do primeiro termo desprezado. Infelizmente também, as séries, no caso pre-

sente, não têm todas a mesma estrutura.

Uma outra possibilidade é definir uma função $\theta(x,\lambda)$ tal que (Dahlquist e Björck, 1974, p. 63)

$$\left|\phi(p,\lambda)\ (1 - Q(\lambda))^p\ (J_0\ (\lambda C) - J_0\ (\lambda(D-C)))\right| \leq \theta(p,\lambda)$$

para todo o $p \geq n$ e tal que θ seja então decrescente, e tomar para majorante

$$|g\ (I)\ | \int_n^\infty \int_0^\infty \theta(x,\lambda)\ d\lambda\ \ dx$$

Há variantes ainda mais refinadas deste método de definição de majorantes. Uma solução deste tipo encontrou-se com facilidade para as séries correspondentes a terrenos de um estrato e produziu resultados muito satisfatórios. Mas, no caso de séries correspondentes ao terreno de dois estratos, não parece fácil estabelecer uma solução igualmente eficiente. Em apêndice, transcrevemos os resultados obtidos para o caso de um estrato.

Um método parente, de certo modo, deste último foi testado com algum sucesso, embora não venha implementado na versão final do algoritmo de cálculo. Em linhas gerais, o processo consiste em tentar definir uma curva aproximativa do andamento da série, a partir dos módulos dos seus últimos termos, e integrar essa curva do último termo em diante, obtendo assim um majorante do erro. Curvas de tipo diferente podem ser comparadas verificando o ajuste aos termos da série imediatamente anteriores aos usados na determinação dos parâmetros da curva.

Para grande número de casos, bons resultados foram obtidos com curvas do tipo

$$y = \alpha\, e^{-\beta x^{1/\gamma}} \quad , \text{ com } \gamma \text{ inteiro}$$

Um majorante do erro após n termos é então

$$\alpha \int_n^{\infty} e^{-\beta x^{1/\gamma}}\, dx$$

ou, após a mudança de variáveis $z = \beta x^{1/\gamma}$,

$$\frac{\alpha\gamma}{\beta^{\gamma}} \int_{\beta n^{1/\gamma}}^{\infty} e^{-z}\, z^{\gamma-1}\, dz = \frac{\alpha\gamma}{\beta^{\gamma}}\, \Gamma(\gamma, \beta\, n^{1/\gamma})$$

onde $\Gamma(A, B)$ é a função gama incompleta que, para A inteiro e positivo, vale

$$\Gamma(A,B) = (A-1)!\; e^{-B} \sum_{m=0}^{A-1} \frac{B^m}{m!} \quad \text{(Erdélyi et al., 1953, v.II, p.136)}$$

Para determinar os 3 parâmetros, α, β e γ, necessitamos dos 3 últimos termos calculados da série, S_{n-2}, S_{n-1}, S_n. O cálculo dos parâmetros resulta mais fácil se se proceder a uma mudança de variáveis, deslocando a origem da variável independente de forma a que x=0 coincida com n-2. Naturalmente, como o leitor constatará, no cálculo do majorante do erro é, então, preciso substituir o limite inferior do integral, n, por 2. Os parâmetros vêm então dados por

$$\left\{\begin{array}{l} |S_{n-2}| = \alpha \\ |S_{n-1}| = \alpha\, e^{-\beta} \\ |S_n| = \alpha\, e^{-\beta 2^{1/\gamma}} \end{array}\right\} \Longrightarrow \left\{\begin{array}{l} \alpha = |S_{n-2}| \\ \beta = -\ln \dfrac{|S_{n-1}|}{\alpha} \\ \gamma = \dfrac{\ln 2}{\ln\left(-\dfrac{1}{\beta}\ln\dfrac{|S_n|}{\alpha}\right)} \end{array}\right\}$$

com $|S_n|<|S_{n-1}|<|S_{n-2}|$, logicamente.

Se quisermos comparar com curvas do tipo, por exemplo,

$$y = \alpha\, x^{\gamma}\, e^{-\beta x}$$

é útil verificar o comportamento da curva e compará-lo com o da anterior para o ajuste doutros termos como S_{n-4} e S_{n-3}.

Na versão final do programa foi introduzido um algoritmo de aceleração de convergência de séries que tem incorporado um teste de paragem, julgamos que largamente testado, que provou dar excelentes resultados com as séries que nos interessam. No entanto, como veremos, nalgumas situações pontuais o algoritmo não pode ser aplicado. Utilizamos, então, como critério de paragem, o ser o termo calculado dividido pela soma parcial da série, em módulo, inferior a 1% da precisão desejada para o cálculo da série. Estamos, todavia, conscientes de que, se o critério é demasiado exigente numas situações, por exemplo a das séries alternadas, ele é muito falível noutras (Dahlquist e Björck, 1974, p. 35-36). Aqui, porém, mostrou-se aplicável em todos

os casos testados.

3.2.5 Aceleração da convergência das séries

Algumas das séries que temos vindo a tratar são de convergência extremamente lenta. Brezinski (1978, p. 175-176) relatou bons resultados com a aplicação do algoritmo ε de aceleração de convergência a estas séries, com o número de termos calculados reduzido, em média, a 1/4 do valor inicial. Aquele autor não pôde, infelizmente, fornecer mais dados sobre esses trabalhos.

O algoritmo ε é uma generalização, devida a Shanks (1955) mas apresentada na forma mais operacional por Wynn (1956), do conhecido procedimento Δ^2 de Aitken e ligada intimamente aos aproximantes de Padé.

Suponhamos obtidas as somas parciais de uma série C_n, $n = 0, 1, \ldots$, e armazenemo-las em $\varepsilon_0^{(n)}$, $n = 0, 1, \ldots$. Façamos

$$\varepsilon_{-1}^{(n)} = 0 \ , \quad n = 0, 1, \ldots \ .$$

O algoritmo consiste em definir recursivamente

$$\varepsilon_{K+1}^{(n)} = \varepsilon_{K-1}^{(n+1)} + \frac{1}{\varepsilon_K^{(n+1)} - \varepsilon_K^{(n)}} \qquad n, K = 0, 1, \ldots \qquad (3.10)$$

$\varepsilon_{-1}^{(0)} = 0$				
	$\varepsilon_{0}^{(0)} = C_0$			
$\varepsilon_{-1}^{(1)} = 0$		$\varepsilon_{1}^{(0)}$		
	$\varepsilon_{0}^{(1)} = C_1$		$\varepsilon_{2}^{(0)}$	
$\varepsilon_{-1}^{(2)} = 0$		$\varepsilon_{1}^{(1)}$		$\varepsilon_{3}^{(0)}$
	$\varepsilon_{0}^{(2)} = C_2$		$\varepsilon_{2}^{(1)}$	
$\varepsilon_{-1}^{(3)} = 0$		$\varepsilon_{1}^{(2)}$		
	$\varepsilon_{0}^{(3)} = C_3$			
$\varepsilon_{-1}^{(4)} = 0$				

Quadro III-3 - Algoritmo epsilon após utilização de 4 somas parciais

As quantidades de índice inferior ímpar são apenas resultado de cálculos intermédios. Mas as quantidades de índice inferior par formam sucessões susceptíveis de convergir para o valor da série, e muito mais rapidamente que a sucessão das somas parciais, C_n, $n = 0, 1, \ldots$.

Isso acontece, por exemplo, com a sucessão $\varepsilon_{2K}^{(n)}$, n = 0, 1, ..., isto é, a sucessão constituída por uma coluna par do algoritmo, além de outras. E, na maior parte das séries que o algoritmo é susceptível de acelerar, a quantidade mais próxima do valor da série é o valor extremo de índice inferior par da diagonal ascendente correspondente à última soma parcial obtida, C_n. O leitor poderá verificar, a partir de 3.10, que, como mostra o Quadro III-3, com a última soma parcial obtida (e com as anteriores, naturalmente) apenas se conseguem calcular os elementos da respectiva diagonal ascendente ou os elementos acima dela, mas nenhum abaixo.

O algoritmo utilizado é, basicamente, um algoritmo desenvolvido por Brezinski (1978, p. 338-340) que calcula, economicamente, dadas as somas C_n, n = 0, 1, ..., p, a diagonal ascendente $\varepsilon_K^{(p-K)}$, K = 0, ...p, e, se atingido, entretanto, o número de colunas m fixado pelo utilizador, segue calculando as diagonais ascendentes truncadas até à última coluna m. Isto é, se p>m, os elementos da diagonal ascendente calculados serão $\varepsilon_K^{(p-K)}$, K = 0, ..., m.

Para valor da série toma, logicamente, $\varepsilon_p^{(0)}$ ou, no caso de p>m, $\varepsilon_m^{(p-m)}$.

O critério de paragem utilizado é o de suspender o cálculo das somas parciais da série quando os dois últimos termos da sucessão da última diagonal ascendente calculada diferirem, em termos relativos, menos do que a precisão pretendida para o valor da série, p_r. Por outras palavras, quando

$$|1 - \varepsilon_{p-2}^{(2)} / \varepsilon_p^{(0)}| < p_r \quad \text{se p par}$$

ou

$$|1 - \varepsilon_{p-3}^{(3)} / \varepsilon_{p-1}^{(1)}| < p_r \qquad \text{se p ímpar}$$

No caso de se ter atingido a última coluna, m, o critério é o mesmo. Pára-se na soma parcial C_p quando for

$$|1 - \varepsilon_{m-2}^{(p-m+2)} / \varepsilon_{m}^{(p-m)}| < p_r$$

Este critério provou ser adequado aos casos que tratámos.

O algoritmo epsilon pode apresentar algumas dificuldades quando dois elementos seguidos duma mesma coluna são muito próximos, pois vêm subtraídos na relação de recorrência 3.10. Brezinski aponta para o aparecimento de erros de "cancelamento" quando a sua diferença for menor que $10^{-NS/3}$ onde NS é o número de algarismos significativos da aritmética do computador. A dificuldade pode ser vencida pela utilização de procedimentos de cálculo que evitam aquela subtracção. Há basicamente dois métodos devidos a Wynn e a Cordellier (Brezinski, p. 317-318), ditos regras particulares. Mas esses métodos só são aplicáveis se esses casos de possibilidade de ocorrência de erros de "cancelamento" (essas singularidades) forem isolados no processo de cálculo. Se assim não for, o algoritmo torna-se completamente instável. Uma observação do comportamento das nossas séries permitiu constatar que, normalmente, a aparecerem singularidades, elas afectam quase toda a coluna onde primeiro se geram, de modo que pouca utilidade tem a implantação das regras particulares. A alternativa é, ou desistir, nesse caso, da aplicação do algoritmo, ou continuá-lo com o cálculo dos elementos da última

coluna sem singularidades, isto é, encontrada uma singularidade, prosseguir o cálculo abandonando a coluna e continuando pela coluna par anterior à singularidade, como se fosse esse o número máximo de colunas fixado, *o que pode ser feito economicamente e com poucas alterações ao algoritmo inicial*.

Há, no entanto, alguns casos em que o algoritmo traz alguns problemas, embora raros e fora da zona prática de utilização. Ocorrem estes problemas para muito grandes distâncias interelectródicas e resistividades muito contrastantes, com séries muito lentamente oscilantes e que o algoritmo confunde com séries monótonas. Infelizmente, são precisamente estas situações, entre outras, as que mais necessitariam do algoritmo. O número de termos da série a calcular torna-se excessivo sem algoritmo, com possibilidade de acumulação de erros numéricos. Aqui reside a principal dificuldade encontrada com o nosso desenvolvimento em série.

Esses casos excepcionais, todavia, não nos afectam grandemente, pois correspondem, de facto, a situações de pouco interesse prático. Se, todavia, há necessidade de as considerar, é bom colocar no programa testes de diferenças finitas, por exemplo, para, pelo menos, o cálculo das derivadas, bem como a definição dum limite máximo de termos de série a calcular e, eventualmente, um indicador de acumulação de erros numéricos incontroláveis.

Uma outra questão, ainda que não tivesse sido explorada neste trabalho, merece rápida referência. Wynn, Markow e, em particular, Montessus de Ballore (Brezinski, p.174) estudaram a possibilidade de o algoritmo epsilon construído para acelerar a convergência duma série, desenvolvimento duma função, convergir para o valor da função, mesmo quando a série não for, ela

própria, convergente. Para uma série de potências, essa possibilidade tem a ver com o número e colocação dos polos da função. Constitui um problema em aberto saber se tal possibilidade de prolongamento analítico não tornaria evitável garantir a convergência uniforme do desenvolvimento da função nuclear, dispensando a utilização de 3.6.

3.3 Optimização

3.3.1 Método de optimização utilizado

Sejam:

$$\overline{P}_m = [P_{m_1}, P_{m_2}, P_{m_3}, \ldots, P_{m_n}]^T$$

o vector das potências medidas no terreno para as distâncias interelectródicas consideradas;

$$\overline{v} = [v_1, v_2, \ldots, v_n]^T$$

o vector dos parâmetros estruturais;

$$\overline{P} = \overline{P}(\overline{v}) = [P_1, P_2, \ldots, P_n]^T$$

o vector das potências calculadas com os parâmetros estruturais;

$$\overline{f} = \overline{f}(\overline{v}) = \overline{P}_m - \overline{P} = [f_1, f_2, \ldots, f_n]^T$$

o vector dos resíduos ou diferenças entre as potências calculadas e medidas. A função objectivo que se quer, então, minimizar é

$$F = F(\bar{v}) = \frac{1}{2}\ \bar{f}^T\ \bar{f} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(P_{m_i} - P_i)^2 = \frac{1}{2}\|\bar{P}_m - \bar{P}\|_2$$

onde o factor $\frac{1}{2}$ é introduzido para simplificar futuras relações.

Como se depreende da observação de 3.1, a função objectivo é não linear mas continuamente derivável nos parâmetros. O método que iremos aplicar será um método iterativo que parte duma hipótese inicial para o valor dos parâmetros.

Seja $\bar{v}_0$ essa hipótese inicial.

É:

$$\bar{g} = \bar{g}(\bar{v}) = \left[\frac{\partial F}{\partial v_i}\right]^T \qquad (i=1,\ldots,n)$$

o vector gradiente da função objectivo e, em particular, $\bar{g}_0$ o gradiente quando $\bar{v} = \bar{v}_0$;

$$H = H(\bar{v}) = \left[\frac{\partial^2 F}{\partial v_i\ \partial v_j}\right] \qquad \begin{matrix}(i=1,\ldots,n)\\(j=1,\ldots,n)\end{matrix}$$

a matriz hesseana da função objectivo e, em particular, H_0 a hesseana quando $\bar{v} = \bar{v}_0$.

CEEUP
(I.N.I.C.)
PORTO
BIBLIOTECA

A função objectivo é susceptível de desenvolvimento em série de Taylor em torno da hipótese inicial F $(\overline{v}_0)$, correspondente aos parâmetros iniciais:

$$F(\overline{v}) = F(\overline{v}_0 + \Delta\overline{v}) = F(\overline{v}_0) + \overline{g}_0^T \Delta\overline{v} + \frac{1}{2} \Delta\overline{v}^T H_0 \Delta\overline{v} + \ldots$$

Aceite-se, como hipótese, que a função é suficientemente representável pelos 3 primeiros termos da série de Taylor acima escritos, o que equivale a definir um modelo quadrático para a função.

O mínimo de F $(\overline{v})$ corresponde então ao mínimo de

$$\phi(\Delta\overline{v}) = \overline{g}_0^T \Delta\overline{v} + \frac{1}{2} \Delta\overline{v}^T H_0 \Delta\overline{v}$$

A condição necessária e suficiente para a existência de um mínimo $\phi(\Delta\overline{v}^*)$ é:

$$\overline{g}_0 + H_0 \Delta\overline{v}^* = 0 \qquad (3.11)$$

com H_0 definida positiva, isto é, com todos os valores próprios de H_0 estritamente positivos, ou, doutro modo, com H_0 tal que

$$\overline{x}^T H_0 \overline{x} > 0, \quad \forall \overline{x} \neq \overline{0}$$

Naturalmente que, se a função objectivo fosse realmente quadrática, o mínimo $(\Delta\overline{v}^*)$ seria imediatamente obtido por resolução do sistema 3.11 e, a partir daí, determinar-se-ia o mínimo da função objectivo $F(\overline{v}^*)=F(\overline{v}_0+\Delta\overline{v}^*)$.

Sabe-se também que, a existir um mínimo da função objectivo F $(\overline{v}^*)$, nesse ponto a hesseana é definida positiva, bem como numa sua vizinhança, e, mais, a função tende a ter um comportamento quadrático, isto é, os termos de 3.ª ordem em diante, na série de Taylor, são desprezáveis.

Há, por conseguinte, a garantia de que, se se conseguir uma hipótese inicial $\overline{v}_0$ suficientemente próximo de $\overline{v}^*$ ou, alternativamente, se se encontrar um método de a atingir, a partir duma hipótese inicial outra, cai-se, ultimamente, numa vizinhança de $\overline{v}^*$ onde a hesseana é definida positiva e onde a função objectivo é, melhor ou pior, representável pelo seu modelo quadrático.

Nessa vizinhança, o mínimo F $(\overline{v}^*)$ pode ser atingido resolvendo, iterativamente, o sistema 3.11, utilizando a solução de cada iteração para definir a hipótese inicial para a iteração seguinte. Isto é, se $\overline{v}_K$ tiver sido a solução da iteração de ordem K, obtém-se $\overline{v}_{K+1} = \overline{v}_K + \Delta\overline{v}_{K+1}$ resolvendo

$$\Delta\overline{v}_{K+1} = - H_K^{-1} \ \overline{g}_K \qquad (3.12)$$

onde H_K e $\overline{g}_K$ são, respectivamente, a hesseana e o gradiente em F $(\overline{v}_K)$, valor da função objectivo para $\overline{v} = \overline{v}_K$.

A importância do método, resultante da sua aplicabilidade, pelo menos, numa vizinhança do mínimo, reside em que, a partir daí, a convergência é quadrática, isto é

$$0 < \lim_{K \to \infty} \frac{|\overline{v}_{K+1} - \overline{v}^*|}{|\overline{v}_K - \overline{v}^*|^p} < \infty \qquad \text{com } p = 2$$

F.E. PORTO

O erro, ou a distância a que $\bar{v}_{K+1}$ se encontra de $\bar{v}^*$, é proporcional ao quadrado do erro na iteração anterior, o que se traduz numa convergência rápida, em comparação, por exemplo, com o caso de p=1, quando a convergência é linear e pode ser muito lenta.

Resta saber como atingir essa vizinhança do mínimo a partir duma hipótese inicial $\bar{v}_0$, onde a hesseana pode não ser definida positiva e onde, portanto, o modelo quadrático pode não ser apropriado. Seguramente que, se definirmos um método iterativo tal que o valor da função objectivo diminua em cada iteração, estamos a aproximar-nos dum mínimo, se ele existir. Interessa-nos que esse método se venha a reduzir, oportunamente, ao definido por 3.12, de forma a permitir convergência quadrática, tão logo se esteja numa vizinhança suficiente desse mínimo.

A primeira coisa que é importante garantir é que a direcção definida pela iteração seja uma direcção de descida local da função objectivo. Ora isso consegue-se com uma iteração do tipo

$$\Delta\bar{v}_{K+1} = - A_K^{-1} \bar{g}_K \qquad (3.13)$$

desde que A_K seja uma matriz definida positiva.

Na verdade, de 3.13, resulta

$$\bar{g}_K^T \Delta\bar{v}_{K+1} = - \bar{g}_K^T A_K^{-1} \bar{g}_K$$

e, se A_K (e portanto A_K^{-1}) for definida positiva, é

$$\bar{g}_K^T \; \Delta\bar{v}_{K+1} < 0 \; ,$$

isto é, a projecção da direcção $\Delta\bar{v}_{K+1}$ sobre o gradiente da função objectivo é negativa, logo $\Delta\bar{v}_{K+1}$ é uma direcção de diminuição local da função objectivo.

Estudemos a estrutura da hesseana da função objectivo tal como a definimos. Seja

$$J = J\,(\bar{v}) = \left[\frac{\partial f_i}{\partial v_j}\right]_{\substack{(i=1,\ldots,n)\\(j=1,\ldots,n)}} = -\left[\frac{\partial P_i}{\partial v_j}\right]_{\substack{(i=1,\ldots,n)\\(j=1,\ldots,n)}}$$

a matriz jacobiana de $\bar{f}\,(\bar{v})$ e, em particular, J_K o seu valor para $\bar{v} = \bar{v}_K$. O número de parâmetros iguala o número de medidas e, portanto, o jacobiano é, no caso presente, quadrado.

Seja ainda

$$G_i = G_i\,(\bar{v}) = \left[\frac{\partial^2 f_i}{\partial v_j \; \partial v_\ell}\right]_{\substack{(j=1,\ldots,n)\\(\ell=1,\ldots,n)}}$$

a matriz hesseana de $f_i\,(\bar{v})$ e, em particular, G_{i_K} o seu valor para $\bar{v} = \bar{v}_K$

Então, mostra-se com facilidade que

$$H_K = J_K^T \; J_K + \sum_{i=1}^{n} f_{i_K} \; G_{i_K} \qquad (3.14)$$

onde f_{i_K} é o valor de f_i para $\overline{v} = \overline{v}_K$.

Ora, se o valor da função objectivo for muito pequeno no e perto do mínimo, a hesseana é, aí, suficientemente representada pela sua primeira parcela e dispensa a informação residente nas segundas derivadas das funções f_i, o que corresponde a linearizá-las, desprezando os termos de ordem superior à 2ª da sua série de Taylor. Esta aproximação tem alguma validade, grosso modo, se, perto do mínimo, $\|\overline{P}_m - \overline{P}\|_2$ for menor que o maior valor próprio de $J^T J$ (Gill, Murray e Wright, 1981, p. 134). E tem a importantíssima vantagem de dispensar o cálculo das segundas derivadas das potências, com a correspondente economia de esforço computacional.

Por outro lado, independentemente da distância ao mínimo, a matriz $J_K^T J_K$ é definida positiva e, aliás, simétrica, se J_K for invertível, isto é, não singular (Ortega e Rheinboldt, 1970, p. 38). A direcção definida usando $J_K^T J_K$ para matriz A_K em 3.13 é, assim, uma direcção de descida e aproxima-se da definida pela hesseana perto do mínimo, assegurando a convergência quadrática. Infelizmente, não há garantia de que, numa qualquer iteração, não venha J_K singular. Mais do que isso, é preciso que $J_K^T J_K$ tenha condição, $\|J_K^T J_K\| \cdot \|(J_K^T J_K)^{-1}\|$, limitada, sob pena de a direcção $\Delta\overline{v}_{K+1}$ se poder tornar completamente arbitrária.

Outro escolho do método é que o facto de uma direcção ser de descida não garante que, dado um passo nessa direcção, se atinja um valor da função menor que o de partida. A função que desce localmente pode, posteriormente, e ao longo da mesma direcção, voltar a subir. O passo definido pelo método não conduz, obrigatoriamente, a um decrescimento da função.

O método desenvolvido por Marquardt (1963), coincidindo, em parte, com resultados obtidos por Levenberg (1944), permite dar uma resposta, quer ao problema de singularidade ou mau condicionamento do jacobiano, quer ao da necessidade de controlo do passo. Marquardt tomou como matriz A_K para 3.13:

$$A_K = J_K^T \; J_K + \lambda I \qquad , \quad \lambda \geq 0$$

onde designaremos por I a matriz unidade de ordem n.

Uma vez que os valores próprios duma matriz A são as raízes θ_i da equação característica

$$|A - \theta I| = 0$$

constata-se, imediatamente, que os valores próprios de $J_K^T \; J_K + \lambda I$ são os valores próprios de $J_K^T \; J_K$ adicionados de λ.

Então, se J_K for singular ou, por outras palavras, se $J_K^T \; J_K$ não for definida positiva, é possível, com $\lambda > 0$, tornar todos os valores próprios de $J_K^T \; J_K + \lambda I$ positivos e, portanto, tornar esta matriz definida positiva.

Por outro lado, sabe-se que uma medida da condição da matriz A, se ela for simétrica, o que é ainda o caso de $J_K^T \; J_K + \lambda I$, é o quociente entre os seus maior e menor valores próprios (Fox, 1964, p.142). O parâmetro λ controla assim a condição da matriz. Aumentando λ, diminui a condição.

Por último, λ controla, não só a direcção, mas também o passo dado na direcção que define, embora não independentemente, como é evidente. Se λ au-

menta, o passo diminui.

Utilizando a matriz definida por Marquardt, as iterações 3.13 escrevem-se

$$\bar{v}_{K+1} - \bar{v}_K = \Delta\bar{v}_{K+1} = - (J_K^T J_K + \lambda I)^{-1} \bar{g}_K$$

ou, atendendo a que

$$\bar{g}_K = J_K^T \bar{f}_K ,$$

$$\bar{v}_{K+1} - \bar{v}_K = \Delta\bar{v}_{K+1} = - (J_K^T J_K + \lambda I)^{-1} J_K^T \bar{f}_K \qquad (3.15)$$

Estas equações são conhecidas como equações do método de Levenberg-Marquardt e, quando $\lambda \to 0$, como equações de Gauss-Newton ou equações normais dos mínimos quadrados.

Quando $\lambda = 0$ a direcção definida é a de Gauss-Newton e, como $J_K^T J_K$ é, perto do mínimo, uma aproximação da hesseana, fica aí assegurada uma convergência quadrática.

Quando $\lambda \to \infty$, 3.15 reduz-se a

$$\bar{v}_{K+1} - \bar{v}_K = - \lambda^{-1} J_K^T \bar{f}_K = - \lambda^{-1} \bar{g}_K$$

que é a direcção de máximo decrescimento local da função, portanto uma direcção lógica de descida, ainda que iterações ao longo destas direcções conduzam a uma convergência apenas linear.

Para que o método funcione nos termos pretendidos, é preciso escolher, para cada iteração, o valor de λ de modo a que, sempre que possível, as iterações se reduzam às de Gauss-Newton ($\lambda = 0$), mas que, se necessário, origine direcções entre aquelas e as de descida máxima, diminuindo o passo, de forma a que a função objectivo efectivamente decresça.

Um método nestas condições, capaz de convergir, teoricamente, a partir de qualquer hipótese inicial, diz-se *globalmente convergente*.

Marquardt (1963) propôs um processo simples de determinação de λ. Assim, e depois de devidamente escalada a matriz $J_K^T J_K$, o processo parte dum valor arbitrário de λ e resolve a 1.ª iteração, sistema 3.15. Se o valor da função objectivo não vier reduzido, regressa à hipótese de partida e refaz a iteração, mas com λ multiplicado por um factor η. A operação repete-se até à função objectivo resultar diminuída, Nessa altura λ é dividido pelo mesmo factor η e passa-se à iteração seguinte. Marquardt sugeriu $\eta = 10$. O método mostrou ajustar-se às dificuldades da zona da função em que vão decorrendo as iterações e, em particular perto do mínimo, em funções, aí, de comportamento quadrático, conduzir a $\lambda = 0$, salvaguardando convergência última quadrática.

No entanto, Fletcher (1971) apresentou algumas críticas ao procedimento. Primeiro, uma escolha infeliz do valor inicial de λ pode obrigar a várias iterações falhadas, enquanto λ é sucessivamente multiplicado, até se conseguir reduzir a função objectivo, com todos os custos em avaliações da função e resoluções de sistemas. Por outro lado, como aumentar λ acarreta, além duma mudança de direcção, diminuir o passo, isso pode resultar, desnecessariamente, numa progressão muito lenta. Também uma série de iterações bem sucedidas pode colocar λ com um valor tão baixo que se necessita depois,

no caso de insucesso, de muitas multiplicações para poder prosseguir, tal como no caso duma fraca hipótese inicial.

Fletcher desenvolveu uma série de modificações ao algoritmo. Após cada iteração, a escolha de multiplicar, manter ou dividir λ passa a depender do resultado da comparação da redução da função objectivo obtida com uma previsão da que se obteria aproximando linearmente as funções residuais, f_i, no ponto que a iteração definiu. O valor de λ não pode descer dum limiar relacionado com o traço, soma dos elementos diagonais de $J_K^T J_K$, e a sua divisão é feita por um factor 2, enquanto que a multiplicação é feita por um factor entre 2 e 10, criteriosamente escolhido.

Quer o próprio Fletcher, quer outros autores, como Adby e Dempster (1974) ou Nash (1977), relatam bons resultados com este algoritmo. No entanto, Nash sustenta que, em alguns casos, apresenta, na verdade, custos mais altos que uma versão sua, ligeiramente modificada, do algoritmo de Marquardt.

Outros autores apresentaram alternativas para a definição de λ. Assim, Jones (1970), por exemplo, desenvolveu um método baseado na circunstância de que, quando λ aumenta, o ponto correspondente a $\bar{v}_{K+1}$ descreve uma espiral, e procurou o melhor valor de λ aplicando processos de pesquisa linear de mínimo, análogos aos aplicados ao longo duma direcção em muitos métodos de optimização.

Uma outra desvantagem do método é a de qualquer iteração, falhada ou bem sucedida, exigir a resolução do sistema linear 3.15, resolução que nem sempre é simples. Na verdade, é muito comum o mau condicionamento de matrizes que surgem em problemas de mínimos quadrados. É certo que o algoritmo não precisa de olhar a esse problema. Se a iteração falha, o que pode acon-

tecer devido a um mau condicionamento que define uma direcção totalmente disparatada, ele apenas aumenta λ, com isso aproximando a direcção da de descida máxima, diminuindo o passo e a condição da matriz, e tenta de novo. Mas, se queremos evitar recorrer frequentemente a esta solução, é bom utilizar um método de resolução de sistemas lineares que seja robusto em relação à propagação de erros numéricos devida a mau condicionamento. Os melhores processos envolvem decomposições ortogonais de matrizes. Nash (1977), por exemplo, na sua versão do algoritmo de Marquardt, utiliza a decomposição de Cholesky. Dennis (1977) e, particularmente, Lawson e Hanson (1974) chamaram a atenção para as potencialidades da decomposição em valores singulares.

3.3.2 Decomposição em valores singulares e controlo do parâmetro λ

A existência de uma rotina, desenvolvida por Golub e Reinsch (1979), eficiente e económica, de decomposição em valores singulares, permitiu-nos explorar algumas das possibilidades da decomposição e desenvolver alguns resultados úteis. A rotina usa transformações de Householder para reduzir a matriz a forma bidiagonal superior e, depois, uma versão do algoritmo QR de Francis (1961/62) para, iterativamente, diagonalizar a forma obtida e determinar os valores singulares. Utilizaremos uma versão da rotina apresentada em Forsythe, Malcolm e Moller (1977) que difere da original por escalar a matriz ao proceder à bidiagonalização e por ser independente da precisão de trabalho do computador. Wilkinson (1965) demonstrou que o processo iterativo envolvido converge globalmente e quase cubicamente. Quer Lawson e Hanson (1974), quer Cox (1977) estudaram o esforço computacional exigido pela rotina, que não é tão lenta e pesada quando ocorre passar. O procedimen-

to é extremamente seguro no que respeita à propagação de erros. Uma perturbação dos elementos da matriz a decompor, por exemplo, reflecte-se em perturbações da mesma ordem de grandeza ou menor nos valores singulares da decomposição. A resolução dum sistema linear, utilizando a decomposição, é quase imune aos erros de arredondamento devidos à precisão limitada do computador. Assim, Lawson e Hanson (1974, p. 92)concluem que, se essa precisão for η e o número de equações n, o erro numérico da solução pode ser substituído pelo obtido por uma perturbação dos elementos da matriz, ou dos termos independentes, com um termo principal da ordem de $n^2\eta$. Para efeitos de comparação, no caso da eliminação Gaussiana o número de equações, n, surge ao cubo e existe um outro termo exponencial em n.

A decomposição de J_K em valores singulares é uma factorização da forma

$$J_K = U \Sigma V^T$$

Σ é uma matriz diagonal. Como, no nosso caso, o número de parâmetros iguala o número de medidas, n, o jacobiano é quadrado e Σ é uma matriz quadrada de ordem n. Os seus elementos são os valores singulares σ_i (i=1,...,n) e são únicos. Se J_K é não singular, todos os seus valores singulares são estritamente positivos e são as raízes quadradas dos valores próprios de $J_K^T J_K$, iguais, aliás, aos de $J_K J_K^T$, que, nessa altura, é definida positiva.

As matrizes U e V são ortogonais e as suas colunas são, respectivamente, vectores próprios de $J_K J_K^T$ e $J_K^T J_K$.

O sistema 3.15 pode, então, escrever-se

$$\bar{v}_{K+1} - \bar{v}_K = - [(U\Sigma V^T)^T (U\Sigma V^T) + \lambda I]^{-1} (U\Sigma V^T)^T \bar{f}_K$$

Entretanto

$$(U\Sigma V^T)^T = V \Sigma U^T$$

e, atendendo à que as matrizes U e V são ortogonais, isto é, $UU^T = VV^T = I$, vem

$$\bar{v}_{K+1} - \bar{v}_K = (V\Sigma^2 V^T + \lambda I)^{-1} V \Sigma U^T \bar{f}_K$$

A ortogonalidade de V justifica ainda

$$\bar{v}_{K+1} - \bar{v}_K = - (V\Sigma^2 V^T + \lambda VV^T)^{-1} V\Sigma U^T \bar{f}_K$$

ou

$$\bar{v}_{K+1} - \bar{v}_K = - [V(\Sigma^2 + \lambda I)V^T]^{-1} V\Sigma U^T \bar{f}_K \qquad (3.16)$$

donde, garantindo-se que $\Sigma^2 + \lambda I$, matriz quadrada, é invertível,

$$\bar{v}_{K+1} - \bar{v}_K = - V(\Sigma^2 + \lambda I)^{-1} V^T V\Sigma U^T \bar{f}_K$$

$$\bar{v}_{K+1} - \bar{v}_K = - V(\Sigma^2 + \lambda I)^{-1} \Sigma U^T \bar{f}_K$$

ou

$$\bar{v}_{K+1} - \bar{v}_K = - V \Lambda U^T \bar{f}_K \qquad (3.17)$$

onde

$$\Lambda = (\Sigma^2 + \lambda I)^{-1} \Sigma \qquad (3.18)$$

é uma matriz diagonal cujos elementos são

$$\frac{\sigma_i}{\sigma_i^2 + \lambda} \qquad (i = 1, \ldots, n) \qquad (3.19)$$

Quando $\lambda \to 0$, $\Lambda \to \Sigma^{-1}$ e

$$\bar{v}_{K+1} - \bar{v}_K = - J_K^{-1} \bar{f}_K$$

que é a direcção definida por 3.15 quando $\lambda = 0$, caso de Gauss - Newton, pois, sendo J_K matriz quadrada,

$$(J_K^T J_K)^{-1} J_K^T = J_K^{-1}.$$

Quando $\lambda \to \infty$, $\Lambda \to \frac{1}{\lambda} \Sigma$ e

$$\bar{v}_{K+1} - \bar{v}_K = - \frac{1}{\lambda} J_K^T \bar{f}_K$$

que é a direcção de máximo decrescimento local.

Assim, o cálculo de diferentes soluções de 3.15, para diferentes λ's mas para o mesmo jacobiano J_K, não obriga a nova decomposição em valores sin-

gulares e, mais, aproveita sempre o produto

$$\overline{h} = U^T \overline{f}_K$$

que é independente de λ. Isso já compensa muito do esforço de cálculo introduzido pela decomposição.

É, por outro lado, relativamente fácil um controlo elementar de λ que introduz nova e substancial economia, resolvendo algumas das dificuldades apresentadas por Fletcher.

Na verdade, se for σ_m o menor valor singular de J_K, não há vantagem em diminuir λ para aquém dum valor λ_m, suficiente para que seja

$$\sigma_m^2 \gg \lambda m$$

porque, a partir daí,

$$\frac{\sigma_i}{\sigma_i^2 + \lambda} \simeq \frac{1}{\sigma_i}$$

e a direcção determinada continua a ser a de Gauss-Newton e o passo, o mesmo, por mais que se diminua λ.

Dito doutro modo, não interessa diminuir λ muito para aquém do menor valor próprio de $J_K^T J_K$, como é óbvio.

O limiar inferior adoptado para λ foi o de $\sigma_m^2/10$. De cada vez que tenta uma iteração, se λ vier inferior a $\sigma_m^2/10$, ou porque foi dividido em resultado

dum sucesso anterior, ou porque, entretanto, por se trabalhar com um novo J_K, σ_m subiu, ou até porque se trata da 1.ª iteração, o programa faz $\lambda = \sigma_m^2/10$.

Por outro lado, se for σ_M o maior valor singular de J_K, é imediato que, ao subir λ para além de um valor λ_M, suficiente para que seja

$$\lambda_M \gg \sigma_M^2 ,$$

já se não altera a direcção da solução, que é a de descida local máxima, mas apenas se reduz o passo definido ao longo dessa direcção. Isto é, a partir do momento em que λ se torne substancialmente superior ao maior valor próprio de $J_K^T J_K$, poder-se-ia até recorrer a um processo de pesquisa linear como os baseados no princípio de Goldstein-Armijo, por exemplo.

Como o passo pode vir muito reduzido quando se atinge a direcção de maior declive, o nosso algoritmo, mal $\lambda > 100\ \sigma_M^2$, toma para elementos da matriz Λ

$$\frac{\sigma_i}{\sigma_i^2 + \lambda} \quad 100 \quad \sigma_M^2 \simeq \quad \sigma_i / \left(\frac{\lambda}{100\ \sigma_M^2}\right)$$

o que se traduz em tomar para passo, encontrada a direcção de máxima descida, *o passo "natural" do método clássico da máxima descida*, e proceder então, se necessário, à sua redução com o posterior aumento de λ. Trata-se duma aproximação a uma pesquisa linear que, embora nalguns casos aumente desnecessariamente o esforço computacional, noutros permite uma descida mais rápida feita pelas direcções de máximo declive, sabido como é que a convergência pode ser muito lenta ao longo destas direcções.

Preferiu-se não avançar critérios de escolha da variação de λ entre aqueles dois valores extremos. O algoritmo multiplica por 10 quando necessita aumentar λ. Quando, ao contrário, é levado a proceder à sua diminuição, multiplica-o por .4, segundo sugestão de Nash (1977, p. 175). Esta actuação não se afasta muito, aliás, da recomendada por Fletcher, pelo menos no que respeita à diminuição. Afigura-se importante, no entanto, conhecidos os valores extremos para λ que interessa utilizar, testar e aperfeiçoar procedimentos em que os factores multiplicativos dependam, de algum modo, desses valores extremos, por exemplo de $\frac{\sigma_M^2}{\sigma_m^2}$, que é a condição da matriz $J_K^T J_K$.

O programa admite ainda a possibilidade de impor um número para o valor inicial de λ, sempre que se receie que a hipótese inicial $\overline{v}_0$ possa ser muito grosseira, isto é, muito afastada do mínimo. A escolha de λ só é, nesses casos, pedida depois de feita a decomposição de J_0 e permite, portanto, começar a optimização por uma descida local máxima ou próxima, na tradição de algoritmos que abordam problemas difíceis ou mal condicionados, a partir de hipóteses iniciais incontroladas, utilizando, primeiro, o método de máximo declive e, só depois, um método de convergência quadrática.

Interessa referir, com algum pormenor, uma situação mais drástica: a da singularidade de J_K, ou a de um valor singular ser realmente nulo. Diga-se, no entanto, que nas situações a que os problemas de resistividade em terrenos estratificados conduzem, os valores de J_K podem ser pequenos, mas raramente nulos. As poucas situações em que os valores singulares tendem para zero ocorrem, quase sempre, em circunstâncias que não têm interesse, do ponto de vista global do nosso método de interpretação do lote de medidas, e detectam-se, até, pela tendência dos parâmetros estruturais a assumir valores geologicamente pouco verosímeis e em completo contraste com outros re-

sultados obtidos. Por essas razões, o programa tem como um dos seus critérios de paragem, por abortamento do algoritmo, justamente uma condição do jacobiano demasiado alta.

De facto, a singularidade não é óbice grave para o método. Se um ou mais valores singulares forem nulos e J_K for singular ou de característica inferior a n, número de linhas e de colunas, o sistema 3.17 não é resolúvel com $\lambda = 0$ mas, com $\lambda \neq 0$, é-o.

Suponhamos que procurávamos resolver o sistema com $\lambda = 0$ e J_K singular

$$\overline{v}_{K+1} - \overline{v}_K = - (J_K^T J_K)^{-1} J_K^T \overline{f}_K = - J_K^{-1} \overline{f}_K \qquad (3.20)$$

O sistema não é resolúvel e o melhor que se pode conseguir é uma pseudo-solução que minimize a soma quadrática dos resíduos ou

$$\| \overline{v}_{K+1} - \overline{v}_K + J_K^{-1} \overline{f}_K \|_2 \qquad (3.21)$$

De entre as diferentes soluções possíveis reveste-se de interesse a que conduz a menor valor de $\overline{v}_{K+1} - \overline{v}_K$, pois isso mantém um comportamento estável para o processo iterativo. É conhecido (Forsythe, Malcolm e Moler, 1977, p. 193-240) que tal solução se pode obter utilizando a matriz pseudo-inversa de Moore- Penrose, J_K^+

$$\overline{v}_{K+1} - \overline{v}_K = - J_K^+ \overline{f}_K$$

A matriz J_K^+ é muito fácil de obter, conhecida a decomposição em valores singulares de J_K. Se $J_K = U\Sigma V^T$ então

$$J_K^+ = V\Sigma^+ U^T$$

onde Σ^+ é uma matriz diagonal com elementos

$$\sigma_i^+ = 1/\sigma_i \qquad \text{se} \quad \sigma_i \neq 0$$

$$\sigma_i^+ = 0 \qquad \text{se} \quad \sigma_i = 0$$

Então 3.20 escreve-se

$$\overline{v}_{K+1} - \overline{v}_K = - V\Sigma^+ U^T \overline{f}_K$$

Compare-se com 3.17 e atenda-se a 3.19. É imediato concluir que

$$\Lambda \to \Sigma^+$$

quando $\lambda \to 0$ mas mantendo-se não nulo.

Isto é, o método de Marquardt permite tratar o caso de singularidade e, mais, permite, se o algoritmo a isso o conduzir, a obtenção duma solução de norma mínima, como a utilização de pseudo inversa pretende definir. Essa solução pode aliás ser imposta com facilidade, limitando externamente o valor de λ.

Uma das maiores desvantagens da utilização da pseudo inversa é o exigir uma opção de quais os valores singulares a considerar nulos, se de facto eles forem pequenos mas não computacionalmente nulos. Uma decisão desse género nem sempre é fácil de tomar. Um valor singular pode ser extremamente pequeno mas muito significativo (Nash, 1977, p. 32). É possível obter outras soluções a partir da solução de norma mínima e assim controlar a sua qualidade. De facto, a partir da solução de menor $\|\bar{v}_{K+1} - \bar{v}_K\|_2$, podem obter-se outras, que minimizam os resíduos a menos duma quantidade determinável, simplesmente adicionando à solução inicial combinações lineares das colunas de V correspondentes aos valores singulares considerados nulos. Pode até, como fazem, por exemplo, Lawson e Hanson (1974, p. 199-206), proceder-se a um estudo aprofundado e selecção das soluções "candidatas" para a resolução do sistema (em termos de minimização de quadrados de resíduos), obtidas pela rejeição de um ou vários valores singulares. A carga que o processo, no entanto, implica num caso como o nosso, em que o sistema é resolvido em cada iteração, talvez exigindo de cada vez o mesmo estudo, é pesada.

Muitos autores (Hoerl e Kennard, 1970a e 1970b, e também Marquardt, 1970, e Lawson e Hanson, 1974) desenvolveram também, aliás, métodos de análise global de sistemas como 3.15 em função de λ. O estudo das diferentes soluções de sistemas lineares, em termos de minimização dos resíduos, para diferentes valores de λ, tem sido chamado de "ridge regression" e debruça-se sobre a norma dos resíduos 3.21 e a norma da solução, $\|\bar{v}_{K+1} - \bar{v}_K\|_2$ no nosso caso, envolvendo considerações estatísticas e permitindo a construção dum quadro de soluções ou pseudo-soluções do sistema 3.20. Como é óbvio, o esforço computacional exigido pelo estabelecimento deste espaço de soluções

torna inviável a sua utilização eficaz no nosso caso e pelas mesmas razões que obrigam a eliminar o estudo das soluções candidatas por rejeição de valores singulares.

A primeira proposta de utilização da decomposição em valores singulares no problema da interpretação de terrenos horizontalmente estratificados deve-se, segundo cremos, a Johansen (1977) (embora combinado com o método da inversa generalizada e não com o de Marquardt) e, duma forma mais geral, a sugestão da sua aplicação a problemas de interpretação geofísica data de Jupp e Vozoff (1975). O ponto da situação é feito num artigo de Lines e Treitel (1984), cujo aparecimento é posterior à conclusão do presente trabalho, mas que não aborda explicitamente o problema do controlo do parâmetro de Marquardt. Também recentemente, foi dado à estampa um outro trabalho sobre o assunto (Saito, 1984), ao qual, infelizmente, não tivemos acesso por ser redigido em japonês. A sugestão, de que, uma vez atingida a direcção de gradiente no método de Marquardt, é necessário reformular o passo, encontra-se já em Smith e Shanno (1971), embora a solução adoptada tenha sido diferente da nossa. Este trabalho é, aliás, interessante por uma outra razão, a de sugerir a utilização de valores negativos para o parâmetro de Marquardt, sob certas condições, ideia curiosa que não tivemos ocasião de explorar devidamente.

3.3.3 Análise espectral da decomposição

Algumas da vantagem da utilização da decomposição em valores singulares são a insensibilidade à propagação de erros numéricos, a facilidade do estudo do condicionamento dos sistemas que vão surgindo, a

implementação do método de Marquardt com decomposição da matriz uma vez apenas por iteração, e a possibilidade de controlo do parâmetro λ. Isso paga muito do esforço que a decomposição exige. Ela apresenta, porém, outra vantagem extremamente importante.

Imaginemos, com efeito, que o mínimo estava determinado e lhe correspondia $\bar{v}^*$. Suponhamos uma perturbação $\Delta\bar{v} = \bar{v} - \bar{v}^*$. Seja J^* o jacobiano, não singular, para $\bar{v}^*$. Então

$$\bar{v} - \bar{v}^* = - J^{*-1} \bar{f} = - V \Sigma^{-1} U^T \bar{f}$$

onde $\bar{f}$ é o vector perturbação dos resíduos

$$\bar{f} = [f_1, \ldots, f_n]^T$$

Vem então

$$U^T \bar{f} = \begin{bmatrix} u_{11} f_1 + \ldots + u_{n1} f_n \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ u_{1n} f_1 + \ldots + u_{nn} f_n \end{bmatrix}$$

e, finalmente,

$$\bar{v} - \bar{v}^* = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_1} V_{11}(u_{11}f_1+\ldots+u_{n1}f_n)+\ldots+ \frac{1}{\sigma_n} V_{1n}(u_{1n} f_1+\ldots+u_{nn}f_n) \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ \frac{1}{\sigma_1} V_{n1}(u_{11}f_1+\ldots+u_{n1}f_n)+\ldots+ \frac{1}{\sigma_n} V_{nn}(u_{1n}f_1+\ldots+u_{nn}f_n) \end{bmatrix}$$

Vêm, então, associados com o valor singular σ_i, um vector coluna da matriz U,

$$\overline{u}_i = [u_{1i}, u_{2i}, \ldots, u_{ni}]^T$$

a que chamaremos vector de dados, e um vector coluna da matriz V,

$$\overline{v}_i = [v_{1i}, v_{2i}, \ldots, v_{ni}]^T$$

a que chamaremos vector de parâmetros.

É prático definir, também, vectores de dados reduzidos

$$\overline{u}_i^{(0)} = \frac{1}{\sigma_i} \overline{u}_i$$

e vectores de parâmetros reduzidos

$$\overline{v}_i^{(0)} = \frac{1}{\sigma_i} \overline{v}_i$$

Chamaremos, também, a $\frac{1}{\sigma_i}$, factor de redução $\theta_i = \frac{1}{\sigma_i}$.

É, então, possível determinar a que perturbações nas medidas, que se reflectem em $\overline{f}$, é devida a perturbação dum qualquer parâmetro v_j. Essa perturbação só depende das componentes j dos diferentes vectores de parâmetro. A influência relativa de cada componente, v_{ji}, depende do vector de dados reduzido $\overline{u}_i^{(0)}$.

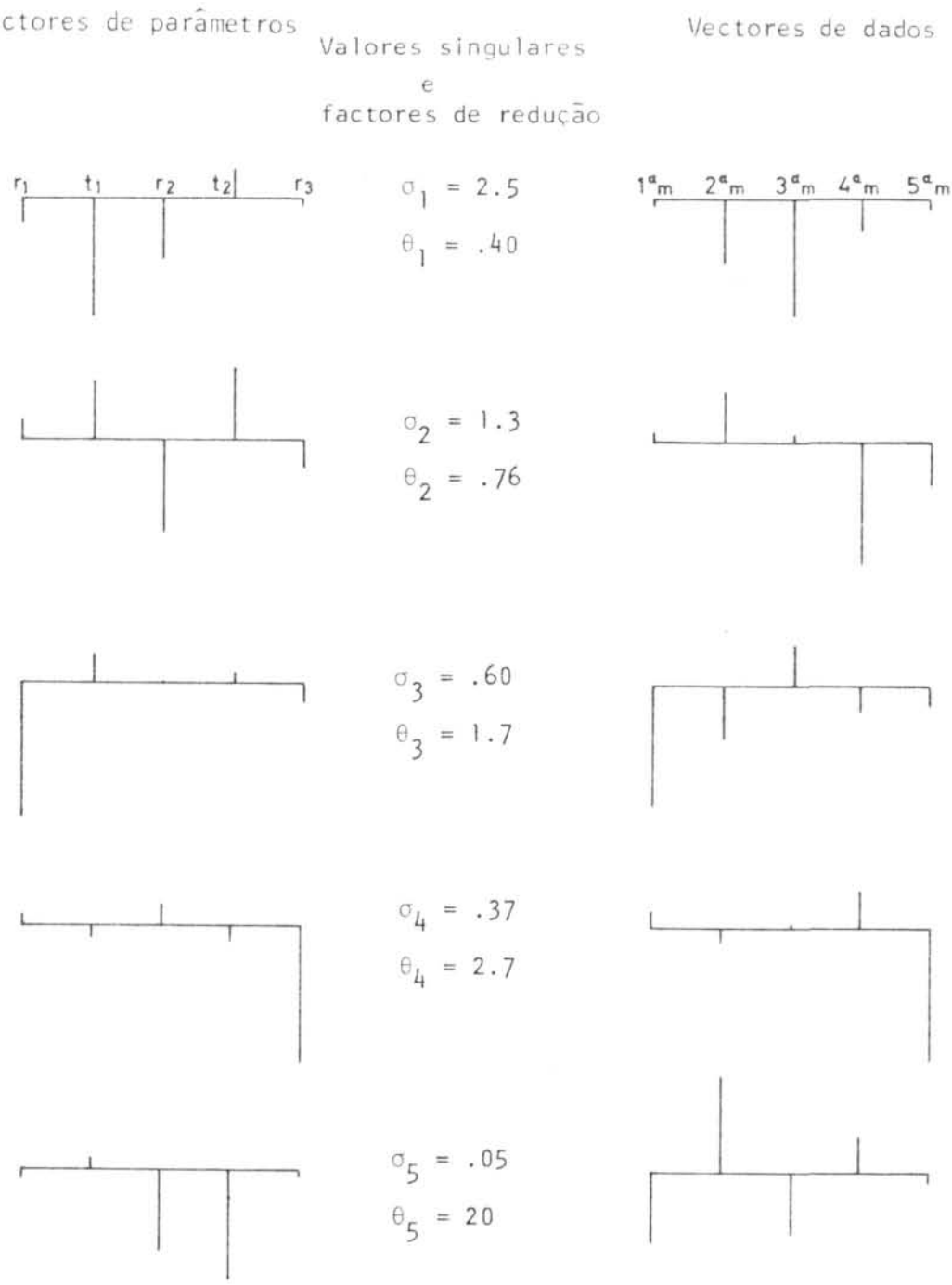
Inversamente, é possível saber quais os parâmetros mais sensíveis a uma perturbação na medida j. As perturbações nos parâmetros dependem das componentes j dos diferentes vectores de dados e a influência sobre o parâmetro v_i depende das componentes i dos vectores de parâmetros reduzidos.

A análise das componentes dos vectores de dados e de parâmetros, chamada *análise espectral*, permite tirar importantes conclusões sobre a estrutura, o lote de medidas e as sensibilidades da solução. Estudos muito semelhantes foram, aliás, desenvolvidos por Inman (1973, 1975) e discutidos também por Hoversten, Dey e Morrison (1982).

A análise permite, entre outras coisas, avaliar quais as medidas mais influentes na solução a que se chegou e quais aquelas que podem ser alteradas ou perturbadas sem que se altere muito a solução. Inversamente, atendendo aos módulos e sinais das componentes, é possível ter uma ideia dos parâmetros que são rigidamente determinados pelas medidas, quais aqueles que as medidas determinam com menor precisão e quais as combinações de variações conjuntas dos parâmetros a que o lote de medidas é mais insensível.

O quadro III-4 mostra os valores singulares e os vectores de parâmetros e de dados, na solução, duma inversão, a título de exemplo. As variáveis h_1 e h_2, profundidades, vêm substituídas por t_1 e t_2, espessuras de estratos. De facto, a correlação entre espessuras e resistividade é mais aparente, por um lado, e, por outro, como veremos, a nossa optimização será feita em espessuras, por motivos que exporemos oportunamente.

Repare-se, para começar, que os 4 primeiros factores de redução se podem considerar quase da mesma ordem de grandeza enquanto que o 5º. é, manifestamente, superior.



Quadro III-4 - Análise espectral duma inversão dum terreno de dois estratos com $r_1 = 500$, $t_1 = 50$, $r_2 = 50$, $t_2 = 75$, $r_3 = 500$ (unidades S.I). A configuração electródica é a de Schlumberger. As medidas são feitas a 10, 145.5, 355, 867, 6642 metros. As correntes injectadas supõem-se tais que todas as potências medidas vêm da ordem de 13,3 W com erro relativo máximo de .01. O resultado da inversão foi $r_1 = 501.5$, $t_1 = 48.5$, $r_2 = 62.4$, $t_2 = 95.4$, $r_3 = 503.4$. A escala para as componentes é 1-20 mm.

A resistividade r_3 aparece, basicamente, no 4º vector de parâmetros e o correspondente vector de dados tem por componente essencial a definida na 5ª medida. Ao mesmo tempo, a 5ª medida dá componentes muito pequenas nos outros vectores de dados. Isto é, r_3 é determinado quase exclusivamente a partir da 5ª medida e, por sua vez, esta 5ª medida só fornece informação sobre r_3 e não sobre qualquer outro parâmetro. Um tal resultado é, aliás, compatível com a conhecida conclusão de que, assimptoticamente, a resistividade aparente dum terreno tende para a resistividade do substrato, quando a distância entre eléctrodos aumenta. Aqui, utilizamos propositadamente uma distância exagerada, à volta dos 6.5 km. E quanto à precisão com que podemos ter esperança de ter detectado r_3? As componentes têm todas valores entre 0 e 1. Se, eventualmente, todos os factores de redução fossem próximos, os vectores de dados reduzidos teriam todos as suas componentes a contribuir apenas de acordo com o tamanho das componentes dos respectivos vectores de parâmetros. Mas se um parâmetro aparece essencialmente definido, ou mesmo apenas ajudado a definir, através dum valor singular muito baixo, ele vem pobremente definido, porque o factor de redução multiplica o erro que afecta as medidas do respectivo vector de dados, erro que pode apagar até a informação veiculada através dos outros valores singulares. Dito doutra maneira, se se perturbar o parâmetro em questão, as medidas, pelo menos as que surgem mais fortemente representadas no respectivo vector de dados, variam pouco. Elas determinam mal o valor do parâmetro. Ora, aqui, r_3 vem totalmente definido através dum valor singular não muito baixo. Se não é o parâmetro melhor definido, também não é o pior.

O que se disse para r_3, pode ser quase transcrito para r_1. Na verdade, e como também era de esperar, r_1 surge, quase exclusivamente, defini-

do pela 1ª medida, através do 3º valor singular. Mas, agora, já é importante constatar que a 1ª medida veicula também informação, embora muito ruidosa, por ser através do valor singular mais baixo, para a determinação de r_2 e t_2. De notar, também, que, como se vê no 3º vector da data, a 2ª e mesmo a 3ª medidas contribuem, também, um pouco para a definição de r_1.

A espessura t_1 tem a sua definição quase toda feita através do 1º e 2º valores singulares. As medidas que pesam na sua definição são, então, a 2ª, 3ª e 4ª. A última "vê" apenas r_3 e a 1ª tem uma distância interelectródica correspondente tão pequena que mal se apercebe que o terreno não é homogéneo. Mas mesmo a 2ª medida vê mal t_1. Na verdade, se compararmos, no 1º e 2º valores singulares, que são muito próximos e através dos quais maioritariamente se define t_1, as 2ªs componentes dos vectores de parâmetros e as 2ªs componentes dos vectores de dados, vemos que elas são quase do mesmo tamanho e de sinais opostos. Qualquer perturbação da 2ª medida resulta pouco influente na determinação de t_1 e vice-versa.

A situação respeitante a r_2 e t_2 é a mais complexa. Estes dois parâmetros surgem determinados através do 1º, 2º e 5º valores singulares e envolvem todas as medidas à excepção da 5ª, embora a contribuição de 1ª medida seja pequena. Nos dois primeiros valores singulares, que são os que veiculam menor erro, r_2 e t_2 surgem nos vectores de parâmetros com componentes de sinal contrário e do mesmo tamanho relativo, a de r_2, negativa, e a de t_2, positiva. Uma perturbação conjunta dos dois parâmetros, mas tal que os dois aumentem ou diminuam simultaneamente e, sensivelmente, o mesmo, não afecta grandemente o lote de medidas, pelo menos de acordo com a informação veiculada através desses 2 primeiros valores singulares. Mas dá-se o oposto se as variações tiverem sinais contrários. Isto significa que o que fica

bem determinado, através destes valores singulares, é o quociente t_2/r_2. Mas os valores de t_2 e r_2 ficam mal determinados. A oportunidade de os determinar vem dada através do 5º valor singular. De facto aqui as componentes têm o mesmo sinal e é, então, o produto $t_2\ r_2$ que vem determinado. Só que vem-no através dum valor singular muito baixo e, portanto, com muito erro.

Saliente-se, ainda, que a 5ª medida não contribui, nem para o 1º e 2º vectores de data, nem para o 5º. Por outras palavras, não interessa aumentar o lote com distâncias interelectródicas maiores porque o problema da imprecisão de determinação de r_2 e t_2 subsiste. Toda a informação possível de obter parece residir em medidas abaixo da última.

O modelo a que a inversão chegou é, aliás, condizente com a análise. Fizeram-se ainda inversões com 9 supostos lotes de medida nas mesmas condições, apenas com as potências diferentes, dentro do seu erro relativo máximo permitido. Eis os valores extremos dos parâmetros obtidos e as médias

$$r_1 \in [495.5,\ 503.4]\ ,\quad \bar{r}_1 = 498.7$$

$$t_1 \in [\ 48.6,\ \ 53.1]\ ,\quad \bar{t}_1 = \ 50.3$$

$$r_2 \in [\ 13.8,\ \ 62.4]\ ,\quad \bar{r}_2 = \ 45.5$$

$$t_2 \in [\ 20.7,\ \ 95.4]\ ,\quad \bar{t}_2 = \ 68.6$$

$$r_3 \in [495.3,\ 507.8]\ ,\quad \bar{r}_3 = 500.0$$

Entretanto, eis os mesmos indicadores para o produto $t_2\ r_2$ e para o quociente t_2/r_2:

$$t_2 \cdot r_2 \in [285.7,\ 5953.0]\ ,\quad \overline{t_2 \cdot r_2} = 3542.4$$

$$t_2/r_2 \in [1{,}47,\ 1{,}53]\ ,\quad \overline{t_2/r_2} = 1.50.$$

Com os valores reais da estrutura, é $t_2\ r_2 = 3750$ e $t_2/r_2 = 1.50$.

É, assim, patente que t_2 e r_2 estão fortemente correlacionados. Abordaremos no próximo capítulo o estudo destas correlações e da avaliação do erro com que se determina cada parâmetro, quando precisarmos melhor a distribuição estatística dos erros das medidas. Mas as possibilidades de controlo dadas pela análise espectral, duma forma simples, continuarão a ser um auxiliar insubstituível.

3.3.4 Constrições

O cálculo das potências, bem como o das derivadas, pressupõe resistividades e profundidades não nulas e ainda $h_2 > h_1$. Estas constrições definem o domínio exequível para os parâmetros.

O método de optimização que adoptámos é um método que não toma em consideração a existência de constrições. No entanto, efectuando uma mudança de variáveis apropriada, é possível aplicá-lo ao nosso caso, garantindo-se que as constrições não são violadas, ainda que o método, num caso geral, possa dar origem, como veremos, a ambiguidades e, pior, à paragem do algoritmo num falso mínimo.

A mudança de variáveis é

$$
\begin{aligned}
r_1 &= x_1^2 \\
h_1 &= x_2^2 \\
r_2 &= x_3^2 \\
h_2 &= x_2^2 + x_4^2 \\
r_3 &= x_5^2
\end{aligned}
\qquad (3.22)
$$

no caso mais geral de um terreno de 2 estratos, e pode ser feita em duas etapas

$$
\begin{aligned}
r_1 &= v(1) & v(1) &= x_1^2 \\
h_1 &= v(2) & v(2) &= x_2^2 \\
r_2 &= v(3) & v(3) &= x_3^2 \\
h_2 &= v(2) + V(4) & v(4) &= x_4^2 \\
r_3 &= v(5) & v(5) &= x_5^2
\end{aligned}
\qquad (3.23)
$$

Na 1.ª etapa, definem-se espessuras de estratos a substituir profundidades. As variáveis v(i), i=1, ..., n são as variáveis aparentes do algoritmo de optimização e estão armazenadas, no programa, num vector do mesmo nome. No entanto, as variáveis utilizadas para o cálculo das potências e derivadas são as iniciais, armazenadas em r_1, h_1, r_2, h_2 e r_3. As variáveis x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 nunca surgem como tais no programa. Sempre que o algoritmo exige uma sua avaliação expressa, ela é obtida exprimindo-as nas variáveis v (i). No entanto, na realidade, a minimização é feita nelas.

De facto, estas variáveis não têm significado físico e funcionam como variáveis auxiliares. Por outro lado, o cálculo das potências e derivadas com profundidades foi mantido porque têm sido essas as variáveis tradicionais de apresentação dos cálculos das séries envolvidas.

O algoritmo necessita de ter definido um jacobiano constituído pelas derivadas das funções resíduos em ordem às novas variáveis. Como a derivada em ordem a qualquer variável da função resíduo é, em módulo, igual à respectiva derivada da potência, podemos resolver o problema através de:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial P}{\partial x_1} \\ \frac{\partial P}{\partial x_2} \\ \frac{\partial P}{\partial x_3} \\ \frac{\partial P}{\partial x_4} \\ \frac{\partial P}{\partial x_5} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial r_1}{\partial x_1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial h_1}{\partial x_2} & 0 & \frac{\partial h_2}{\partial x_2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial r_2}{\partial x_3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\partial h_2}{\partial x_4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial r_3}{\partial x_5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial P}{\partial r_1} \\ \frac{\partial P}{\partial h_1} \\ \frac{\partial P}{\partial r_2} \\ \frac{\partial P}{\partial h_2} \\ \frac{\partial P}{\partial r_3} \end{bmatrix}$$

com, de 3.22 e 3.23,

$$\frac{\partial r_1}{\partial x_1} = 2x_1 = 2\sqrt{v(1)}$$

$$\frac{\partial h_1}{\partial x_2} = 2x_2 = 2\sqrt{v(2)}$$

$$\frac{\partial h_2}{\partial x_2} = 2x_2 = 2\sqrt{v(2)}$$

$$\frac{\partial r_2}{\partial x_3} = 2x_3 = 2\sqrt{v(3)}$$

$$\frac{\partial h_2}{\partial x_4} = 2x_4 = 2\sqrt{v(4)}$$

$$\frac{\partial r_3}{\partial x_5} = 2x_5 = 2\sqrt{v(5)}$$

Este método, que permite aplicar um algoritmo de optimização sem constrições a um problema com constrições simples como as nossas, oferece, no entanto, os seus perigos (Gill, Murray e Wright, 1981, p. 268-269), nomeadamente a introdução de novas singularidades como, por exemplo, pontos de sela ou inflexão. Outros há, citados por aqueles e outros autores, mais robustos, como os que congelam uma ou mais variáveis ou os que utilizam funções de penalização. Todavia, nenhuma das receadas dificuldades nos apareceu e, como o processo é simples, conserva a estrutura geral do algoritmo e parece ser, no nosso caso, eficiente, foi adoptado. O leitor pode, porém, encontrar em Smith e Shanno (1971) a descrição de um método de tratamento das constrições, especialmente adaptado à utilização do método de Marquardt, por projecção, na superfície fronteira da constrição, das direcções de descida.

3.3.5 Critério de paragem do algoritmo com sucesso

Um algoritmo deve terminar quando alguns requisitos pré-estabelecidos e que sejam indicadores de convergência forem cumpridos. A falta de critérios de paragem adequados pode levar o algoritmo de optimização a cair em situações de "overflow" ou "underflow" ou de execução de ciclos fechados. De qualquer modo, toda a tentativa de o prolongar para além dos limites de precisão impostos pelos dados de entrada conduz, necessariamente, a um esforço inútil.

O limite de precisão que enfrentamos é determinado pela precisão das potências medidas, a que chamamos p_r. Se o algoritmo for numericamente fraco, limites mais drásticos podem ser impostos pela propagação de erros numéricos devidos à precisão finita da aritmética do computador. Como vimos, quer pela dupla precisão utilizada, quer pela robustez da decomposição em valores singulares, quer pelo razoável comportamento das séries utilizadas no cálculo de potências e derivadas, esse perigo não existe, pelo menos para uma utilização "realista" do algoritmo. O nosso objectivo é encontrar, se possível, uma estrutura que nos aproxime as potências calculadas às medidas a menos de $p_r/10$, em termos relativos. Para ter alguma segurança nesta aproximação sem, ao mesmo tempo, sobrecarregar inutilmente os cálculos, é-nos preciso e basta-nos determinar as potências calculadas com uma precisão relativa de $p_r/100$. Mas, para além das potências, e por um processo de cálculo que, embora tenha partes comuns, é fundamentalmente independente, é preciso calcular as suas derivadas. Antes de avançarmos no estabelecimento de critérios de paragem, torna-se forçoso ter a certeza de que utilizamos uma precisão de cálculo, para as derivadas, que não restrinja os limites impostos pela precisão dos dados. Essa precaução deve ser tomada na resolução

dos sistemas lineares correspondentes às iterações. Sabe-se (Lawson e Hanson, 1974, p.51) que, na resolução dos sistemas lineares do tipo dos nossos, utilizando a decomposição em valores singulares, se for α uma medida do erro relativo ou perturbação dos elementos da matriz A, β uma medida do erro relativo dos termos independentes e K uma medida de condição da matriz, isto é, se

$$\alpha \geq \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}$$

$$\beta \geq \frac{\|\Delta \bar{b}\|}{\|\bar{b}\|}$$

$$K = \|A\| \quad \|A^{-1}\|$$

com normas de matrizes compatíveis com as de vector, então o erro relativo da solução do sistema

$$A \bar{x} = \bar{b}$$

vem tal que

$$\frac{\|\Delta \bar{x}\|}{\|\bar{x}\|} \leq \frac{K}{1-\alpha K} (\alpha+\beta),$$

se $\alpha K < 1$. Se $\alpha K \geq 1$, o sistema fica computacionalmente indeterminado. No nosso caso, as derivadas entram nos elementos da matriz A enquanto as potências surgem nos termos independentes. Mas o erro relativo dos termos inde-

pendentes pode ser superior ao das potências, pois eles envolvem as diferenças entre as potências calculadas e as medidas, diferenças que diminuem tanto mais quanto mais perto do mínimo se estiver a iterar. Isso não acarreta qualquer instabilidade. Repare-se que a solução do sistema, $\bar{x}$, é constituída pela diferença $\bar{v}_{K+1} - \bar{v}_K$, que tende igualmente para zero com a aproximação do mínimo. Entretanto, esta situação determina que não haja grande necessidade de muita precisão no cálculo das derivadas das potências. Longe do mínimo, o que fundamentalmente nos interessa é manter a matriz A computacionalmente definida positiva, o que inclusivamente justificou a introdução do parâmetro λ. Perto do mínimo, não são os erros das derivadas que mais pesam. Alguns autores apresentaram e estudaram a possibilidade de conservar as derivadas, de iteração para iteração. O nosso esquema de cálculo de potências e derivadas é tal que, sendo necessário o cálculo das potências, o custo do cálculo das derivadas é pequeno, sobretudo a precisão menor. Mas a possibilidade de implementar uma variante desse género existe e é fácil de concretizar. No nosso programa, no entanto, para situações "realistas" e precisões de lotes de medida igualmente aceitáveis, de forma a garantir que, em geral, $\alpha K < 1$, constata-se que o cálculo das derivadas com precisão de $p_r/10$ se revela suficiente e eficiente.

Tomaremos, então, como critério de aceitação da solução a aproximação, em termos relativos, entre potências medidas e calculadas, a menos de $p_r/10$. Trata-se duma condição necessária para o sucesso do algoritmo. Mas não é uma condição suficiente para a sua paragem. A experiência demonstrou-nos que não é significativo procurar uma aproximação maior e essa é uma das razões para fixar este limiar de $p_r/10$, um tanto arbitrário. Por outras palavras, dentro das situações que nos interessam, o aproximar mais as po-

tências não se traduz numa variação significativa do mínimo encontrado. Mas o que é importante é que quanto mais exigirmos do algoritmo tanto mais evitamos falsas soluções. Há assim vantagem em prolongar o algoritmo e forçar a convergência um pouco para além. Não porque a precisão da solução melhore substancialmente, mas porque, continuando o algoritmo convergente, maior se torna a confiança que temos de que a precisão possível foi conseguida (Gill, Murraye Wright, 1981, p. 310). Podemos, desde já, adiantar que os critérios que aplicamos se traduzem, em caso de convergência com sucesso, na execução de mais uma a cinco iterações, em média, depois de cumprida a condição de aproximação das potências.

Os critérios de paragem com convergência procuram fazer reflectir dois tipos de testes essenciais; a iteração $\bar{v}_K$ deve satisfazer as condições suficientes de mínimo e a sequência $\{\bar{v}_K\}$ deve mostrar sinais de convergência. E, para constituírem um bloco coerente e estruturado, devem depender dum único parâmetro relacionado com a precisão dos dados.

Gill, Murray e Wright (1981, p. 306-307) apresentaram um critério, coeso e bastante completo, de paragem por convergência, que fundamentaram e testaram devidamente.

Seja ζ_F o número de algarismos correctos que desejamos que tenha a função objectivo na solução $\bar{v}^*$, $F(\bar{v}^*)$, considerando, para este efeito, que os zeros a seguir à vírgula, no caso de $F(\bar{v}^*) < 1$, são algarismos significativos.

Seja ε_A um majorante do erro absoluto de $F(\bar{v}^*)$, erro resultante do cálculo envolvido e que nada tem a ver com a precisão dos dados, os quais, para este efeito, se devem considerar exactos.

Definamos

$$\theta_K = \zeta_F \ (1 + |F_K|)$$

O algoritmo deve, então, ser parado por ter convergido, se se verificarem simultaneamente na iteração K as 3 condições

$$(1) \quad F_{K-1} - F_K < \theta_K \qquad \text{ou} \quad F_{K-1} - F_K < \varepsilon_A \text{, se } \theta_K < \varepsilon_A$$

$$(2) \quad \|\overline{v}_{K-1} - \overline{v}_K\| < \sqrt{\zeta_F} \ (1 + \|\overline{v}_K\|) \tag{3.24}$$

$$(3) \quad \|\overline{g}_K\| < \sqrt[3]{\zeta_F} \ (1 + |F_K|)$$

ou se se verificar a condição

$$\|\overline{g}_K\| < \varepsilon_A \tag{3.25}$$

Com uma pequena variante introduzida nas condições (3)e(4) para facilidade de programação, a de substituir $\overline{g}_K$ por $\overline{g}_{K-1}$, o que não altera a filosofia geral do teste e é, até, mais exigente, o critério provou ser inteiramente satisfatório. Utilizaremos a norma euclidiana que os autores propõem para casos de poucos parâmetros, como o nosso, mas que não recomendam quando o número de parâmetros aumenta (por exemplo por consideração de terrenos com mais estratos) e que substituem então pela norma infinita.

O critério exige a definição de ζ_F e a avaliação de ε_A.

Não definiremos, directamente, ζ_F, *mas antes* θ_K. O nosso critério de aceitação duma solução é o de ela diferir as potências medidas das calculadas de menos de $p_r/10$, em termos relativos. Para sabermos se uma solução obtida é aceitável, temos de garantir que o algoritmo se prolongou o suficiente para verificar a aceitabilidade da solução, e até um pouco mais.

O critério de aceitabilidade pode escrever-se

$$|P_{m_i} - P_i| < p_r \, P_{m_i}/10 \qquad (i = 1, \ldots, n)$$

donde

$$F(\overline{v}^*) < \frac{1}{2} \frac{p_r^2}{100} \sum_{i=1}^{n} P_{m_i}^2$$

Consideremos, então, que uma condição necessária para paragem do algoritmo seja que a variação da função objectivo, de iteração para iteração, venha menor que um décimo deste majorante do valor mínimo aceitável para a função objectivo. Isto é, tomemos para condição

$$F_{K-1} - F_K < \frac{1}{2} \frac{p_r^2}{1000} \sum_{i=1}^{n} P_{m_i}^2$$

donde a definição de θ_K

$$\theta_K = \frac{1}{2} \frac{p_r^2}{1000} \sum_{i=1}^{n} P_{m_i}^2$$

e de ζ_F, que resulta variável de iteração para iteração,

$$\zeta_F = \frac{\theta_K}{1 + |F_K|}$$

Quanto ao ε_A, ele é um majorante do erro absoluto da função objectivo na solução. Uma vez que cada potência P_i é calculada com precisão $p_r/100$, o erro relativo de $P_{m_i} - P_i$ é majorado por

$$\frac{\frac{p_r}{100} P_i}{|P_{m_i} - P_i|}$$

e o erro absoluto de $(P_{m_i} - P_1)^2$ vem majorado por, a menos de termos de segunda ordem,

$$2 \frac{p_r}{100} P_i |P_{m_i} - P_i|$$

donde podemos concluir, se ΔF for o erro absoluto da função objectivo, que:

$$\Delta F < \frac{p_r}{100} \sum_{i=1}^{n} P_i |P_{m_i} - P_i| \qquad (3.26)$$

Naturalmente que nos interessa apenas majorar este erro já perto do mínimo. Ora, junto da solução,

$$|P_{m_i} - P_i| < \alpha \frac{p_r}{10} P_i, \quad \text{com } \alpha < 1$$

aceitando $P_i \simeq P_{m_i}$. Daqui resulta em 3.26

$$\varepsilon_A = \alpha \frac{p_r^2}{1000} \sum_{i=1}^{n} P_i^2 \qquad (3.27)$$

Vê-se que ε_A e θ_K têm a mesma ordem de grandeza e que, portanto, suficientemente perto da solução, podemos utilizar sempre θ_K. Longe da solução não é assim, o erro absoluto da função objectivo, 3.26, pode ser grande e a utilização de θ_K na condição (1) de 3.24 pode, acidentalmente, vir a satisfazê-la. No entanto, essa condição não é única, não é suficiente. As duas outras condições dão uma certa garantia, uma vez que estamos longe da solução, de que o algoritmo não pára então nessa situação. A única possibilidade de isso acontecer seria a de, eventualmente, existir, nessas circunstâncias, um mínimo local da função objectivo. Mesmo assim, o facto de ζ_F, que é utilizado nas duas outras condições, apresentar $|F_K|$ em denominador, e $|F_K|$ não tender para zero (situação do mínimo que nos interessa), pode tornar as duas condições tão exigentes que o algoritmo não pára.

A situação de ε_A e θ_K virem muito próximos, perto da solução, era de esperar e traduz afinal a justeza de avaliar as potências calculadas com a precisão utilizada. Essa precisão de $p_r/100$ garante, afinal, que é possível aproximar, a potência calculada da medida, a $p_r/10$, com segurança.

O critério utilizado mostrou-se, em suma, eficiente e dispensou a utilização de critérios mais elaborados adaptados aos problemas de mínimos quadrados, como os desenvolvidos por Dennis (1977) e Moré (1979).

3.3.6 Precisão da solução

A função objectivo tem um mínimo em $\bar{v}^*$. Mas o algoritmo é terminado na iteração K. É relativamente simples encontrar um majorante da distância entre $\bar{v}_K$ e $\bar{v}^*$, medida da precisão de cálculo de $\bar{v}^*$. Essa distância, obviamente, é limitada pelo erro introduzido no cálculo da função objectivo. De facto, se for ε_A o majorante do erro com que calculamos $F(\bar{v}_K)$, não conseguiremos obter um vector $\bar{v}_K$ melhor que o obtido se

$$|F(\bar{v}_K) - F(\bar{v}^*)| < \varepsilon_A \qquad (3.28)$$

Esta condição é, evidentemente, impossível de verificar e a que utilizamos como condição de paragem em 3.24 é

$$|F(\bar{v}_{K-1}) - F(\bar{v}_K)| < \varepsilon_A.$$

Desenvolvendo F em torno do mínimo, vem

$$F(\bar{v}_K) = F(\bar{v}^*) + \frac{1}{2} \|\bar{v}_K - \bar{v}^*\|^2 \; \bar{\xi}^T \; H(\bar{v}^*) \; \bar{\xi} + \ldots$$

uma vez que o gradiente é nulo em $\bar{v}^*$. $\bar{\xi}$ é um vector unitário com a direcção de $\bar{v}_K - \bar{v}_K^*$.

Resulta então

$$\left|F(\bar{v}_K) - F(\bar{v}^*)\right| \simeq \frac{1}{2} \|\bar{v}_K - \bar{v}^*\|^2 \; \left| \bar{\xi}^T \; H(\bar{v}^*) \; \bar{\xi} \right|$$

e, atendendo a que $H(\bar{v}^*)$ é definida positiva, ou $\bar{\xi}^T \; H(\bar{v}^*) \; \bar{\xi} > 0$, vem (Gill,

Murray e Wright, 1981, p. 302), supondo $\overline{v}_K$ uma solução que obedece a 3.28:

$$\|\overline{v}_K - \overline{v}^*\| < \frac{2\,\varepsilon_A}{\overline{\xi}^T H(\overline{v}^*)\overline{\xi}} \qquad (3.29)$$

Assim, a distância de $\overline{v}_K$ a $\overline{v}^*$, ou o erro de $\overline{v}_K$, depende da condição da matriz hesseana e da direcção de $\overline{v}_K - \overline{v}^*$. De facto, admitamos por um momento que $\overline{\xi}$ é um versor duma direcção de vector próprio, correspondente ao valor próprio θ, da matriz simétrica hesseana $H(\overline{v}^*)$. Então $H(\overline{v}^*)\ \overline{\xi} = \theta\overline{\xi}$ e $\overline{\xi}^T\ \theta\overline{\xi} = \theta$. Duma forma geral, se $\overline{\xi}$ for combinação linear de vectores próprios correspondentes a valores próprios elevados de $H(\overline{v}^*)$, o erro de $\overline{v}_K$ mantém-se baixo, mas, se a combinação corresponder a valores próprios baixos, o erro pode ser muito grande. Quanto maior a condição da matriz, de que o quociente entre o maior e menor valores próprios é uma medida, tanto mais pode variar o erro consoante a direcção $\overline{\xi}$ segundo a qual, eventualmente, a iteração se aproxima de $\overline{v}^*$.

Estamos a tratar o problema do erro da solução $\overline{v}_K$, em função do erro de cálculo das potências calculadas que determina ε_A. Encontrou-se assim a distância (ou um seu majorante) a que fica $\overline{v}_K$ de $\overline{v}^*$, onde se situa o mínimo de F definido com as potências medidas, tal como são, supostas sem erro. Mas imaginemos agora que fazemos uma perturbação ou introduzimos um erro nas potências medidas. Uma vez que $f_i = P_{m_i} - P_i$, ele pode ser momentaneamente encarado como um erro no cálculo de P_i. E, então, 3.29 confirma resultados da análise espectral da secção 3.3.3. Na verdade, $J^T(\overline{v}^*)\ J(\overline{v}^*)$ é uma aproximação de $H(\overline{v}^*)$ e os vectores de parâmetros da análise espectral, vectores coluna da matriz V da decomposição em valores singulares, são os vectores próprios de $J_K^T\ J_K$, que não diferirão muito dos de $J^T(\overline{v}^*)\ J(\overline{v}^*)$.

Já atrás se dizia que os parâmetros estruturais essencialmente determinados através de valores singulares baixos eram mal determinados e muito dependentes dos erros das potências medidas, enquanto que se os valores singulares, e portanto os valores próprios da hesseana aproximada, fossem altos, sucedia o contrário

Em 3.29 entra o erro absoluto da função objectivo, ε_A, dado por 3.27. Constatámos já que θ_K e ε_A estão intimamente relacionados, se quisermos desenvolver um algoritmo económico. Em princípio, encontrar uma solução mais precisa exigiria continuar a aproximar as potências medidas das calculadas para além de $p_r/10$. Dissemos atrás que uma tal atitude poucas mudanças significativas traz para a solução. Convém agora frisar que assim é, se a matriz hesseana for bem condicionada. Voltaremos na devida altura a esta questão da aproximação entre as potências medidas e as calculadas. Mas podemos, desde já, adiantar que a situação de mau condicionamento surge, regra geral, da utilização de medidas que procuramos evitar, precisamente por serem pouco informativas ou muito ruidosas. Mesmo assim, o algoritmo não está completamente desarmado perante situações destas. Na verdade, se o erro de $\bar{v}_K$ é ainda grande, é muito provável que $\|\bar{v}_{K-1} - \bar{v}_K\|$ o seja também. Então, ainda que $F_{K-1} - F_K < \theta_K$, o algoritmo pode não parar por não se verificar a condição (2) de 3.24. E se, por acaso, a situação assim o exigir, a condição (2) pode ser tornada mais restritiva. Convém, também, salientar que o mau condicionamento de que aqui se fala é o mau condicionamento da hesseana na solução. Hesseana que é, pelo menos no mínimo que procuramos, garantidamente não singular definida positiva. Tal situação não tem paralelo com a de mau condicionamento que pode surgir, ao longo das iterações e para modelos do terreno afastados do real, situação que o método de Marquardt resolve satisfatoriamente. Mas, se for necessário, o método pode, embora sem convergência qua-

drática, atingir a solução com $\lambda > 0$. Inclusivamente, para λ suficientemente grande, progride ao longo da direcção de máximo declive, direcção de descida garantida. Infelizmente, a definição da direcção do gradiente é feita através das potências e das derivadas e, portanto, sujeita a erros. Aí acaba, em última análise, a possibilidade de continuar a progressão para o mínimo.

3.3.7 Minimização em norma máxima

Definimos atrás os critérios de paragem por convergência com sucesso. O conceito assentava na verificação simultânea de dois tipos de condições. As de convergência do algoritmo para um mínimo, 3.24 e 3.25, e a desse mínimo ser aceitável, que se traduz na obrigatoriedade duma certa aproximação das potências medidas às calculadas. No entanto, nada impede que o algoritmo convirja para outro mínimo local que não seja aceitável. Eventualmente, esse mínimo pode ser (o que se conclui experimentalmente ser muito raro e só ocorrer em circunstâncias de pouco interesse prático) muito afastado do nosso mínimo pretendido. Abordaremos esse assunto na secção seguinte.

Mas pode ser, também, um mínimo relativamente próximo do pretendido. Já dissemos que o nosso problema de optimização é do tipo minimax, de minimização em norma máxima. Optou-se por tratá-lo como um problema de mínimos quadrados. Defendeu-se um método de medida no terreno que, fazendo variar as correntes injectadas ou, se preciso (por problemas de escala de leitura, por exemplo, ou de consumo de potência), as dimensões horizontais dos eléctrodos aparentes, tornasse as potências medidas da mesma ordem de grandeza, de

forma a aproximar os dois problemas. No entanto, não é de excluir que a minimização em norma quadrada possa, mesmo assim, encontrar um mínimo distinto do desejado, por redução muito forte de apenas um ou dois resíduos. Lawson e Hanson (1974) foram os primeiros a sugerir o método que aplicámos para resolver o problema.

A função que queremos de facto minimizar é

$$F_M = \max \{f_1(\bar{v}), \ldots, f_n(\bar{v})\}$$

e não

$$F = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} f_i^2(\bar{v})$$

Se a função objectivo F_M é nula na solução, a minimização dá o mesmo resultado se feita com F, a menos de mínimos locais. Se não é nula mas muito pequena, a possibilidade das duas soluções não serem idênticas é maior. A solução que adoptámos foi a de resolver, antes, uma sequência de problemas de mínimos quadrados pesados, com uma função objectivo da forma

$$F_j = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \omega_i^{(j)} f_i^2(\bar{v}) \qquad ,j = 1, 2, \ldots \qquad (3.30)$$

Cada problema dá uma solução $\bar{v}_K^{(j)}$ que é utilizada como hipótese inicial para o problema de ordem j + 1.

Os pesos iniciais são todos iguais:

$$\omega_i^{(1)} = 1/n \qquad ,i = 1, \ldots, n \tag{3.31}$$

E, se definirmos

$$S = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} f_i^2 \, (\bar{v}_K^{(j)}) \, \omega_i^{(j)} \quad ,$$

os pesos para o problema da ordem j + 1 vêm dados por

$$\omega_i^{(j+1)} = \frac{1}{S} \, f_i^2 \, (\bar{v}_K^{(j)}) \, \omega_i^{(j)}$$

o que garante que

$$\sum_{i=1}^{n} \omega_i^{(j+1)} = 1$$

Começamos, então, por resolver o problema de optimização que temos vindo a tratar, mas agora com a função objectivo dada por 3.30 com 3.31 e com θ_K definido em conformidade. Caso o algoritmo convirja para um mínimo aceitável, pára. Caso convirja para um mínimo inaceitável, redefine a função objectivo com novos pesos, de forma a procurar minimizar, prioritariamente, os resíduos altos, e resolve um novo problema de optimização. Repete o processo até atingir um mínimo aceitável, nos termos que temos vindo a definir.

3.3.8 Abortamento do algoritmo

Naturalmente que o algoritmo pode não conseguir terminar com sucesso.

Uma das razões pode ser a convergência para um mínimo local tão afastado do desejado e onde a função seja tão convexa que a técnica da sequência de funções objectivo pesadas não produza efeito, conduzindo antes a uma oscilação das soluções $\overline{v}_K^{(j)}$, por tentar minimizar prioritariamente ora uns, ora outros resíduos. Em princípio, a solução seria recomeçar as iterações de outra hipótese inicial, eventualmente adicionando à função objectivo uma função de penalização que assumisse valores suficientemente elevados nas coordenadas do mínimo indesejado, anteriormente encontrado. Este processo, dito de deflação, é no entanto perigoso porque pode sempre vir a mascarar, acidentalmente, o mínimo que nos interessa.

Outra razão de insucesso é a da direcção do gradiente ser mal definida. Na verdade, ainda que o método de optimização seja, teóricamente, globalmente convergente, na prática não o é. Primeiro, porque não faz uma pesquisa linear ao longo da direcção do gradiente e, apesar de algumas precauções que tomamos, como a de experimentar o passo natural ($\lambda = 1$) na direcção do máximo declive, o facto dos multiplicadores de λ serem constantes pode impedir o progresso. O remédio seria uma pesquisa linear mais exaustiva. Depois, porque o erro no cálculo das potências e derivadas pode invalidar a determinação da direcção do gradiente, como vimos. Haveria que aumentar a precisão de cálculo enquanto fosse possível e, eventualmente, escalar, cuidadosamente, derivadas e parâmetros. Mas a função objectivo pode, inclusive, encontrar-se numa zona onde seja impossível definir uma direcção apropriada para continuação, num patamar onde o gradiente é nulo, a hesseana singular e a aproximação das potências medidas às calculadas inaceitável. Aqui também o algoritmo teria de ser recomeçado.

Finalmente, pode não existir o mínimo que procuramos. O que é um argumento definitivo. Se houvesse a garantia da sua existência, ele seria seguramente encontrável, dentro dos limites impostos pela aritmética finita do computador, quanto mais não fosse por métodos do tipo Monte-Carlo. Mas ele pode não existir. Adiántamos no capítulo anterior que, respeitadas certas regras simples na escolha das medidas a utilizar na optimização, existe sempre, pelo menos, um conjunto de parâmetros que aproximam as potências, com eles calculadas, a menos de p_r, em termos relativos, das medidas. No capítulo seguinte especificaremos essas regras e veremos que, embora utilizando regras não tão claras como as anteriores, é também possível garantir, por bom condicionamento do problema, aproximações a meros de $p_r/10$. Mas uma má aplicação dessas regras ou a sua inaplicabilidade podem conduzir a que não haja solução.

Mesmo assim poderíamos ser levados a tentar munir o algoritmo de algumas das armas acima expostas para ultrapassagem das dificuldades apontadas. Não o fazemos porque as situações em que ocorrem são para nós desinteressantes ou não justificam o esforço. Temos vindo a falar ao longo deste capítulo de situações bem comportadas ou realistas, situações em que o algoritmo se mostrou eficiente, em oposição a outras, anómalas, que, ou procuramos evitar, ou fornecem soluções inverosímeis, e são, portanto, detectáveis como desinteressantes. Estes conceitos, no fundo relacionados com o *condicionamento do problema*, mais lato que o condicionamento das matrizes utilizadas, serão precisados, na medida do possível, no próximo capítulo. Veremos que é possível, em parte, mantermo-nos dentro do espaço das situações bem comportadas, escolhendo criteriosamente as medidas utilizadas para a optimização, e essa preocupação determina grandemente a estratégia de inversão utilizada. Mas

isto exige uma condição, a de a hipótese inicial para a inversão não ser muito afastada da verdadeira estrutura do terreno. Ou, no caso de o ser, o método ter uma descida suave, por exemplo forçando λ a manter-se com valores elevados, de forma a tentar não cair em situações de difícil tratamento. Dentro da nossa estratégia global, a assunção de hipóteses iniciais é exigida muito raramente. De modo que acaba por resultar económico tratar as situações anómalas que surjam, ou alterando a hipótese inicial, se for esse o caso, ou considerando as medidas utilizadas como impróprias e desinteressantes para o processo global de inversão.

Isso exige, no entanto, a introdução de critérios que permitam abortar o algoritmo, para além dos de simples análise da sua evolução, algo falíveis, passíveis de atrasar o seu desenrolar e impondo a vigilância constante do utilizador.

Um dos critérios de abortamento do algoritmo adoptados é o de uma condição demasiado alta do jacobiano, não porque o algoritmo seja, por si, incapaz de a tratar, como ficou dito na secção 3.3.3, mas porque corresponde, por via da regra, a uma das tais situações que detectam limites da estratégia global de inversão.

Outro dos critérios foi o de não prolongar inutilmente a pesquisa ao longo da direcção de máximo declive. Como se viu na secção 3.3.3, o algoritmo, ao atingir essa direcção, define o passo como sendo o passo natural da descida ao longo dela, isto é, encontrando-se nessa direcção, faz, para todos os efeitos, $\lambda = 1$. A partir daí, se a função objectivo não diminui, vai dividindo o passo. Assentou-se, então, em não prolongar a redução do passo para além de um limite aceitável. Mesmo porque, se eventualmente a direcção estiver bem calculada, a convergência da função na zona dá todos os sinais

de vir a ser muito lenta, aconselhando, antes, uma redefinição estratégica.

Finalmente, como é de regra, é útil impor um certo número de iterações como limite. Nenhum algoritmo, para além de todas as considerações feitas, está livre de, numa súbita e imprevista combinação de efeitos, ser vítima duma instabilidade numérica que o desvirtue. O máximo que se pode garantir é uma fraca probabilidade de isso vir a acontecer. Além do mais, até as situações de convergência muito lenta, como foi dito acima, podem ser, às vezes, melhor ultrapassadas com a escolha de novas medidas ou de novas hipóteses iniciais, enfim com uma alteração de procedimento global. Mesmo com $\lambda = 0$, isto é, mesmo ao longo de direcções de Newton, a convergência pode ser lenta. O tamanho da vizinhança do mínimo onde a convergência é quadrática diminui com o aumento da condição da hesseana no mesmo mínimo (Gill, Murray e Wright, 1981, p. 330). O limite de iterações adoptado depende, como seria preciso, do número de equações, n.

Os limites envolvidos nestes critérios foram definidos por via experimental e serão apresentados oportunamente.

3.3.9 Outros métodos

O problema que procuramos resolver é um problema de mínimos quadrados não lineares. A filosofia geral de resolução utilizada é, mais ou menos, clássica para este tipo de problemas, sobretudo quando, como é o caso, a obtenção de segundas derivadas das funções resíduos é penosa, mas a das primeiras derivadas não o é em demasia. Consiste na aplicação duma modificação do método de Gauss - Newton, aqui a variante de Levenberg-Marquardt, que não é mais que o método de Newton-Raphson com a hesseana aproximada por $J_K^T J_K$. Outras vari-

antes seriam possíveis, embora a utilizada seja considerada "veículo para todo o terreno", dentro dos métodos de optimização. Dificuldades podem, todavia, aparecer, se se pretender abordar a inversão de terrenos com mais estratos. Essas dificuldades relacionam-se, principalmente, com o aumento do número de equações, que pode tornar a resolução dos sucessivos sistemas de iterações extremamente pesada, via decomposição singular, e com a crescente complexidade e esforço computacional exigidos pelo cálculo das derivadas. Como se definiu em capítulo anterior, não constitui objectivo deste trabalho a obtenção dum programa compacto e optimizado para inversão de estruturas estratificadas, mas tão só o desenvolvimento eficiente dum programa de inversão que explore algumas das potencialidades, em velocidade e capacidade de memória, dos computadores actuais e produza, simultaneamente, o máximo de informação complementar que permita ajuizar das potencialidades da estratégia proposta. No entanto, não está fora do seu âmbito a reflexão sobre alterações possíveis de tornear dificuldades que possam vir a surgir, numa sua versão futura mais ambiciosa.

A decomposição em valores singulares é um dos procedimentos instalados que pode trazer, no caso de alargamento do número de estratos considerados, mais esforço e morosidade do que os que, por outro lado, por exemplo no controlo de λ, elimina. Consegue, porém, produzir informação suplementar como a dada pela análise espectral. Estratégias cuidadas de inversão podem dispensar essa informação. Se esse for o caso e se o número de estratos, número de equações, o exigir, ele pode ser substituído, vantajosamente, por outras técnicas, em particular outras decomposições mais económicas da matriz envolvida, como a de Cholesky. Ainda não há muito tempo, Gill e Murray (1974) propuseram uma factorização de Cholesky modificada que per-

mite abordar matrizes não definidas positivas e, portanto, ultrapassar os problemas criados por uma hesseana que não tenha tal propriedade ou, alternativamente, alertar para a necessidade de aumento de λ, na eventualidade de utilização da variante de Levenberg-Marquardt (Nash, 1977, p. 175-177).

Uma das maneiras de resolver problemas criados pela complexidade das derivadas é substituí-las por avaliações obtidas por diferenças finitas. No entanto, exige-se uma determinação algo rigorosa do intervalo a utilizar na avaliação. Um método do tipo Newton, utilizando diferenças finitas para avaliação quer do gradiente, quer da hesseana duma função objectivo geral pode encontrar-se, por exemplo, em Mifflin (1975). A desvantagem que constitui o preço da eliminação do cálculo das derivadas, é, obviamente, o de aumentar o número de avaliações da função objectivo. Surpreendentemente, a substituição de derivadas pelas suas aproximações por diferenças finitas revela-se mais eficiente nos métodos quase-Newton ou de métrica variável que são, fundamentalmente, métodos que utilizam uma aproximação da hesseana, actualizada, por regra, recursivamente ao longo das iterações, e que retém alguma informação sobre a curvatura da função por análise do seu comportamento e do seu gradiente durante iterações imediatamente anteriores. O mais largamente utilizado dos métodos quase-Newton, para uma função objectivo qualquer, é o chamado algoritmo DFP (Davidon-Fletcher-Powell) que é um desenvolvimento devido a Fletcher e Powell (1963) dum primeiro algoritmo de Davidon (1959), o primeiro do género, aliás. Esse algoritmo tem vindo a ser sucessivamente melhorado e fundamentado com contribuições de Broyden (1967, 1970), Shanno (1970), Fletcher (1970), Powell (1971), Gill e Murray (1972) e outros. Muitos outros autores desenvolveram novos métodos. No caso específico dos mínimos quadrados, existe um outro tipo de métodos quase-Newton que aproxima e

actualiza a diferença entre a verdadeira hesseana e a sua aproximação $J_K^T J_K$. Estes métodos, úteis sobretudo no caso dos resíduos no mínimo terem valores não desprezáveis, não mantêm algumas propriedades dos seus equivalentes no caso geral. É, por exemplo, difícil garantir que as sucessivas actualizações da hesseana sejam hereditariamente definidas positivas. Dennis (1973), Betts (1976), Dennis, Gay e Welsch (1977) e Gill e Murray (1978) desenvolveram métodos quase Newton para mínimos quadrados não lineares. Powell (1965) apresentou um método, chamado de mínimos quadrados sem derivadas, que Adby e Dempster (1974) sustentaram ser tão eficiente quanto o método corrente. Sabe-se também a importância que tem o escalamento, quer da matriz, quer dos parâmetros, na procura eficaz duma solução. Marquardt sugere, na sua variante, a utilização de um escalamento, aliás simples. No entanto, o assunto não é pacífico, particularmente quando se enfrentam problemas mal condicionados com a decomposição em valores singulares (Golub e Varah, 1974).

O próprio cálculo das derivadas, bem como o das potências, ainda que estas exijam maior precisão, pode ser feito, de forma, nalguns casos, talvez mais económica, por integração numérica do integral de Stefanesco, entre zeros das funções de Bessel. Também aqui o tema é controverso. Inman (1975) utilizou esse processo no seu trabalho, acompanhado de transformações de Euler na aceleração da série resultante. Relatou não ter precisado de considerar mais de trinta zeros das funções de Bessel nos casos que tratou e que o processo é mais rápido do que as séries desenvolvidas por Mooney et al. (1966), particularmente se o número de estratos for superior a quatro. No entanto, exactamente no trabalho citado, de Mooney et al., é referido que a integração numérica, efectuada pelo método de Romberg (1955), apresenta dificuldades devidas ao carácter altamente oscilatório das funções de Bessel, quando as distâncias

interelectródicas se tornam muito grandes. A nossa experiência, com as nossas séries, que não são as de Mooney et al., é que, justamente aí, nos surgem, também, dificuldades. Saliente-se, entretanto, que num problema análogo, resultante de inversão de terrenos estratificados mas com eléctrodos lineares, de que daremos notícia em anexo, implementámos uma integração numérica com sucesso. Mas as funções envolvidas não eram funções de Bessel mas, basicamente, sinusóides.

Finalmente, importa referir uma variante do método de Gauss-Newton que implementâmos, mas que não vem detalhada neste trabalho. A direcção de descida é a de Newton mas o passo vem multiplicado por um factor λ_K. Trata-se, pois, dum método amortecido. O parâmetro de amortecimento é determinado por pesquisa linear de mínimo ao longo da direcção, de acordo com princípios desenvolvidos por Stoer e Bulirsch (1980, p. 256-266). O método, embora sem as potencialidades do de Levenberg-Marquardt, revelou-se igualmente eficiente, no caso da matriz ser razoavelmente condicionada.

D'abord il s'y prit mal, puis un peu mieux, puis bien;

puis enfin il n'y manqua rien

La Fontaine, 1621-1695

Le loup et le renard

CAPÍTULO IV

CURVAS DE PARÂMETROS APARENTES.
INTERPRETAÇÃO E TRATAMENTO ESTATÍSTICO

4.1 Introdução

A inversão de terrenos estratificados horizontais tem-se baseado, até hoje, no estudo das curvas de resistividade aparente, curvas do único parâmetro aparente do modelo de terreno homogéneo. No segundo capítulo apresentámos uma resenha de alguns dos métodos existentes.

A velocidade e capacidade dos computadores modernos permite abordar a inversão de um terreno por estudo de curvas de parâmetros aparentes de modelos mais complexos, modelos de um, dois e mais estratos. Será esse o tema deste capítulo.

O conceito de curvas de parâmetros aparentes, de modelos diferentes do modelo homogéneo, é, tanto quanto sabemos, inteiramente novo e constitui a chave conceptual de toda a metodologia de interpretação que propomos.

4.2 Curvas de parâmetro aparente e estratégia geral de interpretação

4.2.1 Escolha de medidas

A curva de resistividades homogéneas aparentes é definida univocamente pelo lote de medidas. A cada medida, independentemente do seu erro, corresponde uma resistividade homogénea aparente. Faz então sentido construir colecções de curvas de resistividadas homogéneas aparentes, obtidas simulando medidas sem erro sobre diferentes tipos hipotéticos de terrenos. Essas colecções são utilizadas para comparação nalguns dos métodos de que se falou no segundo capítulo.

Não é assim se quisermos definir curvas de parâmetros aparentes de modelos mais complexos. Isto porque, se o modelo utilizado for de V_a estra-

tos, o número de parâmetros aparentes que comporta é de $n = 2 V_a + 1$, e o número de equações e de medidas necessárias para os definir será também n. Há, portanto, que escolher essas medidas.

Existe uma outra grande diferença entre curvas de modelos homogéneos e não homogéneos. É que a resistividade aparente do modelo homogéneo é determinada, a partir da medida que se queira, com erro relativo menor ou igual ao da medida, supondo que distâncias e correntes são medidas sem erro, ou, por outras palavras, supondo que o erro relativo da potência medida devido a causas geofísicas (conceito que precisaremos na secção seguinte) é suficientemente superior ao introduzido pelo erro relativo na medição de distâncias e correntes. Ao contrário, como vimos no capítulo anterior, *a precisão de cálculo dos parâmetros aparentes de modelos não homogéneos depende da condição do jacobiano constituído pelas derivadas das potências em ordem aos parâmetros na solução, J* $(\bar{v}^*)$.

O que caracteriza a curva de resistividades homogéneas aparentes é a definição do parâmetro à medida que se percorre o lote de medidas, isto é, a variação do parâmetro com a distância interelectródica. Naturalmente que, quanto maior é a distância interelectródica, tanto mais fundo penetra a corrente injectada e, portanto, maior é a informação conservada na medida sobre as camadas profundas do terreno. Essa informação, porém, *só resulta extraível se for comparada essa medida com outras correspondentes a distâncias interelectródicas diferentes*, e daí a utilidade do traçado da curva.

A cada distância interelectródica parece corresponder uma profundidade, chamada profundidade de investigação (Evjen, 1930), onde uma estreita espessura de terreno contribui de forma máxima para a definição da medida da resistividade aparente. A mesma espessura, abaixo ou acima dessa profun-

didade dá menor contribuição. Roy e Apparao (1971) determinaram alguns valores de profundidades de investigação para terrenos homogéneos e até de um estrato, e para diferentes configurações electródicas. Há, no entanto, alguma controvérsia sobre estes resultados (Guptasarma, 1981, Roy, 1981, Apparao, 1981, Guerreiro, 1983, Roy, 1983, Parasnis, 1984, Roy, 1984). Todavia, vários outros estudos sobre profundidades de investigação de diferentes configurações electródicas em diferentes tipos de terrenos têm vindo a ser efectuados por muitos autores, sobretudo da escola indiana. Saliente-se, de passagem, que *profundidade de investigação* é um conceito diferente do de *profundidade de penetração* da corrente (Muskatt e Evinger, 1941), o que vem trazendo alguma confusão à discussão.

Não é possível transpor noções assim tão claras para as curvas de modelos não homogéneos. Efectivamente, para modelos mais complexos que o homogéneo, é possível traçar uma grande diversidade de curvas de parâmetros aparentes, pois que os parâmetros são determinados a partir de n medidas. Para mantermos o princípio de que os parâmetros aparentes surjam numa curva em função das distâncias interectródicas é necessário, naturalmente, que, pelo menos, uma das medidas utilizadas seja variável ou flutuante, percorrendo todo o lote de que se dispõe. E a primeira solução que ocorre é mesmo a de tomar todas as medidas variáveis. Os parâmetros correspondentes a um determinado modelo seriam então determinados a partir das n medidas de maior distância interelectródica, do fim do lote, e depois a partir de grupos de n medidas correspondentes a distâncias sucessivamente menores. Mas um processo como este depara com grandes dificuldades. Na verdade, sabe-se que quanto mais próximo de singular for o jacobiano (ou quanto maior for a sua condição) tanto maior o erro na estimação dos parâmetros e tanto mais difícil e moroso o processo de optimização estudado no capítulo anterior.

Ora, quanto mais próximas entre si as medidas utilizadas, tanto mais próximas as derivadas nos parâmetros, ou, pelo menos, tanto mais linearmente dependentes. Assim, *este processo de considerar sempre n medidas muito vizinhas favorece a ocorrência de situações de muito mau condicionamento do jacobiano*. Entretanto, e como é óbvio, tomar um certo número de medidas variável e outro fixo pode tornar a interpretação ambígua.

Verificou-se que a *solução de variar apenas uma medida ao longo do lote produz uma curva de interpretação clara e de fácil cálculo, desde que haja algum cuidado na escolha das medidas fixas*. O que ocorre imediatamente é escolher para *medidas fixas* as de menor distância interelectródica possível, para permitir uma mais ampla variabilidade da *flutuante*. Porque as situações diferem um pouco, vejamos em separado os casos da inversão de um terreno de um estrato e de dois, atendendo a que o tratamento de terrenos de mais estratos não traz novidades teóricas.

Suponhamos, então, obtida a curva das resistividades aparentes de modelo homogéneo. Se essas resistividades forem todas iguais, dentro de critérios de tolerância que os erros das medidas impõem e que detalharemos posteriormente, o terreno é considerado homogéneo.

Se não for esse o caso, torna-se necessário escolher as medidas fixas para o traçado de curvas de parâmetros aparentes do modelo de um estrato. *Nada impede que se tome como uma das medidas fixas a primeira medida do lote*, dentro da regra de escolher medidas correspondentes às menores distâncias interelectródicas possíveis. Eventualmente, essa primeira medida pode não "ver" o substrato, isto é, pode "ter" derivadas nulas em ordem a h_1 e r_2. Mais precisamente, pode ser insensível a relativamente grandes variações de h_1 e r_2 em torno dos valores reais do terreno. Mas a 2.ª medida fixa

a escolher já não pode estar nas mesmas circunstâncias, caso contrário o jacobiano tenderia a singularizar-se. *Para a 2ª medida fixa temos, então, que tomar uma medida à qual corresponda uma resistividade aparente de modelo homogéneo claramente diferente da obtida a partir da 1ª medida. Interessa-nos que seja a primeira medida em que essa diferença seja visível, para permitir uma maior excursão da medida móvel ou flutuante.*

Mas pode haver inconvenientes em que o seja, porque pode ser tão próxima da primeira que as derivadas venham proporcionais e, portanto, o jacobiano singular ou, pelo menos, muito mal condicionado. Essa situação pode ocorrer, sobretudo, *quando é logo a segunda do lote a produzir*, de acordo com critérios de comparação que tomam em consideração os erros das medidas, *uma resistividade homogénea aparente diferente da produzida pela primeira.* Não há então garantia de que a 1ª medida não "veja" já o substrato. Por outro lado, é preciso não esquecer que apenas se dispõe duma hipótese inicial para os parâmetros do terreno, uma "guess", e que a 2ª medida fixa escolhida pode não "ver" o substrato desse modelo inicial. Em lugar de tentar então, penosamente, trabalhar com esse modelo inicial, valerá mais a pena escolher 3 medidas espalhadas ao longo do lote, numa tentativa de garantir bom condicionamento do jacobiano nas iterações iniciais, e reduzir assim a hipótese inicial a outra mais realista. Ou, eventualmente, calcular para o modelo inicial uma curva de resistividadesaparentes homogéneas e escolher uma 2ª medida, para começar, que "veja" o substrato real e que devesse "ver" o substrato do modelo inicial. Anote-se que, quando se fala aqui de substrato, quer-se referir tudo o que está abaixo de h_1, pois não se sabe se o terreno tem muitos mais estratos ou se é satisfeito pelo modelo de um estrato. Saliente-se que um bom condicionamento nas iterações iniciais não garante um bom con-

dicionamento na solução. De modo que, reduzida, se necessário, a hipótese inicial, retoma-se, para segunda medida fixa, a previamente escolhida.

Quanto à terceira medida a utilizar, ela variará desde a medida do fim do lote até à de menor distância interelectródica a que corresponda ainda bom condicionamento, pois, à medida que se recua, o condicionamento vai piorando.

Na realidade, o *problema que se procura resolver é um problema de estimação não linear dos parâmetros*. É proposto um modelo, isto é, uma equação que exprime as potências como funções não lineares das distâncias interelectródicas, correntes injectadas e dimensões horizontais de eléctrodos, e de n parâmetros. As medidas das potências têm erro que supomos inferior, em termos relativos, a p_r. Supomos possível encontrar, e veremos mais tarde porquê, um vector de parâmetros que satisfaz as medidas a menos de p_r. A cada vector de parâmetros corresponde uma curva constituída pelos valores das potências, calculadas pela equação do modelo com esses parâmetros, para diferentes distâncias interelectródicas. Entretanto, o que vamos procurar é um vector de parâmetros que satisfaça exactamente as n medidas, com o erro que têm, o que é equivalente a definir resistividades homogéneas aparentes a partir de cada medida, com o seu erro. O satisfazer exactamente é virtualmente impossível e desnecessariamente moroso. Resolveu-se aceitar uma aproximação a menos de $p_r/10$, admitindo que os parâmetros vêm, assim, suficientemente determinados pelas medidas reais utilizadas (o erro daí resultante é suficientemente menor que o erro "estatístico" que trataremos neste capítulo), e constatou-se que de facto vêm, a menos de muito maus condicionamentos.

Vejamos com mais pormenor o que acontece quando se procede ao recuo da última, neste caso terceira, medida. Já vimos que, a partir dos parâmetros estimados com 3 medidas reais, definimos, pela equação do modelo, uma curva de potências. Pensemos, não nesse conjunto de 3 medidas reais, mas em todos os conjuntos que se poderiam obter variando cada medida real em torno da medida sem erro e nos limites que este impõe. E pensemos nas curvas de potências que seriam, então, definidas. Se as distâncias interelectródicas forem suficientemente afastadas, as curvas são próximas e os parâmetros que as definiram também. Se as distâncias se tornam mais próximas, isto é, quando se processa o recuo, já as curvas vêm muito díspares, sinal de que os parâmetros estimados por cada conjunto de medidas são muito diferentes. A condição do jacobiano aumenta e o erro com que são estimados os parâmetros também. Finalmente, quando se recua ainda mais, surgem combinações de medidas que não podem ser aproximadas a menos de $p_r/10$. A potência não pode, por exemplo, decrescer subitamente para logo a seguir voltar a crescer. Há uma curva a menos de p_r, e certamente mais do que uma. Na situação limite de se tomarem 3 medidas à mesma distância interelectródica, haverá uma infinidade de curvas possíveis a menos de p_r. Mas pode não haver nenhuma a menos de $p_r/10$, e o mais certo é não haver mesmo.

Naturalmente que essa situação não nos interessa, porque não nos dá informação suficiente sobre o terreno. Três medidas à mesma distância interelectródica vêem o terreno até à mesma profundidade. Se forem feitas a distâncias interelectródicas muito próximas entre si, veiculam muito pouca informação acessível. Os parâmetros ficariam definidos, prioritariamente e fortemente, pelo ruído, ao qual pode corresponder uma situação física impossível. *Não nos é útil, naturalmente, definir parâmetros baseados apenas no*

ruído introduzido pelo erro das medições, mesmo que isso seja algoritmicamente possível. É nesse sentido que falámos, ao longo de todo o capítulo anterior, em situações sensatas ou realistas e situações que não nos interessam. O mau condicionamento do jacobiano tem aqui, a maior parte das vezes, um significado físico claro. Ele surge, ou porque as medidas não vêem um ou mais parâmetros, não encerram informação sobre eles, ou porque as derivadas são quase proporcionais, conduzindo a linhas do jacobiano linearmente dependentes, o que traduz que as medidas são redundantes, veiculam a mesma informação sobre o terreno, informação que não é, então, extraível. Em qualquer dos casos, pode-se encontrar um vector de parâmetros que dê n potências a menos de p_r das n medidas, pode-se até eventualmente encontrar mais doque um vector de parâmetros, o que significa que deixa de haver um vector univocamente definido. Aproximar mais não faz qualquer sentido ou é de todo impossível.

Obviamente que o facto de não podermos prolongar o recuo até zonas de muito mau condicionamento pode levar-nos a considerar como terreno de um estrato um terreno na realidade de dois estratos, mas em que o segundo é muito estreito, situado a pouca profundidade e pouco contrastante, ou com o primeiro, ou com o substrato. Isso é apenas natural. *O poder de resolução do nosso sistema de leitura do terreno é condicionado pelo ruído introduzido pelos erros das medidas.* E, também, pelas características do terreno. Logicamente, se no terreno existir um estrato que seja um condutor ou um isolante perfeito, a leitura abaixo desse estrato é impossível.

Obtidas as curvas dos parâmetros aparentes do modelo de um estrato, importa verificar se, dentro de critérios estatísticos a definir, os parâmetros se podem ou não considerar constantes. Admitamos que concluíamos que

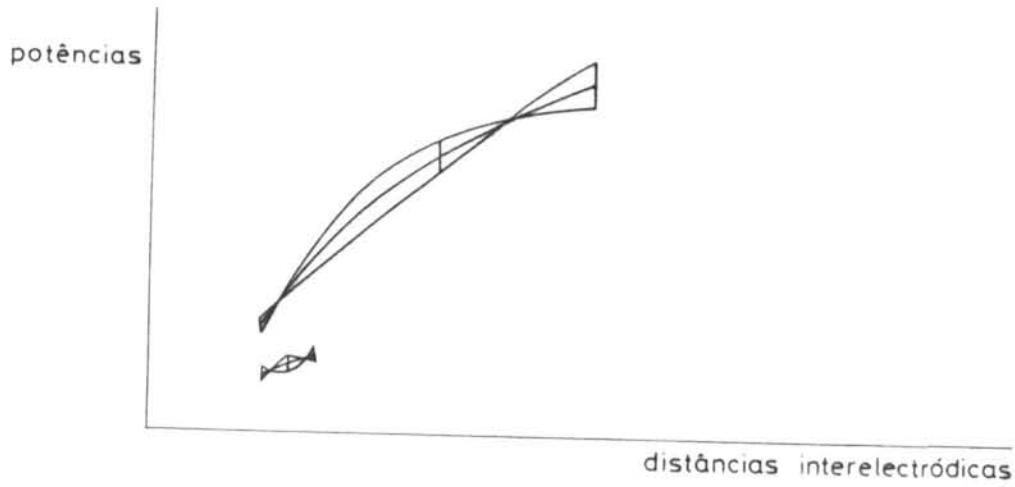


Figura IV-1 - Para cada distância interelectródica é apresentado um suposto intervalo possível de variação de potência mensurável, obtido somando erros relativos menores que p_r à potência exacta definida pelo terreno. Não se procurou injectar correntes de forma às potências virem da mesma ordem de grandeza, para a figura resultar explícita. Desenham-se também três curvas possíveis construídas com os parâmetros estimados por três combinações de três medidas. Não terão todas significado físico. A curva que une os centros dos intervalos é a que corresponde a medidas exactas.

o terreno não era de um estrato.

O esquema de ensaio do modelo de 2 estratos é, fundamentalmente, igual ao do modelo de um estrato. A última medida, a 5ª., será a única flutuante e é recuada, ao longo do lote, de modo a desenhar as curvas de parâmetros aparentes que nos interessam. A 4ª. medida será a primeira que se revelou incompatível com a hipótese de um estrato, a primeira que detectou a existên-

cia duma terceira resistividade, naturalmente com as ressalvas apontadas em situação idêntica no ensaio de um estrato. Quanto às 3 primeiras medidas, elas agora podem ser mais bem escolhidas. Podem inclusivamente escolher-se experimentalmente, de modo a condicionar bem o problema, para o que basta estudar as diferentes situações quando a 5ª medida é a do fim do lote ou próxima. No entanto, a análise das curvas de um estrato permite fazer, a priori, uma boa escolha. Em princípio as medidas devem ser suficientemente espaçadas e convém que duas delas, pelo menos, vejam o 2º estrato. Veremos com mais pormenor, com exemplos concretos, traçados de curvas de 2 estratos (ver também 4.8.1).

A continuação da análise para modelos mais complexos não traz situações novas, a não ser a dificuldade crescente de interpretação, sobretudo se o terreno tiver estratos muito estreitos, o que é de esperar e comum aos métodos existentes.

4.2.2 Condições necessárias para o traçado das curvas de parâmetros aparentes

As curvas de parâmetros aparentes correspondentes a um determinado modelo podem ser, praticamente, impossíveis de traçar. De facto, não se pode garantir que, retirando n medidas, para definir n parâmetros que um modelo comporte, dum terreno de mais estratos reais do que os que o modelo supõe, seja sempre possível obter esses parâmetros de forma a que as potências calculadas e medidas difiram, em termos relativos, menos do que p_r. Mas, e isso constitui uma aptidão especial do método, o algoritmo de optimização, através da definição clara dos seus critérios de sucesso ou aborto, conjugado com a estratégia de inversão utilizada, permite imediatamente recusar o modelo, a única

desvantagem consistindo em que as medidas a utilizar para o modelo seguinte terão que ser escolhidas a partir do modelo anterior ao recusado (anterior e seguinte em termos de número de estratos propostos). Veremos, à frente, que isso é possível, embora de forma menos eficiente.

De facto, a estratégia propõe, para o traçado das curvas, que se comece com a medida móvel no fim do lote, portanto numa zona de bom condicionamento. O que acontece se o modelo em teste não representar o terreno nem puder ser determinado em termos da aproximação desejada entre potências calculada e medida? *O algoritmo vai abortar, em zona de bom condicionamento, não porque deixe de convergir, mas porque converge para um mínimo que não permite atingir essas aproximações*. Este tipo de comportamento verificou-se em todos os casos que experimentámos. É certo que se pode tratar de um acidente, isto é, duma situação normal em que o algoritmo convergiu para um mínimo local, existindo todavia outro mínimo algures capaz de satisfazer as aproximações pretendidas. Tratar-se-ia então dum problema ligado à hipótese inicial de partida utilizada. É sempre possível constatar que o mínimo é robusto, quer tentando novas hipóteses de partida, quer forçando o algoritmo, através do sistema de pesos descrito no capítulo anterior, a procurar outro mínimo. A confirmação da situação pode ser adquirida tentando o recuo e verificando, logo para as medidas móveis seguintes, que o comportamento do algoritmo se repete. Mas nos casos que vimos bastou uma optimização para estabelecer a conclusão.

Para compreendermos inteiramente a questão, abordemos os terrenos de dois estratos e, mais propriamente, para começar, ainda que com ligeireza, o chamado exemplo de Inman (1975) que, por ser já clássico no estudo de métodos de mínimos quadrados e por estar suficientemente documentado para per-

mitir comparações, será tratado de forma mais completa no capítulo seguinte. Desse exemplo apresentamos nas Figuras IV-2 uma colecção de curvas de parâmetros aparentes de modelos de 0, 1 e 2 estratos.

Inman, no estudo do exemplo que ele próprio apresentou, simulou medidas a distâncias interelectródicas maiores. A última medida que considerou supunha-se feita a uma distância entre eléctrodos de corrente de cerca de 10000m. O que acontece se considerarmos no nosso lote, que, como o leitor pode constatar nas Figuras IV-2, tem uma última medida a cerca de 5500 m, uma medida, por exemplo, a 6500 m e tentarmos obter os parâmetros aparentes de um estrato com o conjunto formado por essa medida móvel e pelas medidas fixas I-1 e I-2 com que traçámos as curvas das Figuras IV-2 D, E e F? A experiência foi feita e verificou-se que o algoritmo abortava sistematicamente, com bom condicionamento na solução, encontrando um mínimo que não satisfazia as aproximações exigidas e determinava os parâmetros r_1 e t_1 muito próximos de zero e r_2 muito próximo de 10Ωm.

Se atendermos à curva de resistividade aparente homogénea, verificamos que a essa distância interelectródica a curva se aproxima de 10Ωm, resistividade real do substrato. É, aliás, bem conhecido que as curvas de resistividade aparente, aqui com a designação de homogéneas, têm por assímptota, quando a distância interelectródica aumenta, a resistividade do substrato. Para todos os efeitos, a partir daí, o terreno passa a ser visto como homogéneo. Como, entretanto, as duas medidas primeiras, as fixas, e mais a primeira, "vêem" sobretudo (são maioritariamente determinadas por) a resistividade superficial que, aqui, é, casualmente, igual à do substrato, o algoritmo tende então a identificar o terreno como homogéneo, anulando os parâmetros dum primeiro estrato superficial. Como, porém, e apesar de tudo, a se-

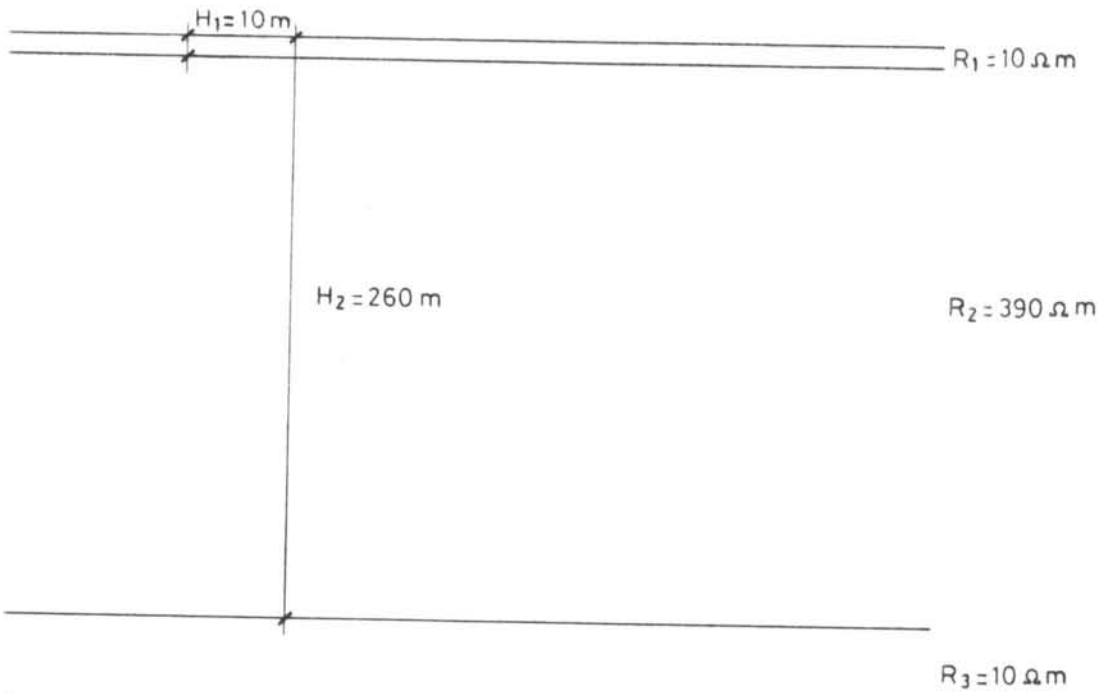


Figura IV-2A - Hipotético terreno de 2 estratos considerado pela primeira vez num trabalho de Inman (1975). Dispôs-se de um lote de 29 medidas de potência simuladas, em configuração de Schlumberger, com erro relativo aleatório inferior a .02, e efectuadas a distâncias interelectródicas próximas das propostas por Inman. As correntes injectadas simuladas são tais que as medidas das potências vêm da ordem de .69 mW. Para "guesses" de H_1, R_2, H_2 e R_3, quando necessárias, utilizaram-se as de Inman, 15 m, 500 Ωm, 150 m, 5 Ωm. Este exemplo será abordado com mais detalhe no capítulo seguinte, junto com os programas utilizados. Curvas de parâmetros aparentes e a condição dos jacobianos envolvidos são apresentadas nas Fig. IV-2B, C, D, E, F, G, H, I, J, L, M, N. Nas figuras referidas, sempre que for caso disso, é marcado o verdadeiro valor do parâmetro a que a curva diz respeito. Também, onde quer que surjam, assinalamos as medidas fixas utilizadas na obtenção das curvas. I-1 e I-2 designam as medidas fixas do modelo I e II-1, II-2, II-3 e II-4 as do modelo II. Em abcissas estão as distâncias interelectródicas da medida móvel. Nas figuras representam-se ainda, a tracejado e com índice superior + e -, as curvas obtidas somando e subtraindo a cada parâmetro aparente dos modelos de 1 e 2 estratos o respectivo desvio padrão aproximado, obtido utilizando a expressão 4.8 (ver à frente secção 4.5). Representam-se ainda a traço ponto e com índice superior 1, nas mesmas circunstâncias (mesmo erro relativo, distâncias interelectródicas e medidas fixas), as curvas de um estrato do terreno: R_1 = 10 Ωm, H_1 = 10 m, R_2 = 390 Ωm. A respectiva curva de resistividades aparentes homogéneas não foi desenhada.

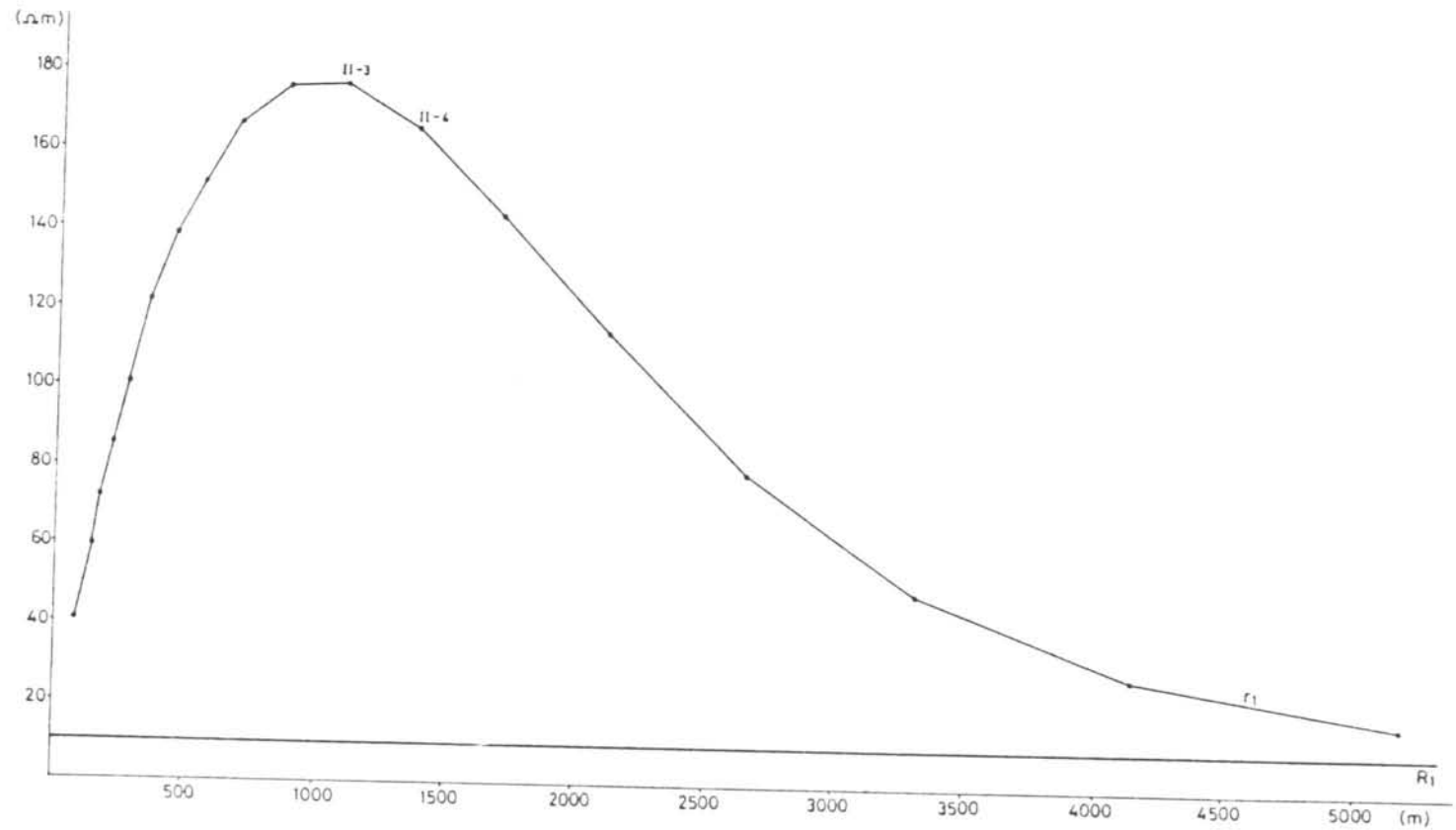


Figura IV-2B - Curva de resistividade aparente r_1 do modelo homogéneo

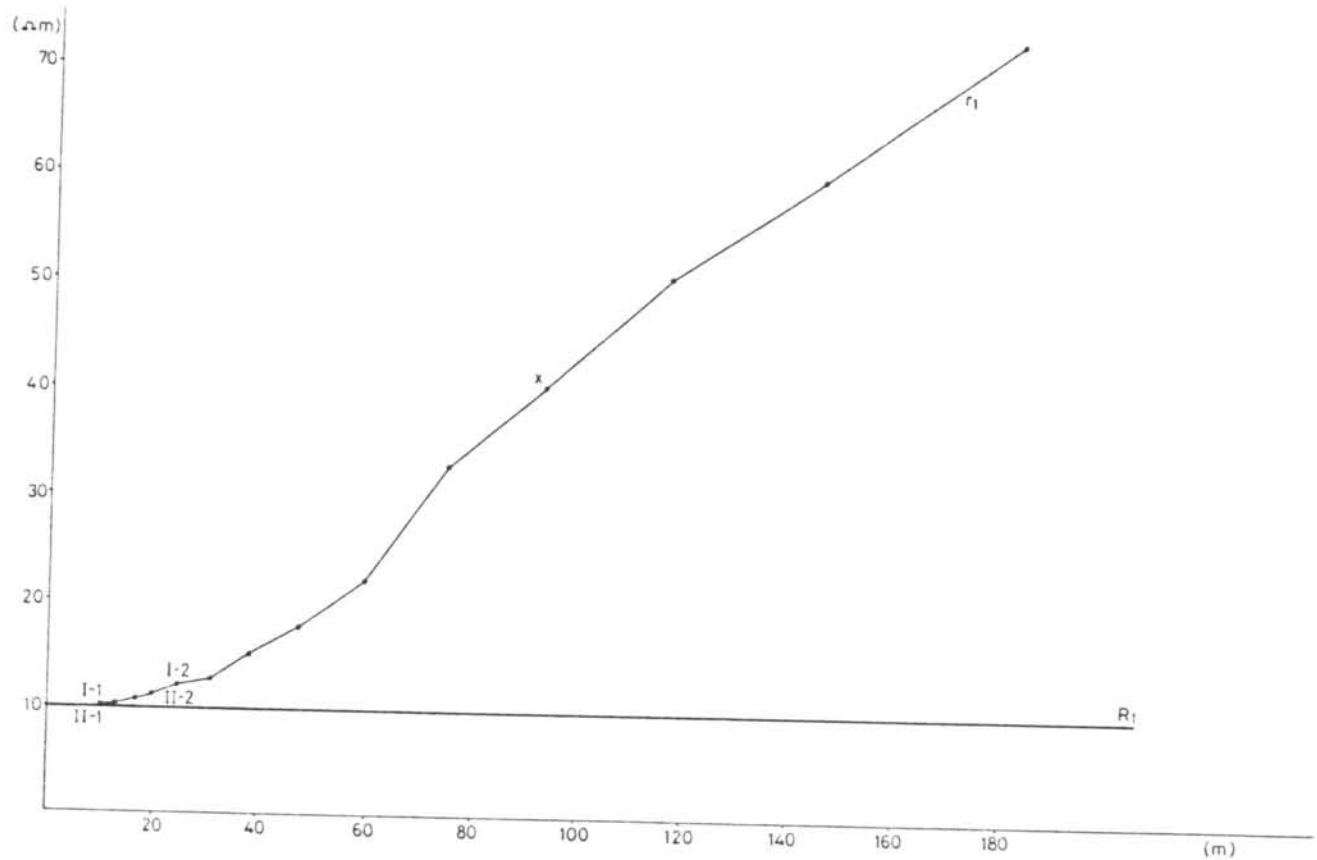


Figura IV-2C - Curva de resistividade aparente r_1 do modelo homogêneo (detalhe do início da curva). Está assinalada (X) a medida que inicia a curva na figura IV-2B

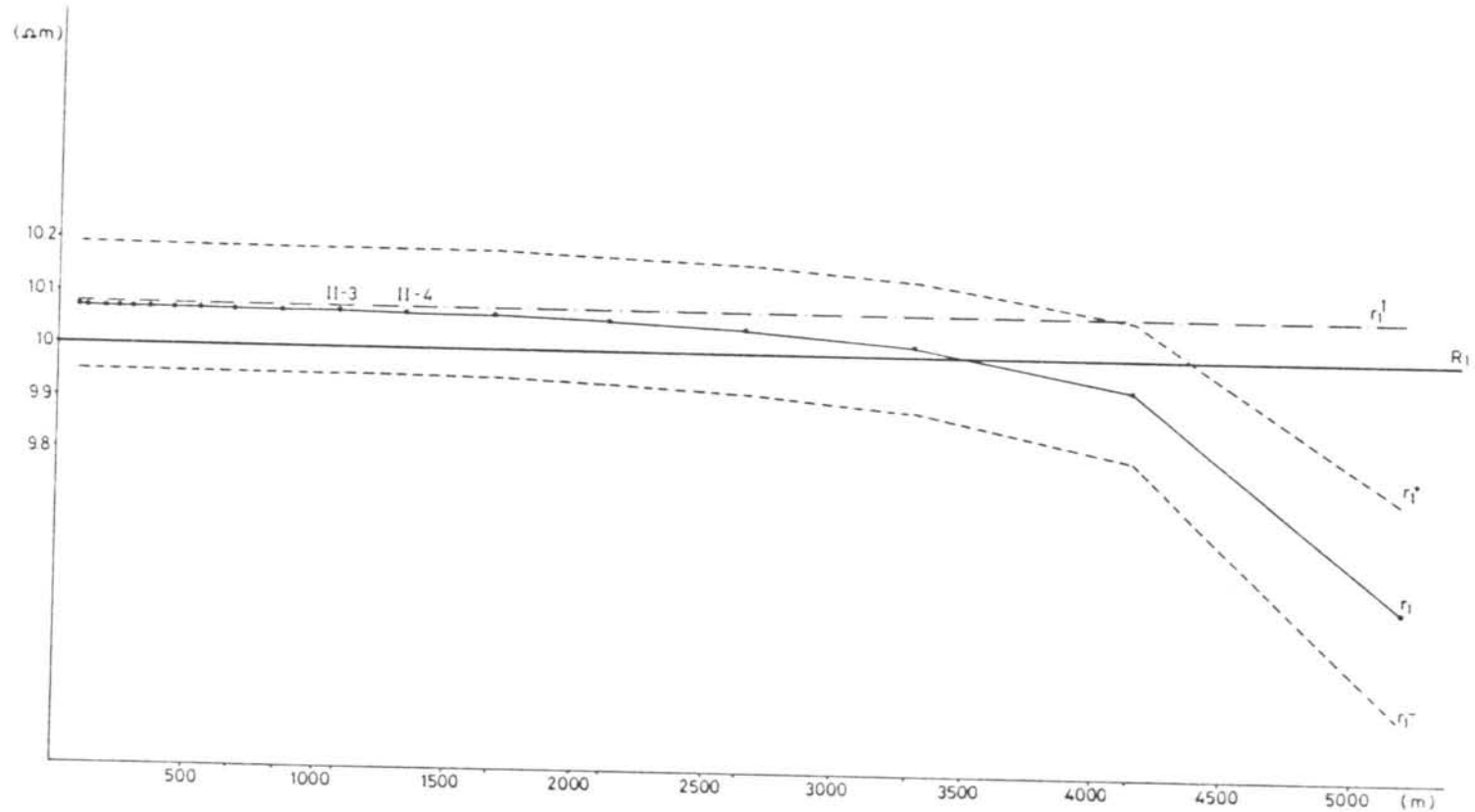


Figura IV-2D - Curva de resistividade aparente r_1 superficial do modelo de um estrato (I)

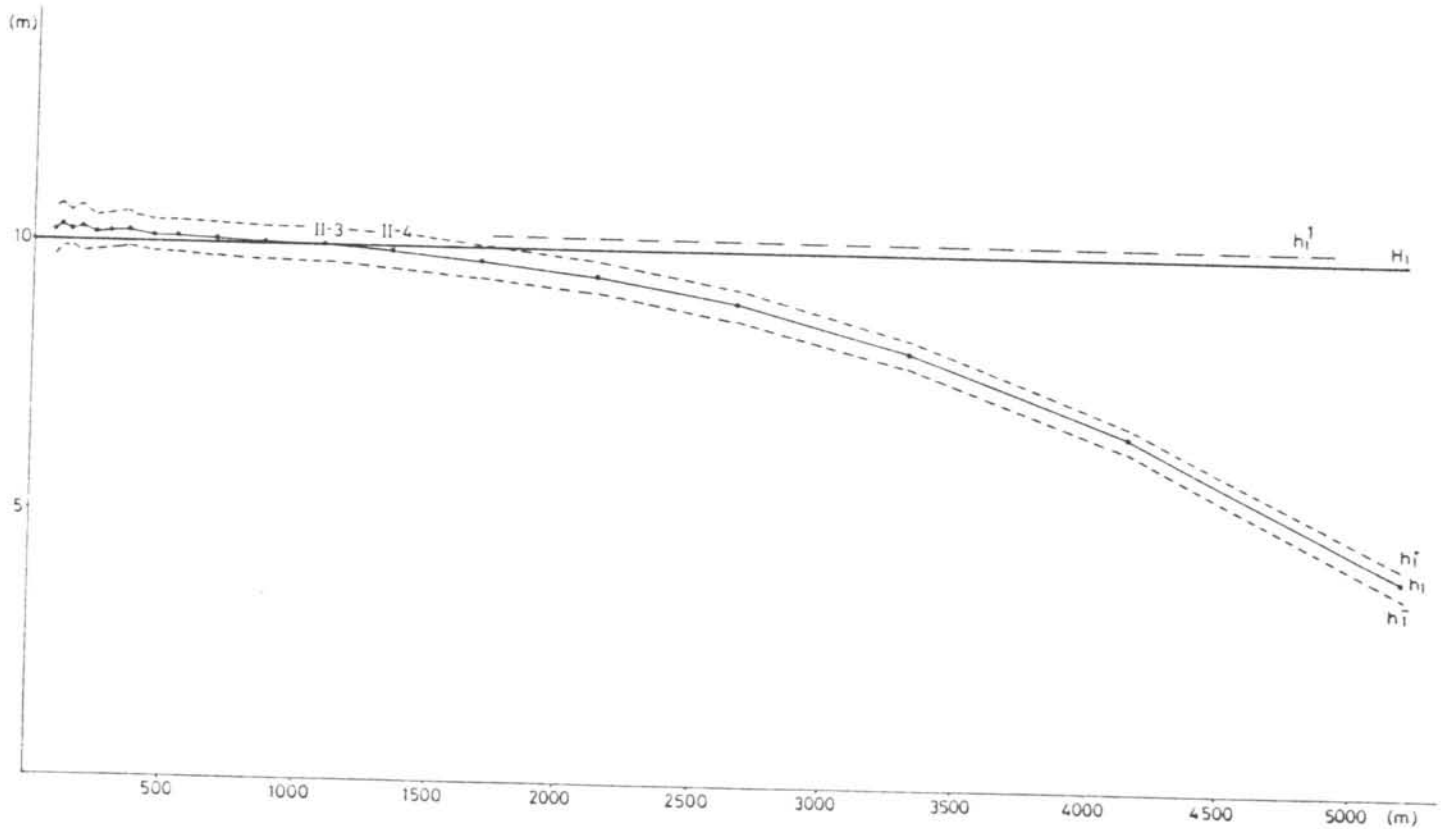


Figura IV-2E - Curva de profundidade aparente h_1 de separação entre a resistividade superficial e o substrato do modelo de um estrato (I)

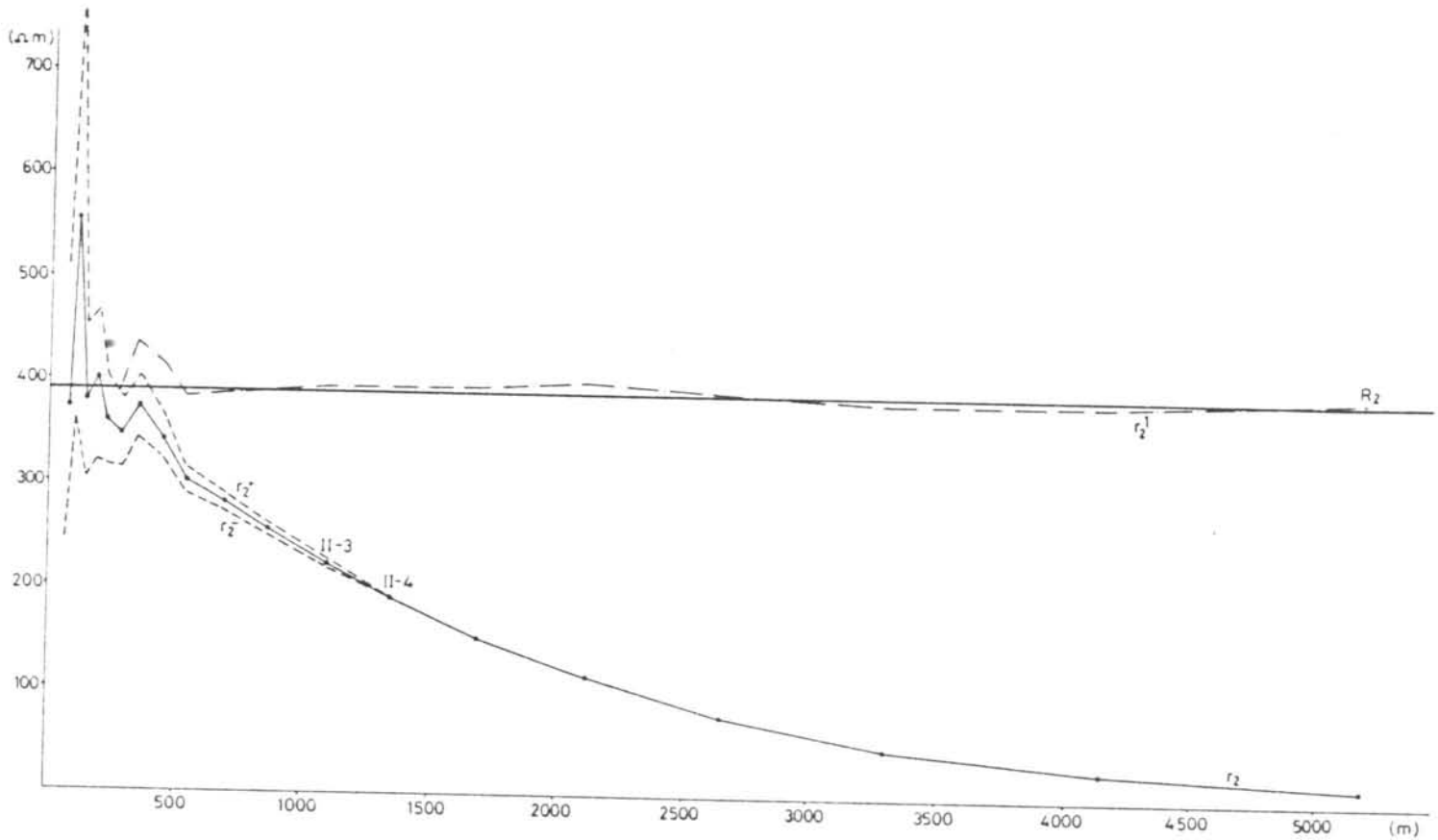


Figura IV-2F - Curva de resistividade aparente r_2 do substrato do modelo de um estrato (I)

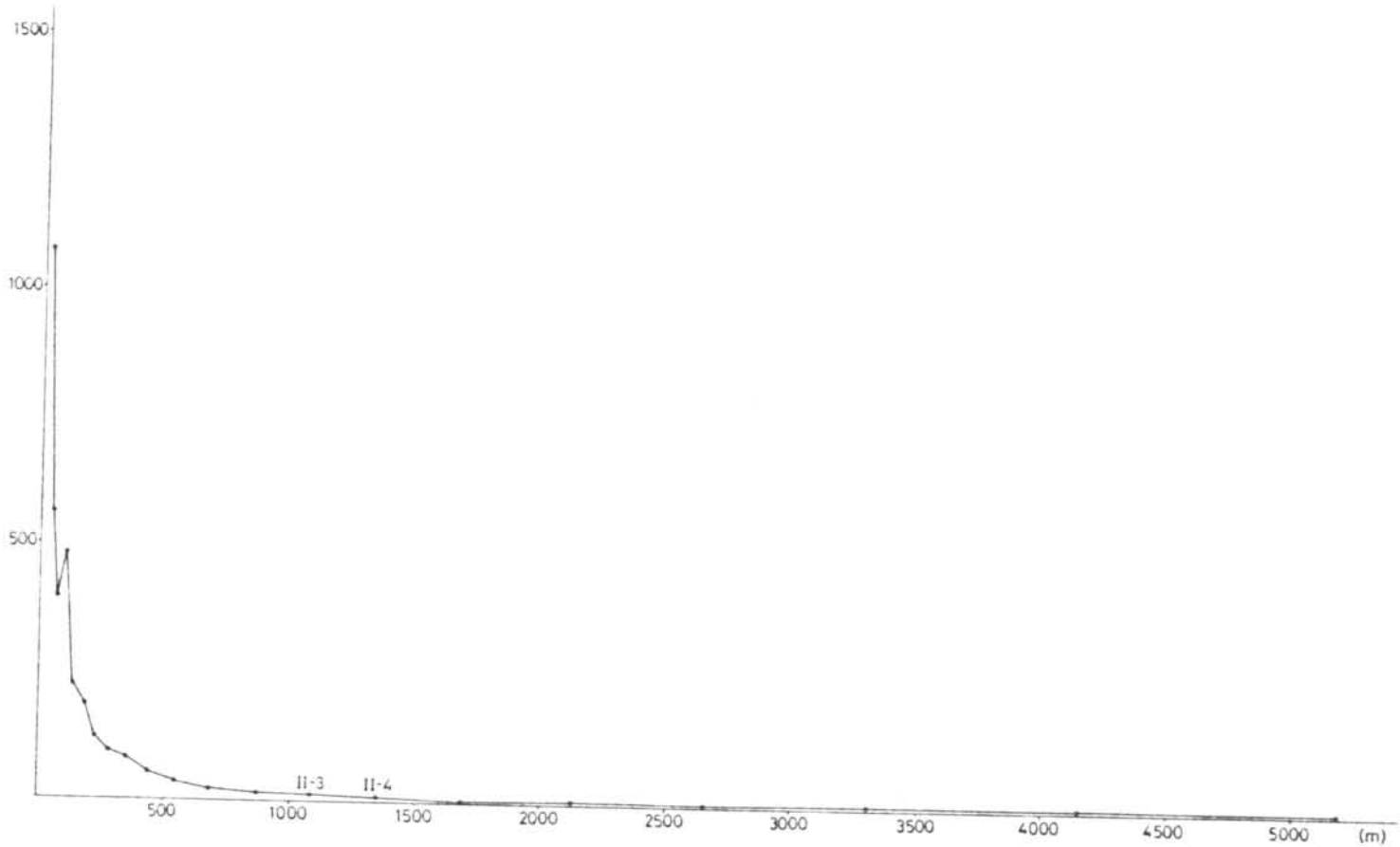


Figura IV-2G - Condição do jacobiano na solução das optimizações do modelo de um estrato (I)

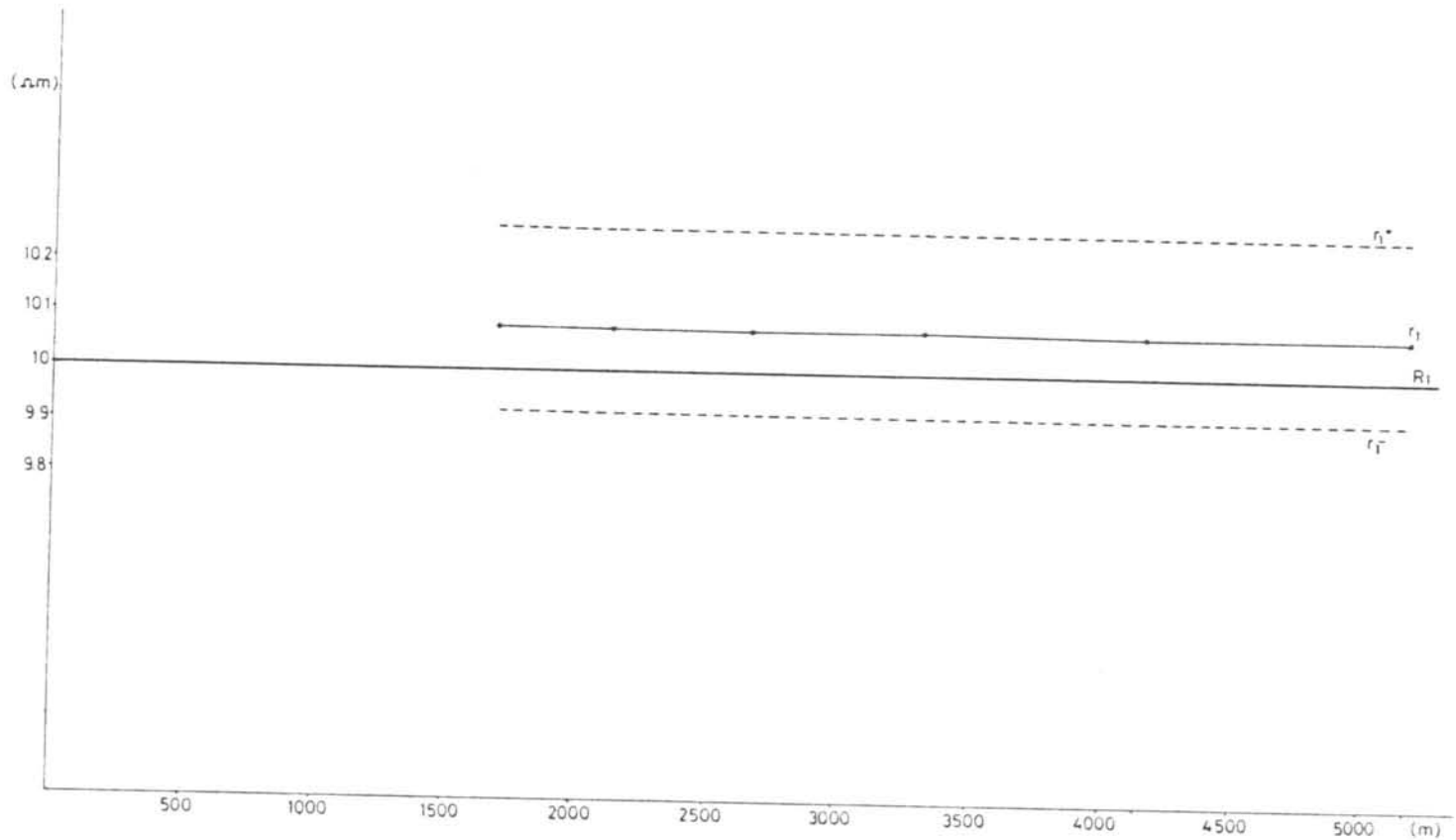


Figura IV-2H - Curva de resistividade aparente r_1 superficial do modelo de dois estratos (II)

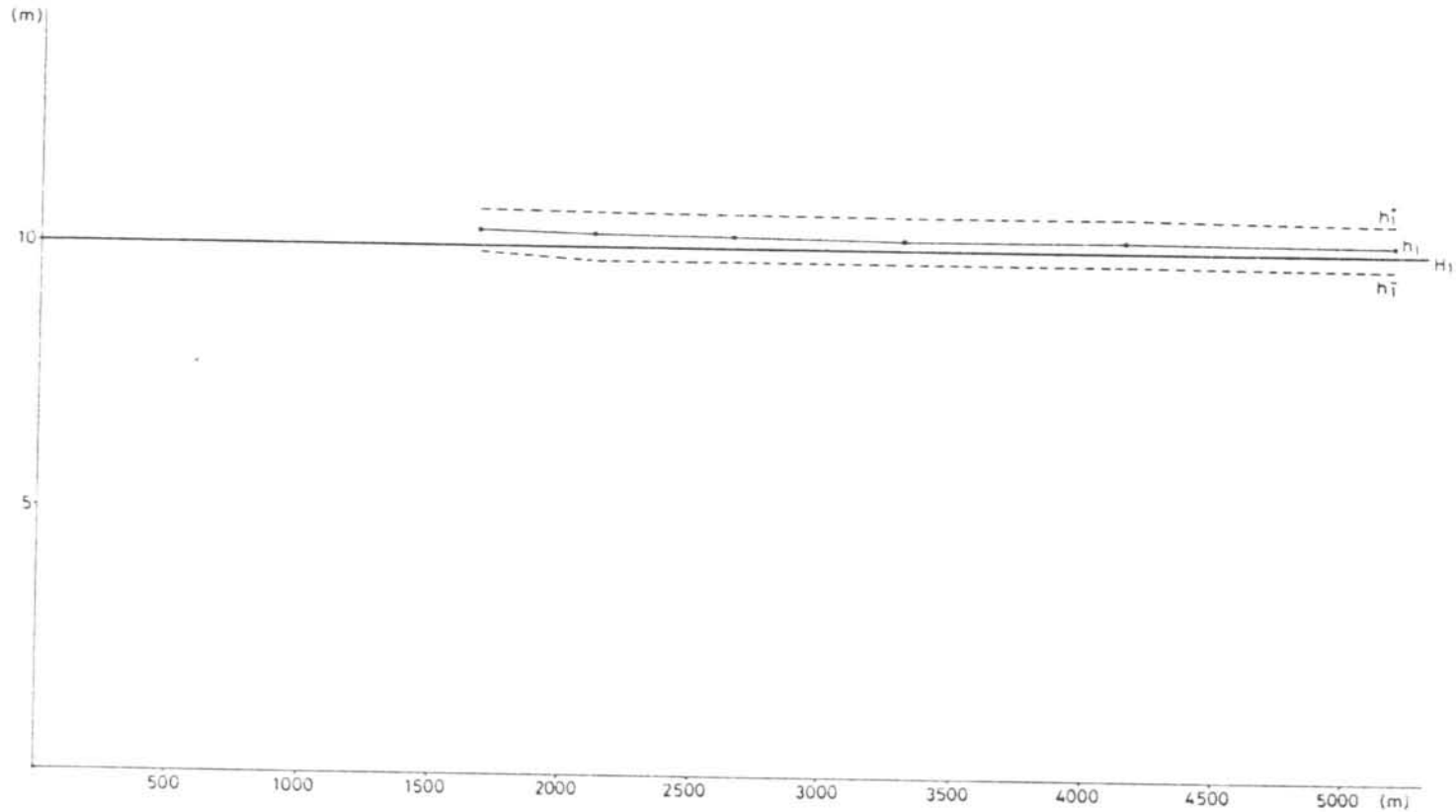


Figura IV-2I - Curva de profundidade aparente h_1 de separação entre o 1º e o 2º estrato do modelo de 2 estratos (II)

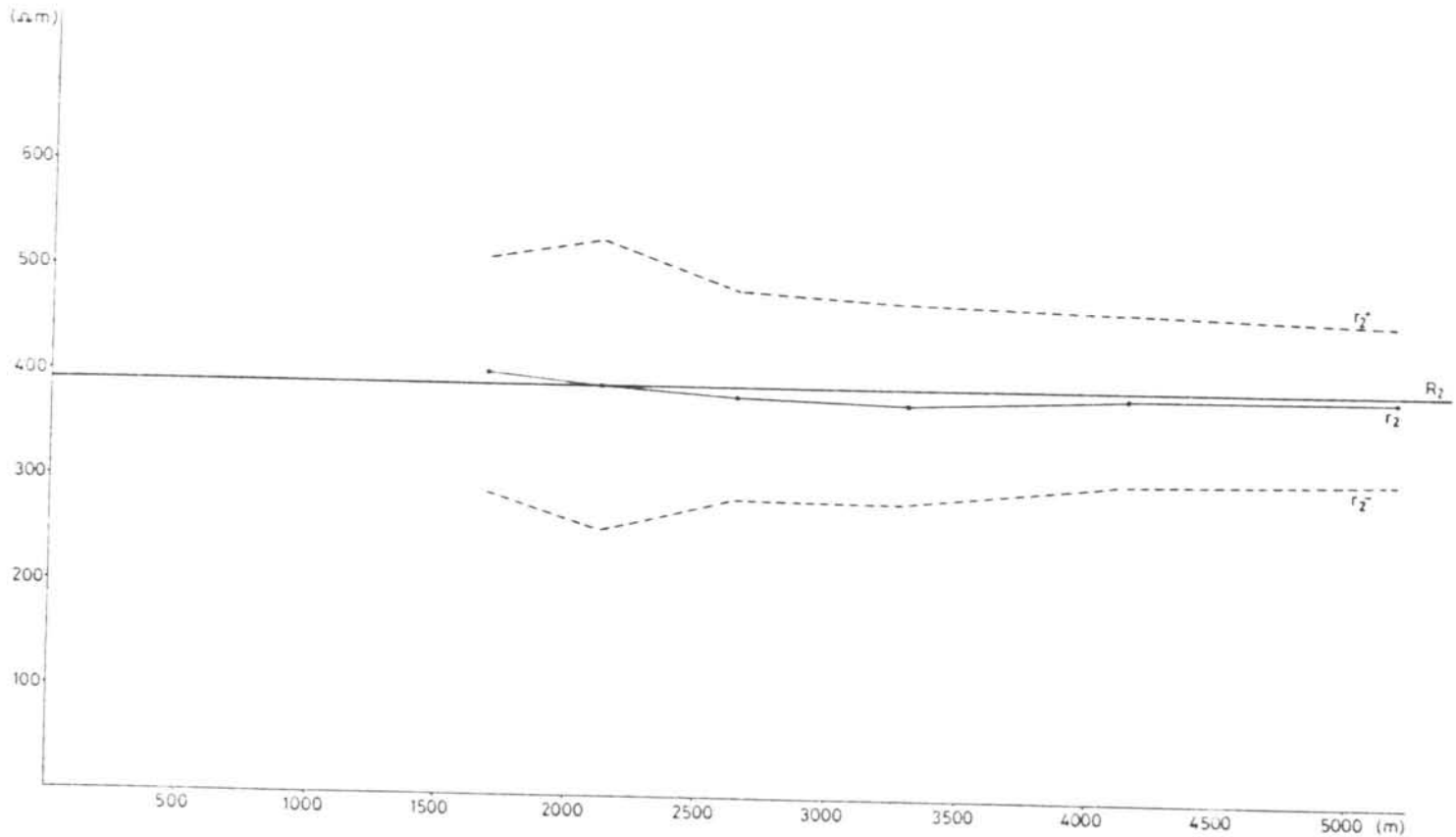


Figura IV-2J - Curva de resistividade aparente r_2 do 2º estrato do modelo de 2 estratos (II)

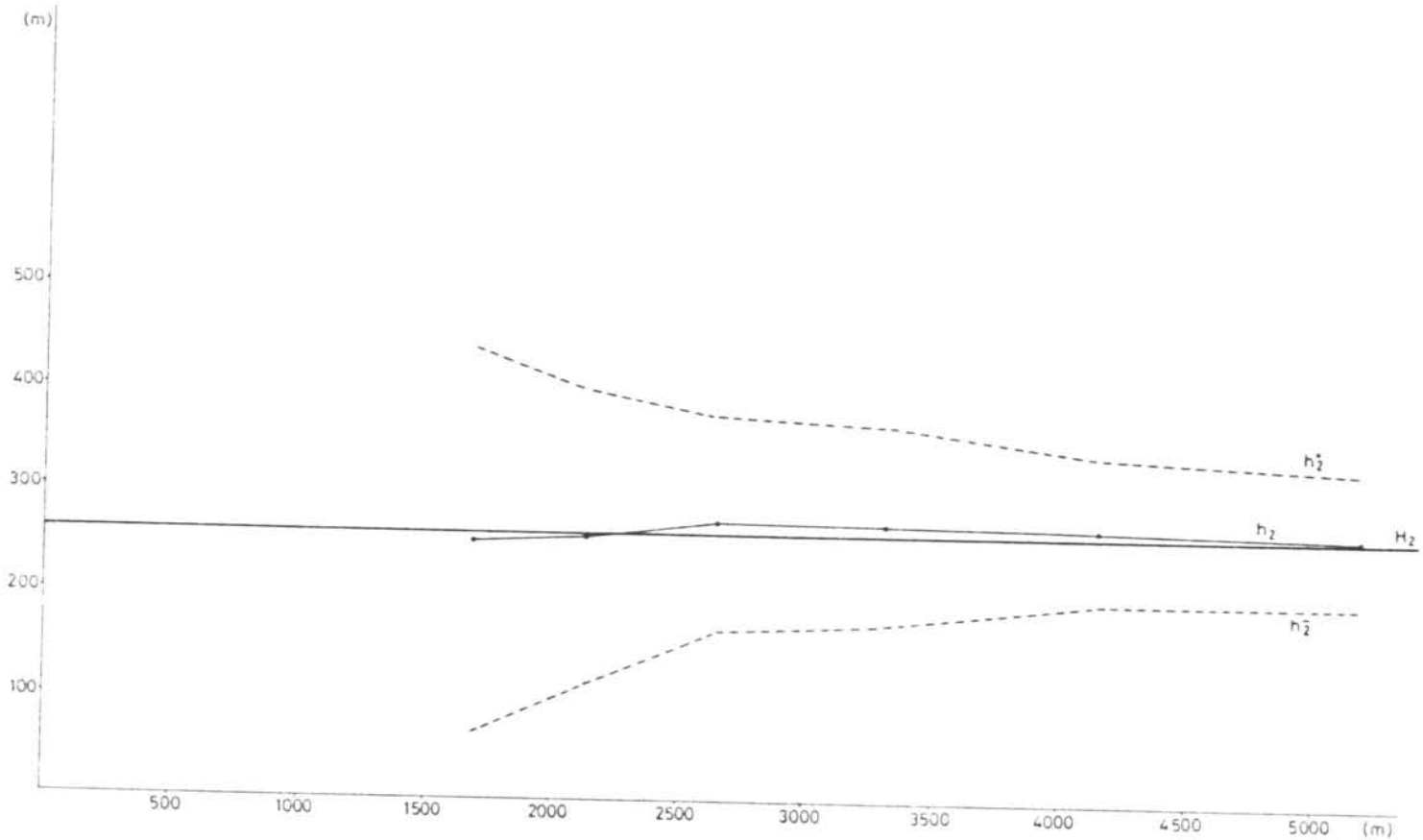


Figura IV-2L - Curva de profundidade aparente h_2 de separação entre o 2º estrato e o substrato do modelo de dois estratos (II)

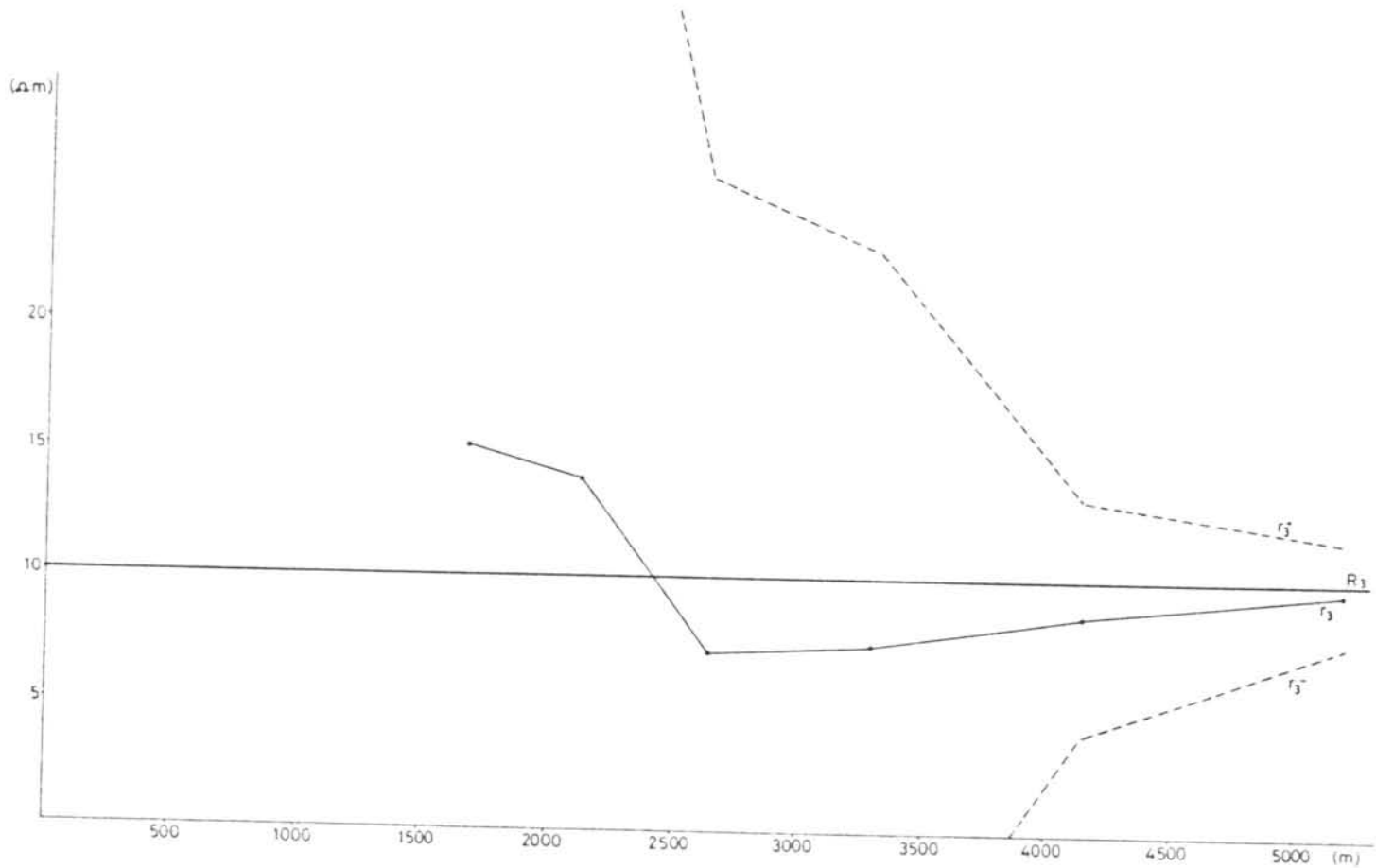


Figura IV-2M - Curva de resistividade aparente r_3 do substrato do modelo de 2 estratos (II)

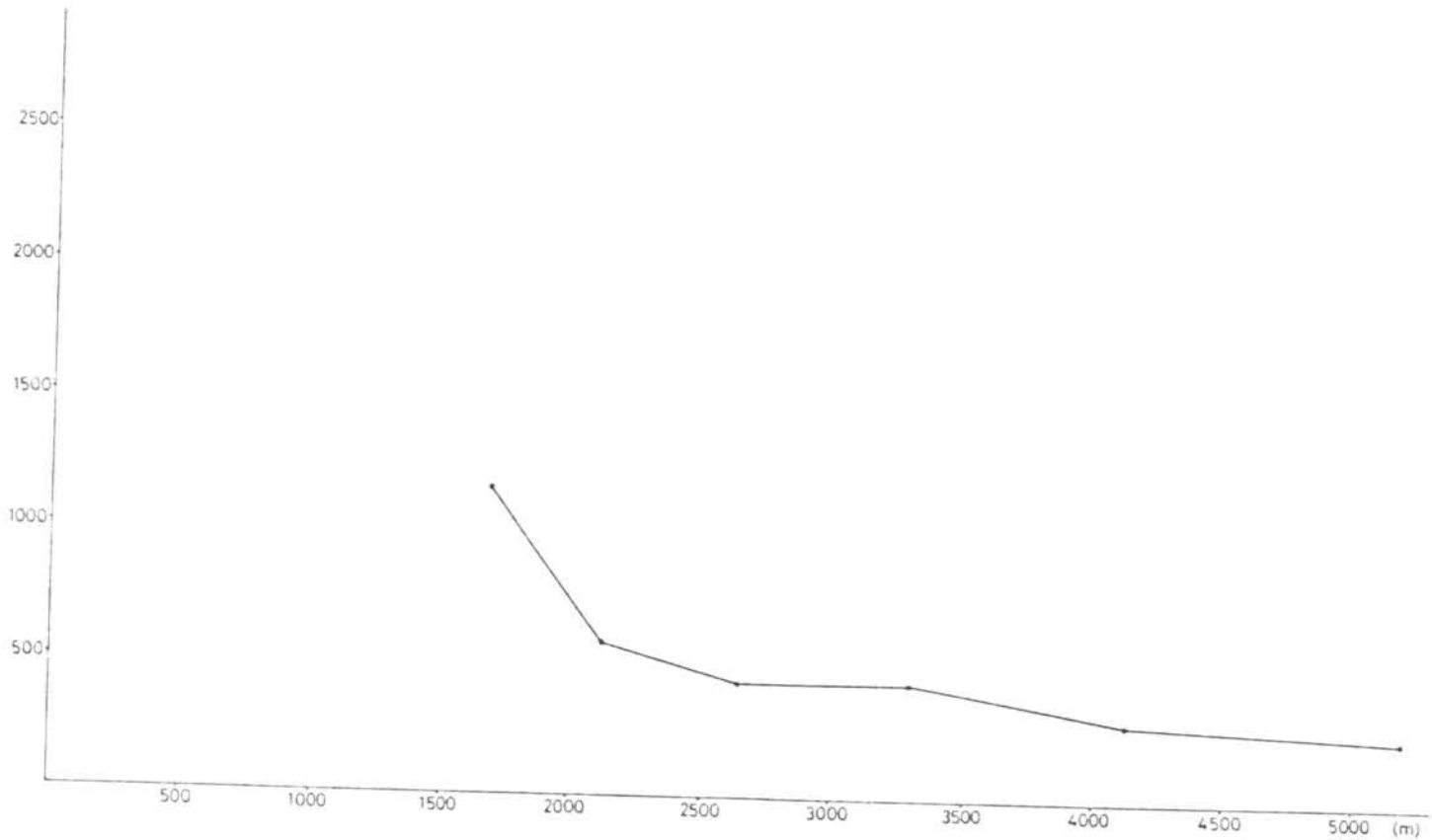


Figura IV-2N - Condição do jacobiano na solução das optimizações do modelo de dois estratos (II)

gunda medida fixa é também determinada pelo segundo estrato real, de resistividade 390Ωm, de que resulta a sua resistividade aparente homogénea ser já razoavelmente superior a 10, o algoritmo determina um mínimo, com as tendências expostas para os valores dos parâmetros, mas não consegue satisfazer a exigência das aproximações.

Se utilizarmos, para 2ª medida fixa, uma medida de cada vez maior distância interelectródica, a que corresponda uma maior resistividade aparente homogénea, o algoritmo começa a exibir este comportamento para medidas móveis de menor distância, sucessivamente 5170 m, 4136 m, etc.,.

Imaginemos que alterávamos o exemplo de Inman subindo o valor da resistividade real do estrato superficial. O efeito era idêntico ao conseguido aumentando a distância interelectródica da 2ª medida fixa: o algoritmo rapidamente começava a abortar para medidas móveis de muito menor distância interelectródica.

É que, de facto, só há dois tipos de curvas de resistividade aparente homogénea quando um terreno é de um estrato, as crescentes e as decrescentes. *Sempre que tome, para tentar definir parâmetros aparentes de um estrato, 3 medidas a que correspondam resistividades aparentes homogéneas que não sejam crescentes ou decrescentes com a distância interelectródica, o algoritmo aborta,* nos termos que temos vindo a referir.

No caso do exemplo de Inman, melhor dizendo, no caso dos terrenos semelhantes ao proposto por Inman, isto é, com um estrato intermédio mais resistivo, o algoritmo aborta sempre que as resistividades aparentes homogéneas correspondentes às 3 medidas utilizadas não forem crescentes com a distância interelectródica, supondo que a 2ª medida fixa, bem escolhida, acusa o estrato mais resistivo e tem, portanto, resistividade aparente homogénea correspondente maior que a da 1ª medida. E isto constitui uma fronteira bem definida e radical. De

modo que, para este tipo de terrenos, das duas uma: ou não há máximo na curva de resistividades aparentes homogéneas e logo o problema não surge, todas essas resistividades são decrescentes ou crescentes, porque o 2º estrato real é tão delgado e tão pouco mais resistivo que não consegue ser imediatamente detectado; ou existe um máximo. Mas então, contrariamente ao que se passa no exemplo de Inman, ele pode ocorrer para distâncias interelectródicas tão pequenas e ser tão pouco significativo que o ajuste do modelo de um estrato seja teoricamente possível mas praticamente irrealizável por questões de condicionamento do problema. A curva é, na prática, impossível de obter. A situação descrita repete-se, mutatis mutandis, para os terrenos com um estrato intermédio muito condutor, só que com regras inversas, pois agora as resistividades aparentes homogéneas das medidas utilizadas devem ser decrescentes, quando a curva das resistividades aparentes tiver um mínimo.

Os terrenos de resistividades reais crescentes ou decrescentes com a profundidade não levantam esse problema, porque as curvas de resistividade aparente homogénea nunca têm máximo nem mínimo.

O que é extremamente importante e, em última análise, fundamenta o nosso método interpretativo é que, *dadas quaisquer 3 medidas dum terreno real qualquer, a 3 distâncias interelectródicas diferentes, com resistividades aparentes homogéneas correspondentes crescentes ou decrescentes com as distâncias interelectródicas, parece existir sempre, pelo menos para as configurações normais, particularmente a de Schlumberger que temos vindo a considerar, um terreno ideal de um estrato cuja curva de resistividades aparentes homogéneas passa pelas resistividades das medidas; por outras palavras, é sempre possível encontrar os parâmetros do modelo de um estrato de molde a*

satisfazer as medidas. O que justifica que se tentem aproximar as medidas das potências calculadas, não só a menos de p_r, em termos relativos, como de forma a coincidirem (em termos práticos, aproximando-as a menos de $p_r/10$ e com as ressalvas de bom condicionamento e ruído levantadas atrás). Basta inspeccionar a forma geral das curvas de resistividade aparente homogénea de terrenos de um estrato para verificar que a conjectura é legítima, pois *são curvas crescentes ou decrescentes, com uma assímptota horizontal e admitindo um ponto de inflexão*. Seria útil demonstrar, matematicamente, a veracidade desta afirmação. Da experiência havida com o algoritmo não é possível retirar nada que a contrarie, e, ao contrário, tudo a confirma. Saliente-se ainda que nenhuma conclusão do género é possível para um número maior de medidas; mesmo para quatro medidas, só casos excepcionais permitirão encontrar parâmetros nestas condições. Isso coloca numa perspectiva completamente diferente, até em termos algorítmicos, os métodos de mínimos quadrados globais e o nosso.

Entretanto, outra questão não menos fundamental é que só podem surgir 3 medidas com resistividades aparentes homogéneas não monótonas em função da distância interelectródica se as curvas de resistividade aparente homogénea do terreno tiverem um máximo ou um mínimo, caso em que se torna evidente que o terreno não pode ser de um estrato. Isto é, *se o lote de medidas de que dispomos der curvas de resistividade aparente monótonas, haverá dúvidas se o terreno é de um ou mais estratos, mas então as curvas de parâmetros aparentes de um estrato são perfeitamente traçáveis*. Ao contrário, *se as curvas de resistividades aparentes homogéneas tiverem máximo ou mínimo, de certeza que o terreno não pode ser de um estrato e podemos prescindir das curvas de parâmetros aparentes de um estrato, passando directamente às curvas de dois estratos*, com as medidas escolhidas a partir da curva do parâmetro

aparente de zero estratos, a curva de resistividades aparentes homogéneas, que, nesse caso, é, para esse efeito, muito informativa, como veremos quando detalharmos o estudo do exemplo de Inman, no capítulo seguinte.

No entanto, poderemos, eventualmente, traçar ainda curvas de parâmetros aparentes de um estrato nesses casos *e sabemos exactamente qual a medida móvel de maior distância interelectródica que podemos utilizar, definida a segunda medida fixa a adoptar*. Fá-lo-emos, sempre que possível, neste trabalho, porque, como veremos e como, facilmente, se constata, as curvas de parâmetros aparentes de qualquer número de estratos fornecem sempre informação sobre modelos de mais estratos, em especial, através da sua assímptota, sobre as hipóteses iniciais a apresentar no teste desses novos modelos.

Temos estado a abordar o traçado das curvas de um estrato. Interessa verificar se as conclusões são válidas para curvas de mais estratos. Concretamente, interessaria saber *se, dada, por exemplo, a curva de resistividades aparentes do substrato do modelo de, digamos, n estratos, e verificando-se que essa curva tem um máximo ou um mínimo, se pode daí concluir que o terreno real tem mais de n + 1 estratos*, tornando-se assim desnecessário o teste do respectivo modelo e passando-se directamente ao modelo de n + 2 estratos. Parece-nos, sem qualquer espécie de dúvida, que sim.

Já surge como mais problemática a hipótese de, dadas 2 n + 1 medidas, de um terreno de n + 1 ou mais estratos reais, tais que as resistividades aparentes do substrato do modelo de n - 1 estratos, obtidas com essas medidas tomadas como móveis, são função monótona das distâncias interelectródicas correspondentes, seja sempre possível determinar os 2 n + 1 parâmetros do modelo de n estratos de forma a ajustar as potências calculadas

com as 2 n + 1 medidas. Dito de forma mais directa, imaginemos que temos desenhada a curva de resistividade aparente do substrato dum modelo que aplicamos ao terreno; será que, *se a curva for monótona, há um terreno ideal, com mais um estrato que o modelo em estudo, que ajuste quaisquer tantas medidas do lote quantas as necessárias e suficientes para determinar os seus parâmetros?* Cremos que sim, embora sem a contraprova experimental, e conscientes de que a escolha das medidas fixas a utilizar pode perturbar a questão, o que constitui mais uma razão para seguir a estratégia exposta de escolha dessas medidas, que nos parece ser a que menos riscos desses faz correr, uma vez que liga, quase univocamente, a resistividade do substrato de cada modelo ensaiado à medida móvel utilizada. A apoiar essa conjectura ou outra similar, invocamos as conclusões a que chegaram os autores que se têm vindo a ocupar dos métodos ditos do ponto auxiliar (Maillet, 1947; Orellana, 1962; Zohdy, 1965), segundo as quais é possível reduzir, progressivamente, o número de estratos, substituindo estratos superficiais por um único estrato, como brevemente referimos no Capítulo II.

De qualquer modo, reafirmamos que bastará uma optimização, a bom condicionamento, com a medida móvel a grande distância interelectródica, fornecer um mínimo robusto que não ajuste as medidas mas seja independente da hipótese inicial de partida, para se poder concluir que um determinado modelo, que se quer ensaiar, não serve, e que é preciso passar ao modelo seguinte.

4.3 Erros das medidas

Temos até aqui afirmado que o erro que afecta cada medida pode ser entendido como a concretização duma variável aleatória de valor médio nulo.

O erro traduz uma perturbação ou ruído, sobreposto à medida, que tem diversas causas possíveis. Essencialmente, podemos agrupá-los em duas grandes categorias: *erros de medida* e *erros geofísicos* ou *erros de modelo*. Estes últimos são provocados pelo modelo utilizado não representar correctamente o terreno. De facto, o modelo pressupõe, por exemplo, resistividades homogéneas em cada estrato ou substrato. Mas a realidade é diferente. O terreno possui sempre um certo grão (eventualmente mesmo em várias escalas) e nem sempre pode ser considerado sequer isotrópico em todos os estratos. As superfícies de separação têm sido supostas bem definidas, planas e horizontais; dificilmente se encontrará um terreno assim. Nem sequer os acidentes topológicos do terreno são integrados no nosso modelo. Assim, o máximo que podemos admitir é que a influência destes desvios do modelo é aleatória.

Tínhamos definido o vector $\bar{P}_m$ como um vector de n potências medidas no terreno. Chamemos $\bar{P}_m^{\,0}$ ao vector das potências exactas

$$\bar{P}_m^{\,0} = [P_{m_1}^{\,0}, \ldots, P_{m_n}^{\,0}]^T$$

As componentes de $\bar{P}_m$, P_{m_i}, são realizações das variáveis aleatórias $\{P_{m_i}\}$. Chamar-lhe-emos, a partir de agora, $P_{m_i}^{\,k}$, significando a realização k.

$$\bar{P}_m^{\,k} = [P_{m_1}^{\,k}, \ldots, P_{m_n}^{\,k}]^T = \bar{P}_m^{\,0} + \bar{\varepsilon}^k =$$

$$= [P_{m_1}^{\,0} + \varepsilon_1^{\,k}, \ldots, P_{m_n}^{\,0} + \varepsilon_n^{\,k}]^T$$

onde $\varepsilon_i^{\,k}$ é uma realização da variável aleatória $\{\varepsilon_i\}$.

Cada variável $\{\varepsilon_i\}$ tem média nula, o que implica que cada variável $\{P_{m_i}\}$ tenha média $P_{m_i}^0$.

A matriz de covariâncias dos erros, N, é constituída, como é sabido, pelas variâncias (elementos da diagonal) e covariâncias das variáveis $\{\varepsilon_i\}$, $i = 1, \ldots n$. É correntemente aceite que os erros das medidas feitas a diferentes distâncias interelectródicas são independentes, pelo que são nulas as covariâncias daquelas variáveis. A matriz N pode, assim, ser considerada diagonal.

Admite-se ainda, usualmente, que, nas medições de prospecção geoeléctrica, em corrente contínua, a variância das medidas pode ser considerada proporcional aos seus valores médios. Doutro modo, admite-se que o erro relativo nas medidas geoeléctricas pode ser tomado como constante. Como, entretanto, no nosso caso, o lote é obtido com potências aproximadamente iguais, conclui-se que todas as variâncias das variáveis $\{\varepsilon_i\}$ podem ser consideradas constantes e iguais a σ^2. A matriz N vem assim

$$N = \sigma^2 I_n$$

onde I_n é a matriz unidade de ordem n

O valor médio e a variância não caracterizam suficientemente uma variável aleatória. É hoje universalmente aceite (Inman, 1975; Oldenburg, 1978) que a distribuição dos erros das medidas geoeléctricas é normal.

Estas afirmações sobre as distribuições dos erros não podem ser feitas sem alguma reflexão.

A independência, por exemplo, dos erros de medidas a diferentes distâncias interelectródicas não pode ser um dado aceite. *Ela deve, isso sim, ser garantida pelo cuidado posto na realização das medidas.* O mesmo se aplica ao facto da média ser nula. Inman (1975), por exemplo, para a configuração de Schlumberger, anota que é vulgar tender a colocar os eléctrodos a menor distância do que se pretende, o que introduz um curioso erro sistemático.

A hipótese de normalidade da distribuição tem um certo fundamento (Bard, 1974, p. 18-21). Em primeiro lugar, é reconhecidamente usual em muitos tipos de medições correntes na natureza e matematicamente muito tratável, com resultados, na maior parte dos casos, robustos em relação a pequenos desvios da normalidade. Uma tal universalidade pode ser entendida à luz dos teoremas de limite central (Linnik, 1961, p. 71-73) que garantem que, sob condições não muito restritivas, a distribuição da soma de x variáveis aleatórias independentes tende para a distribuição normal quando x aumenta. Assim, se os erros tiverem muitas influências aleatórias e independentes, é provável que se distribuam normalmente. Mas há uma segunda razão para admitir que uma distribuição seja normal, sempre que dela, justamente, só se conheçam a média e a variância. Tomando como medida da informação contida na distribuição, cuja função de densidade de probabilidade é p (x), o valor esperado (Shannon, 1948)

$$E\{\ln p(x)\} = \int p(x) \ln (p(x))\, dx$$

mostra-se (Bard, 1974, p. 19-20) que a distribuição que se pode definir e que pressupõe o mínimo de informação possível, com aquela média e aquela va-

riância, é a distribuição normal.

Em todo o capítulo anterior não se refere a distribuição dos erros. Refere-se apenas um majorante do erro relativo, p_r, do qual, aliás, se pode facilmente extrair um majorante geral do erro absoluto, pois estamos a supor potências muito próximas ao longo de todo o lote. Seja p_a esse majorante. A lei de distribuição normal permite-nos relacionar, com o grau de confiança que quisermos, p_a e σ^2. Parece aceitável definir $p_a = 2\sigma$, uma vez que a probabilidade do erro ser maior que 2σ é apenas de cerca de 5%. Mesmo para distribuições algo afastadas da normalidade, a definição parece boa. Journel et al. (1978) sustentam que é vulgar em medições geoestatísticas (embora não especificamente geoeléctricas) a distribuição normal subestimar a proporção de pequenos erros (no intervalo $\pm \sigma/2$) e a de grandes erros (fora do intervalo $\pm 3\sigma$), mas que, em geral, *estima correctamente o intervalo de confiança a 95%*. Se, eventualmente, a distribuição dos erros viesse muito afastada da normalidade, era sempre possível o relacionamento entre p_a e σ^2, a um qualquer nível de confiança, utilizando a desigualdade de Bienaymé-Chebyshev (Meyer, 1975, p. 105):

$$P\{|\varepsilon_i| \geq k\sigma\} < \frac{1}{k^2}$$

Se quisermos manter o mesmo grau de confiança, 95%, qualquer que seja a distribuição, vem, de $1/k^2 = .05$, $k = 4.47$. Logo, se fizermos $p_a = 4.5\,\sigma$, garantimos, para qualquer distribuição, que a probabilidade do erro exceder p_a é de apenas 5%.

Uma outra desigualdade, para distribuições unimodais (o que é o

caso), define ainda, ao mesmo nível de confiança, um relacionamento mais apertado. É a desigualdade de Karl Pearson (Korn e Korn, 1961, p. 533):

$$P\{|\varepsilon_i - \text{med } \varepsilon_i| \geq a\} < \frac{4}{9} \frac{1 + \Sigma^2}{(\frac{a}{\sigma} - |\Sigma|^2)^2}$$

em que Σ é a medida de assimetria de Pearson

$$\Sigma = \frac{\text{med } \varepsilon_i - \text{mod } \varepsilon_i}{\sigma}$$

representando por med ε_i e mod ε_i, respectivamente, a média (aqui nula) e a moda da distribuição.

Não é possível definir um valor universal para σ. Naturalmente que o desvio médio quadrático do erro das medidas depende do terreno em estudo e do cuidado e tecnologia usados nas medições. Curiosamente, em 1958, Vozoff toma como "erro normal de medida" 1%; em 1975, Inman diz que a maior parte dos lotes de medidas têm "erros de 5% ou inferiores"; e em 1978, Oldenburg conclui que as "medidas têm usualmente erros de cerca de 3% ou maiores", como aliás também faz Johansen (1977). Santini e Zambrano (1981) adiantam que os erros das medidas de campo são "geralmente da ordem de 1%".

4.4 Estimador dos mínimos quadrados

O problema geral que se nos põe é o de encontrar uma estimativa dos n parâmetros, exigidos por um determinado modelo proposto, de tal forma que

as equações do modelo, com esses parâmetros, satisfaçam minimamente, n potências medidas. Esse ajuste pode ser feito minimizando a soma dos quadrados dos resíduos, diferenças entre as potências medidas e as calculadas com os parâmetros. *Independentemente do modo como esta minimização é feita, chama-se ao processo: estimador dos mínimos quadrados.* A obtenção dessa estimativa foi o objecto do capítulo anterior. O estimador produz estimativas vectoriais, no nosso caso, $\bar{v}^*$. Obtemos a estimativa por aplicação do estimador a uma realização particular, $\bar{P}_m^k$, da variável aleatória $\{\bar{P}_m\}$. Mas podíamos obter outra estimativa a partir de qualquer outra realização e assim definir uma correspondente variável aleatória $\{\bar{v}^*\}$. Passaremos a chamar $\bar{v}^{*k}$ à realização particular de $\{\bar{v}^*\}$ obtida. $\bar{v}^0$ será o vector dos parâmetros reais do terreno.

O estimador dos mínimos quadrados tem, na situação geral de modelo não linear e de distribuição qualquer dos erros das medidas, apenas uma propriedade interessante, a de ser não enviesado, o que significa que a média ou valor esperado da distribuição de $\{\bar{v}^*\}$ iguala o valor correcto do vector de parâmetros. Esta propriedade não chega, porém, para justificar a sua escolha. Outros estimadores, embora enviesados, podem ter uma variância menor, do que pode resultar para a estimativa um erro quadrático médio inferior. É o que pode acontecer com o chamado estimador por "ridge regression" (Freund e Minton, 1979, p. 138-148).

Mas, se as distribuições dos erros das medidas forem normais, independentes, de média nula e de variância constante, como no nosso caso, o estimador dos mínimos quadrados coincide com o estimador por maximização da função de verosimilhança da amostra constituida pelas medidas (Goldfeld e Quandt, 1972, p. 58). Aliás, a coincidência é generalizável, se as distribuições continuarem normais, a matrizes de covariâncias de erros mais com-

plexas, desde que os quadrados dos resíduos sejam pesados pelos inversos dos elementos dessas matrizes (Bard, 1974, p. 63).

O estimador dos mínimos quadrados partilha, então, com a generalidade dos estimadores de máxima verosimilhança, algumas propriedades interessantes. É uma estatística suficiente, utiliza na estimação toda a informação útil e relevante contida nas medidas. E, sob condições de regularidade aceitáveis (Murteira, 1980, vol II, p. 165), apresenta ainda algumas propriedades assimptóticas notáveis, verificáveis apenas para grandes amostras. A nossa amostra, porém, é pequena. Como corolário do conceito de modelo, compreende tantas medidas, n, quantos os parâmetros a estimar. Mas, em princípio, um estimador dos mínimos quadrados pode tentar minimizar a soma dos quadrados de tantos resíduos quantos se queira. As propriedades assimptóticas do estimador têm lugar quando o número de resíduos (e de medidas) aumenta suficientemente. Em súmula, essas propriedades podem enunciar-se dizendo que o estimador é consistente e assimptoticamente normalmente distribuído, com matriz de covariâncias da sua distribuição igual à matriz de Cramer-Rao. É, portanto, também assimptoticamente eficiente. Infelizmente, sendo a nossa amostra pequena, a distribuição do nosso estimador não é, em princípio, normal.

Mostra-se, entretanto, que, se a distribuição dos erros das medidas for semelhante à nossa e se a variância σ^2 for pequena, o estimador é normalmente distribuído e eficiente, mesmo se a amostra sobre a qual foi aplicado for pequena (Day, 1969). De um modo geral, suponhamos as equações do modelo reduzido linearizáveis nos parâmetros, isto é, suponhamos as potências suficientemente representáveis pelos primeiros termos das suas séries de Taylor nos parâmetros (desprezados os termos com segundas derivadas), em torno do valor correcto do vector de parâmetros, média, aliás, da distribuição das esti-

mativas. E suponhamos mais que essa possibilidade de linearização subsiste para variações dos parâmetros da ordem de grandeza dos desvios padrões da distribuição das estimativas dos parâmetros, o que é tanto mais aceitável quando menor a variância dos erros das medidas. Esta linearização, embora em torno duma estimativa particular $\bar{v}^{*k}$, não nos é estranha. É, na verdade, a convicção de que existe pelo menos uma vizinhança, muito pequena que seja, de $\bar{v}^{*k}$ onde a linearização é possível que está na base do método de Newton, o qual procede, de facto, efectuando estas linearizações de iteração para iteração. A novidade reside aqui em que é preciso que haja uma vizinhança nessas condições em torno de $\bar{v}^{0}$ (ou para efeitos práticos de $\bar{v}^{*k}$) da ordem de grandeza do desvio quadrático médio da distribuição das estimativas, o qual é, a priori, desconhecido. Beale (1960) e Guttman e Meeter (1965) apresentaram alguns trabalhos onde se debruçam sobre a validade desta linearização.

Entretanto, se ela for válida, o estimador por mínimos quadrados resulta, no nosso caso, linear nos parâmetros, e adquire algumas características bem conhecidas da teoria de regressão linear múltipla. Em particular, o teorema de Gauss-Markow-Aitken garante-nos, independentemente da distribuição dos erros, que então o estimador por mínimos quadrados é o estimador linear, sem viés, de menor variância (Meyer, 1975, p. 390-391). Se a distribuição dos erros for normal, o estimador é também normalmente distribuído, de média igual ao vector de parâmetros correcto, naturalmente, e eficiente, isto é, com matriz de covariâncias igual à matriz de Cramer-Rao (Bard, 1974, p. 59; Silvey, 1970, p. 59). As equações do modelo, na hipótese desta linearização, reduzem-se a $\bar{P} - \bar{P}_m^{\,0} = J(\bar{v}^{0})\ (\bar{v} - \bar{v}^{0}) \simeq J(\bar{v}^{*k})\ (\bar{v} - \bar{v}^{0})$.

Em resumo, *supostas as distribuições dos erros de medida independentes, normais, de média nula e variância constante e pequena, o estimador*

dos mínimos quadrados é não enviesado, suficiente e, aproximadamente, normal e eficiente.

A média da distribuição das estimativas é igual ao vector de parâmetros correcto. No entanto não a conhecemos, dispomos apenas de uma única estimativa $\bar{v}^{*k}$. Ser-nos-ia importante saber os contornos duma região do espaço dos parâmetros, centrada na estimativa que possuímos, onde pudesse estar o verdadeiro vector de parâmetros $\bar{v}^{0}$. O valor de $F(\bar{v}^{*k})$ é obtido a partir duma realização $\bar{P}_m^{\,k}$, duma amostra de medidas. Qualquer outra realização terá cada medida a menos de $2\,p_a$ da medida correspondente na amostra que determinou a nossa estimativa, em particular a concretização $\bar{P}_m^{\,0}$ constituída pelos valores exactos das potências. Imaginemos encontrado $F(\bar{v}^{*k})$ e que substituíamos $\bar{v}^{*k}$ por $\bar{v}^{0}$. Necessariamente:

$$|F(\bar{v}^{0}) - F(\bar{v}^{*k})| < 4\,n\,p_a^{\,2} \qquad (4.1)$$

Suponhamos que desenvolvíamos $F(\bar{v}^{0})$ em série de Taylor em torno de $\bar{v}^{*k}$. Atendendo a que em $\bar{v}^{*k}$ existe um mínimo de $F(\bar{v})$ e desprezando termos de ordem superior, vinha (confrontar com a secção 3.3.6)

$$(\bar{v}^{0}-\bar{v}^{*k})^{T}\,H\,(\bar{v}^{*k})\,(\bar{v}^{0} - \bar{v}^{*k}) < 8\,p_a^{\,2}\,n \qquad (4.2)$$

Esta é a equação dum elipsóide n-dimensional em eixos $\bar{v}^{0} - \bar{v}^{*k}$ onde temos a certeza de estar situado o vector correcto, supondo válida a linearização feita. Sempre que não haja perigo de confusão, alteraremos a nossa notação, a partir de agora, designando simplesmente por $\bar{v}$ o vector correcto $\bar{v}^{0}$.

Ter certezas é útil e seguro mas por vezes pouco prático. De facto,

o elipsóide que definimos é demasiado volumoso. Interessar-nos-ia definir elipsóides concêntricos com ele, da mesma forma e orientação, onde pudéssemos ter uma certa confiança de encontrar o vector $\bar{v}$. Por outras palavras, interessa-nos definir uma região de confiança para a variável multidimensional $\bar{v}$.

Isso seria possível se conhecêssemos a distribuição da variável aleatória $\{(\bar{v} - \bar{v}^{*k})^T H (\bar{v}^{*k}) (\bar{v} - \bar{v}^{*k})\}$, aleatória com $\{\bar{v}^*\}$ de que $\bar{v}^{*k}$ é uma realização. Ora a linearização a que procedemos não exige menos do comportamento da função na vizinhança de cada estimativa do que a linearização que justifica a hipótese de normalidade e eficiência para $\{\bar{v}^*\}$, atendendo a que $p_a \simeq 2\sigma$.

Na realidade nem o elipsóide definido por 4.2 é uma região de confiança a 100%. Ele pode ser descrito por

$$(\bar{v} - \bar{v}^{*k})\ \sigma^{-2}\ H\ (\bar{v}^{*k})\ (\bar{v} - \bar{v}^{*k}) < 32\ n \qquad (4.3)$$

A distribuição de $\{\bar{v}^*\}$ pode então ser suposta, com o mesmo nível de restrições, normal e com matriz de covariâncias igual à matriz de Cramer-Rao, matriz que pode então ser aproximada pela matriz bem conhecida dos problemas de regressão linear múltipla e que põe em evidência a relação entre condição do jacobiano e variância das estimativas:

$$C_V = \sigma^2 \left(J^T\ (\bar{v}^{*k})\ J\ (\bar{v}^{*k})\right)^{-1} \qquad (4.4)$$

Como entretanto

$$H\ (\bar{v}^{*k}) = J^T\ (\bar{v}^{*k})\ J\ (\bar{v}^{*k}),$$

conclui-se que o 1º. membro de (4.3) é uma realização da variável aleatória

$$\{(\bar{v} - \bar{v}^{*k})^T\ C_V^{-1}\ (\bar{v} - \bar{v}^{*k})\}$$

que, com $\{\bar{v}^*\}$ normalmente distribuído, é distribuída segundo χ^2 (n), isto é, χ^2 com n graus de liberdade (Silvey, 1970, p. 91).

É então possível, dado γ, encontrar nas tábuas da distribuição χ^2 um C^2 tal que

$$P\ \{(\bar{v} - \bar{v}^{*k})^T\ C_V^{-1}\ (\bar{v} - \bar{v}^{*k})\} < C^2 = \gamma \qquad (4.5)$$

e definir, assim, *regiões de confiança elipsoidais*.

Imaginemos, entretanto, que a linearização das potências que fizemos ao considerar apenas os primeiros termos do desenvolvimento de F $(\bar{v})$ em 4.1 não era possível. *Continuaríamos a poder definir hipersuperfícies que contivessem o vector de parâmetros do tipo da definida por 4.2 , apenas com equação muito mais complexa e que já não seria a de um elipsóide.* Da mesma forma, a definição de regiões de confiança exigiria então conhecer a distribuição da variável aleatória surgida. Beale (1960), Hartley (1964) e Guttman e Meeter (1965) abordaram, exaustivamente, o problema das regiões de confiança na estimação de problemas não lineares. Anote-se, entretanto, que, qualquer que seja a variável aleatória que constitua o 1º membro das desigualdades que se possam desenvolver a partir de 4.1 , qualquer que seja a distribuição de $\{\bar{v}^*\}$ e, portanto, qualquer que seja a distribuição dos erros das

medidas, a desigualdade de Bienaymé-Chebyshev permite sempre a definição de regiões de confiança, ainda que sobredimensionadas.

Admitimos, até aqui, conhecer σ^2, variância dos erros das medidas. Sabemos (Bard, 1974, p. 190) da teoria da regressão linear múltipla, que resulta aplicável nos termos da nossa linearização, que uma estimativa não enviesada dessa variância pode ser obtida com

$$\sigma^{2*k} = \frac{F\ (\bar{v}^{*k})}{n - \ell} \tag{4.6}$$

quando o número de medidas, n, suplanta o número de parâmetros, ℓ. Pode-se mesmo definir regiões de confiança quando não se conhece σ^2. De facto, prova-se (Goldfeld e Quandt, 1972, p. 43) que, se a distribuição dos erros for normal, a distribuição da variável aleatória $\{F\ (\bar{v}^*)\}\ \sigma^{-2}$ segue a lei $\chi^2\ (n-\ell)$. Entretanto, como vimos

$$\{(\bar{v} - \bar{v}^{*k})^T\ J^T\ (\bar{v}^{*k})\ J\ (\bar{v}^{*k})\ (\bar{v} - \bar{v}^{*k})\}\ \sigma^{-2}$$

segue a lei $\chi^2\ (n)$. Prova-se (Goldfeld e Quandt, 1974, p. 46) que as duas distribuições são independentes. Então, sabe-se (Bard, 1974, p. 21) que

$$\left\{\frac{(n - \ell)\ (\bar{v} - \bar{v}^{*k})^T\ J^T\ (\bar{v}^{*k})\ J\ (\bar{v}^{*k})\ (\bar{v} - \bar{v}^{*k})}{n\ F\ (\bar{v}^{*k})}\right\}$$

se distribui segundo Fischer, ℓ, $n-\ell$. A partir das tábuas desta distribuição é então possível construir regiões de confiança sem utilizar σ^2.

Infelizmente, no nosso caso, o número de parâmetros iguala o número de medidas. Não temos assim graus de liberdade "suficientes" para estimar σ^2. Torna-se, portanto, necessário obter, independentemente, essa estimativa, ou encontrar forma de prescindir dela. Voltaremos ao assunto mais tarde.

4.5 Elipsóides de confiança e erros dos parâmetros. Análise espectral.

Em vez de uma região de confiança para a variável multidimensional $\bar{v}$, convinha-nos definir intervalos de confiança para cada parâmetro v_i, $i = 1, \ldots, n$. Isso não é, em si, difícil, uma vez que sabemos que as *estimativas de cada parâmetro se distribuem marginalmente normalmente com média igual ao verdadeiro valor do parâmetro* v_i *e variância igual ao elemento correspondente* s_{ii}^2 *da diagonal da matriz de covariâncias da variável multidimensional* (Linnick, 1961, p. 160). Naturalmente que esta conclusão só é correcta no quadro da linearização a que procedemos.

Se se desconhecesse σ^2 e fosse possível estimá-lo segundo 4.6, seria lícito tomar, imediatamente, as estimativas individuais dos parâmetros distribuídas segundo a lei de Student com $n-\ell$ graus de liberdade, de variâncias obtenívеis a partir da matriz

$$\frac{F(\bar{v}^{*k})}{n-\ell} \left(J^T(\bar{v}^{*k})\, J(\bar{v}^{*k})\right)^{-1}$$

A partir da distribuição marginal dos parâmetros é possível construir intervalos de confiança. No entanto, só no caso de fraca correlação entre os parâmetros é que os desvios padrões dados pelas raízes quadra-

das das variâncias desses parâmetros, s_{ii}, dão uma boa indicação da sua indeterminação, como veremos. Se a correlação for muito forte, é muito provável que os parâmetros venham determinados com maior precisão do que aquela que os diferentes s_{ii} , i = 1, ..., n, deixam sugerir.

Retomemos os elipsóides de confiança (4.5). Convém, mais uma vez, deixar bem claro que *a forma elipsoidal destas regiões de confiança corresponde à possibilidade de linearizar as potências numa vizinhança razoável do verdadeiro vector de parâmetros. E que também só então é lícito aproximar a matriz de covariâncias por uma expressão simples como 4.4* . A matriz de correlação dos parâmetros é definida a partir da matriz de covariâncias, dividindo cada covariância, s_{ij}^2, pelo produto dos desvios dos parâmetros envolvidos $s_{ii}\ s_{jj}$. É constituída pelos coeficientes de correlação, que dão uma ideia do grau de dependência entre os parâmetros. No entanto não podem ser tomados como medidas dessa dependência. Primeiro, porque medem apenas relações lineares e não outras e, depois, porque se referem aos parâmetros tomados aos pares. A dependência pode ser muito mais complexa do que a indicada pela matriz de correlação.

Mas admitamos que os elipsóides (4.5) são, de facto, regiões de confiança da nossa variável multidimensional. A sua análise vai-nos permitir quantificar melhor noções já abordadas quando do estudo da análise espectral e da precisão de cálculo das estimativas, no capítulo anterior.

Recordemos, de 4.5 , que os elipsóides têm equação

$$(\bar{v} - \bar{v}^{*k})^T\ C_V^{-1}\ (\bar{v} - \bar{v}^{*k}) = c^2 \qquad (4.7)$$

com, de 4.4 ,

$$C_V = \sigma^2 \ (J^T \ (\bar{v}^{*k}) \ J \ (\ \bar{v}^{*k})) \ ^{-1}$$

Os eixos dos elipsóides são dados pelos vectores próprios da inversa da matriz de covariâncias. O comprimento do semieixo i é $C/\sqrt{\alpha_i}$ onde α_i é o valor próprio correspondente ao vector próprio que define o eixo (Bard, 1974, p. 174).

Os pontos mais afastado e próximo do elipsóide são definidos pelos eixos mais longo e mais curto. *Estes pontos indicam as combinações lineares dos parâmetros, respectivamente, pior e melhor determinadas.* Correspondem-lhe os valores próprios maior e menor da matriz de covariâncias, ou os valores próprios menor e maior de $J^T \ (\bar{v}^{*k}) \ J \ (\bar{v}^{*k})$.

Da decomposição em valores singulares

$$J \ (\bar{v}^{*k}) = U \ \Sigma \ V^T$$

resulta

$$C_V^{-1} = \sigma^{-2} \ \ (U \ \Sigma \ V^T)^T \ U \ \Sigma \ V^T \ \ = \sigma^{-2} V \Sigma^2 \ V^T$$

ou

$$C_V = \sigma^2 \ V \ \Sigma^{-2} \ V^T \qquad (4.8)$$

donde

$$(\bar{v} - \bar{v}^{*k})^T \ C_V^{-1} \ (\bar{v} - \bar{v}^{*k}) = (v^- - \bar{v}^{*k})^T \ \sigma^{-2} \ V \ \Sigma^2 \ \ V^T \ (\bar{v} - \bar{v}^{*k}) \qquad (4.9)$$

Transformemos as coordenadas de acordo com

$$\bar{\Psi} = V^T \, (\bar{v} - \bar{v}^{*k}) \tag{4.10}$$

Ψ_i passa a ser a componente de ordem i do vector $\bar{v} - \bar{v}^{*k}$ num sistema de coordenadas cujos eixos são os vectores próprios da inversa da matriz de covariâncias. As novas variáveis chamam-se *variáveis canónicas*. Então 4.9 pode escrever-se

$$\sigma^{-2} \, \bar{\Psi}^T \, \Sigma^2 \, \bar{\Psi} = \sigma^{-2} \sum_{i=1}^{n} \Psi_i^2 \sigma_i^2$$

que é a forma canónica da expressão quadrática e onde σ_i, i = 1, ..., n, são os valores singulares da decomposição do jacobiano.

Confirma-se, assim, que o *comprimento de cada eixo do elipsóide é inversamente proporcional ao valor singular correspondente do jacobiano.*

A transformação de coordenadas pode ser entendida como uma transformação de parâmetros.

$$\bar{\rho} = V^T \, \bar{v}$$

onde

$$\bar{\Psi} = \bar{\rho} - \bar{\rho}^{*k}$$

Estes novos parâmetros recebem o nome de *componentes principais*. A sua matriz de covariâncias é

CEEUP
(I.N.I.C.)
PORTO
BIBLIOTECA

$$C_{\rho} = \varepsilon \{ (\bar{\rho} - \bar{\rho}^{*}) (\bar{\rho} - \bar{\rho}^{*T}) \} = V^{T} C_{V} V$$

e atendendo a 4.8

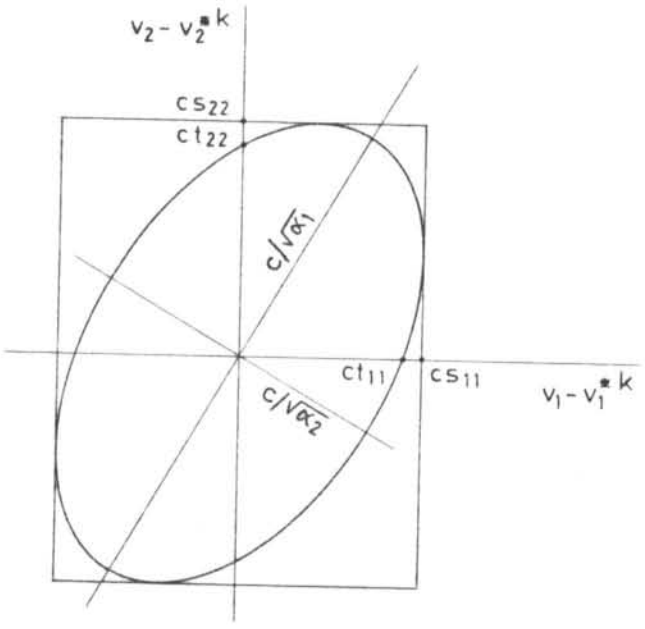
$$C_{\rho} = \sigma^{2} \Sigma^{-2}$$

Os componentes principais não são correlacionados e os seus desvios quadráticos médios são inversamente proporcionais aos respectivos valores singulares associados. As distribuições normais de variáveis não correlacionadas permitem definir intervalos de confiança para cada variável (Bard, 1974, p. 184) capazes de dar a indicação da sua indeterminação.

Ao contrário, os intervalos de confiança definidos no princípio da secção para os parâmetros v_i, a partir dos desvios médios quadráticos s_{ii} das suas distribuições marginais, não têm em conta o grau de correlação entre esses parâmetros (Goldfeld e Quandt, 1972, p. 44). De facto, *aqueles intervalos de confiança supõem, no fundo, uma região de confiança constituída por um hiperparalelipípedo n-dimensional de arestas proporcionais a* s_{ii}, *quando, na verdade, a distribuição multidimensional permite definir um elipsóide de muito menor volume inscrito no paralelipípedo*. As distribuições condicionais dos parâmetros têm menor variância. A intersecção do elipsóide com cada eixo do espaço $\bar{v} - \bar{v}^{*k}$ determina aí um comprimento proporcional ao desvio médio quadrático t_{ii} da distribuição condicional (normal também, nas condições que temos vindo a supor) do parâmetro v_i, supostos os outros invariados e iguais aos estimados. Os dois desvios s_{ii} e t_{ii} completam-se um pouco para dar uma ideia dum *"intervalo de majorantes"* para o erro de cada parâ-

metro. Se os parâmetros estiverem muito perto das soluções, os erros majorar-se-iam com os desvios t_{ii}.

Não é fácil visualizar estas considerações, a não ser no caso de 2 parâmetros, quando os elipsóides se reduzem a elipses (Figura IV-3).



$$CV = \begin{bmatrix} s_{11}^2 & s^2 \\ s^2 & s_{11}^2 \end{bmatrix}$$

$$t_{11} = \sqrt{s_{11}^2 - s^4/s_{22}^2}$$

$$t_{22} = \sqrt{s_{22}^2 - s^4/s_{11}^2}$$

Figura VI-3 - Elipse de confiança numa distribuição bidimensional. α_1 e α_2 são os dois valores próprios da matriz C_V^{-1}. s_{ii} e t_{ii} são os desvios quadráticos médios das distribuições marginal e condicional na origem de $v_i - v_i^{*k}$.

Se as variâncias não forem correlacionadas (linearmente), o elipsóide fica com os eixos coincidentes com os eixos coordenados do espaço $\bar{v} - \bar{v}^{*k}$. A sua excentricidade é uma medida da condição da matriz de covariâncias.

F.E.

Quando os valores próprios da matriz tendem todos para o mesmo valor, o elipsóide tende para uma esfera n-dimensional. Repare-se que ainda assim a esfera continua inscrita no paralelipípedo definido pelos desvios padrões marginais. Apenas, agora, os desvios padrões marginais e condicionais na origem coincidem.

Os conceitos envolvidos no traçado e interpretação de elipsóides de confiança podem ser facilmente aproximados aos da análise espectral. Viu-se, por exemplo, que cada variável canónica Ψ_j, obtida de 4.10 , representa uma combinação linear dos parâmetros v_i (i = 1, ... n,):

$$\bar{\Psi} = V^T \ (\bar{v} - \bar{v}^{*k}) \qquad (4.10)$$

Recorde-se, agora, que as colunas de matriz V são os vectores de parâmetros da análise espectral.

A análise espectral é, aliás, uma ferramenta preciosa na validação, a posteriori, da escolha de medidas fixas, porque permite, como vimos, identificar quais os parâmetros a que cada medida é mais sensível.

4.6 Estimativa da variância dos erros. Séries de medidas.

4.6.1 Estimativa da variância dos erros

4.6.1.1 Atribuição e estimação

Como não podemos utilizar 4.6 , torna-se necessário estimar independentemente a variância dos erros das medidas ou, alternativamente, atribuir-lhe um valor plausível, o que resulta muito mais económico na recolha

de medidas.

No entanto, a atribuição põe um pouco em causa o nosso critério de paragem do algoritmo de optimização. Se a variância dos erros, e, portanto, p_r, for arbitrada por excesso, o critério de paragem a menos de $p_r/10$ terá de ser apertado, de forma a obrigar a uma melhor aproximação entre potências calculadas e medidas. Se, ao contrário, p_r for arbitrado por defeito, mesmo em situações de ainda razoável condicionamento pode não ser possível ou não ter significado aproximar a menos de $p_r/10$. Também por isso, como veremos no capítulo seguinte, teve-se o cuidado, na implementação do algoritmo de optimização, de não rejeitar imediatamente uma solução quando ela não satisfaz o critério de aproximação entre potências. Em última instância, a decisão de rejeição compete ao utilizador, em função da confiança que deposita no valor de p_r e da análise da solução que o próprio algoritmo lhe fornece.

É portanto *perfeitamente possível, de forma geral, trabalhar com* p_r *abaixo do valor verdadeiro,* ainda que isso diminua a eficiência do algoritmo e obrigue o operador a aceitar "manualmente" soluções que o algoritmo não considerou.

Eventualmente, o utilizador pode, no fim, confirmar a justeza da atribuição que fez, identificada a estrutura real do terreno e os seus parâmetros. Basta-lhe, então, estudar os resíduos, diferenças entre potências calculadas e medidas, para todas as distâncias interelectródicas. A equação 4.6 , com o denominador substituído pela diferença entre o número de medidas do lote e o número de parâmetros, fornece-lhe, a posteriori, uma informação sobre σ^2, que pode comparar com a hipótese que, inicialmente, formulou, se a estimativa dos parâmetros não tiver viés.

Para estimar σ^2 é preciso reproduzir em zonas do terreno diferentes (ou na mesma zona em direcções cruzadas - a opção dependendo do que já se saiba ou presuma sobre ele, em particular sobre efeitos de lateralidade e tamanho de grão, de forma a minimizar eventuais erros sistemáticos) m medidas exactamente iguais, isto é, com as mesmas distâncias interelectródicas, dimensões horizontais de eléctrodos aparentes e correntes injectadas. O objectivo destas m medições não será, então, apenas o de estimar σ^2.

4.6.1.2 Carácter aleatório das medidas

O carácter aleatório das medidas é difícil de verificar como tal. De facto, quase todos os testes relativamente potentes são testes de corrida ("run tests") ou de sequência. Isto é, as medidas são colocadas em sequência e é testado, de diferentes modos, o comportamento dos elementos contíguos da sequência. A hipótese H_0 ("null hypothesis") que consideramos é o carácter aleatório das medidas. A contra-hipótese é o carácter não aleatório das medidas. Mas o teste é feito com uma sequência particular destas medidas. O que podemos é escolher uma sequência que suspeitamos vir a conduzir, com mais probabilidade, à rejeição de H_0. Isso diminui a probabilidade de erros do tipo II (β) ou, por outras palavras, aumenta a potência do teste. O problema reside em que *essa potência é criticamente dependente da sequência definida*. Assim, por exemplo, se suspeitarmos que os nossos aparelhos de medida tendem a dar resultados por excesso devido a sobreaquecimento por funcionamento demorado, construímos a nossa sequência colocando as medidas por ordem da sua obtenção. O teste pode, eventualmente, vir a aceitar a hipótese de carácter aleatório ao nível de significado por nós estabelecido. No entanto, pode ter sido completamente impotente para detectar o desvio sistemático introduzi-

Para estimar σ^2 é preciso reproduzir em zonas do terreno diferentes (ou na mesma zona em direcções cruzadas - a opção dependendo do que já se saiba ou presuma sobre ele, em particular sobre efeitos de lateralidade e tamanho de grão, de forma a minimizar eventuais erros sistemáticos) m medidas exactamente iguais, isto é, com as mesmas distâncias interelectródicas, dimensões horizontais de eléctrodos aparentes e correntes injectadas. O objectivo destas m medições não será, então, apenas o de estimar σ^2.

4.6.1.2 Carácter aleatório das medidas

O carácter aleatório das medidas é difícil de verificar como tal. De facto, quase todos os testes relativamente potentes são testes de corrida ("run tests") ou de sequência. Isto é, as medidas são colocadas em sequência e é testado, de diferentes modos, o comportamento dos elementos contíguos da sequência. A hipótese H_0 ("null hypothesis") que consideramos é o carácter aleatório das medidas. A contra-hipótese é o carácter não aleatório das medidas. Mas o teste é feito com uma sequência particular destas medidas. O que podemos é escolher uma sequência que suspeitamos vir a conduzir, com mais probabilidade, à rejeição de H_0. Isso diminui a probabilidade de erros do tipo II (β) ou, por outras palavras, aumenta a potência do teste. O problema reside em que *essa potência é criticamente dependente da sequência definida*. Assim, por exemplo, se suspeitarmos que os nossos aparelhos de medida tendem a dar resultados por excesso devido a sobreaquecimento por funcionamento demorado, construímos a nossa sequência colocando as medidas por ordem da sua obtenção. O teste pode, eventualmente, vir a aceitar a hipótese de carácter aleatório ao nível de significado por nós estabelecido. No entanto, pode ter sido completamente impotente para detectar o desvio sistemático introduzi-

do por uma outra qualquer causa, não ligada à ordem de obtenção das medidas, e que, portanto, a sequência construída não revela. Saliente-se que com m medidas podemos elaborar m! sequências.

Um dos testes de corrida mais potentes (estabelecida a sequência!) é o chamado teste dos quadrados das diferenças sucessivas (Aïvazian, 1978, p. 72-74) que pressupõe uma distribuição normal da população das medidas. Colocadas essas medidas em sequência, $x_1, \ldots x_m$, e definidos

$$q^2\ (m) = \frac{1}{2\ (m-1)} \sum_{i=1}^{m-1} (x_{i+1} - x_i)^2$$

e

$$s^2\ (m) = \frac{1}{m - 1} \sum_{i=1}^{m} (x_i - \bar{x})^2$$

onde $\bar{x}$ é a média, toma-se, como zona crítica de rejeição de H_0 a um nível de significado α,

$$\frac{q^2(m)}{s^2(m)} < \gamma_\alpha\ (m)$$

Os valores de $\gamma_\alpha(m)$ para $m \leq 20$ e $\alpha = .05, .01, .001$ podem encontrar-se em Aïvazian (1978, p. 73) e para $m > 20$ podem obter-se através de

$$\gamma_\alpha(m) = 1 + \frac{u_\alpha}{\sqrt{m + .5\ (1+u_\alpha^2)}}$$

onde u_α é o quantil de ordem α da distribuição normal reduzida.

Quer em Davis (1973), quer em Aïvazian (1978), podem encontrar-se outros testes de sequências, não paramétricos, independentes da distribuição suposta para a população, baseados quer na diferença entre elementos contíguos da sequência, quer nas diferenças desses elementos para a mediana da amostra. Essas diferenças permitem construir uma nova sequência de 3 estados possíveis (-, 0, +) e é, ou sobre o tamanho de subsequências de um único estado, ou sobre o número e posição das mudanças de estado, que os testes se constroem.

4.6.1.3 Normalidade da distribuição

Outro resultado que teria para nós interesse seria o de testar a normalidade da distribuição da população das potências mensuráveis, a partir da amostra de medidas de que dispomos. *O teste clássico, aplicável aliás a qualquer hipótese de distribuição da população, é o teste de* χ^2 *de "bondade" do ajuste de Karl Pearson.* Em linhas gerais, o domínio da variável aleatória é dividido em r intervalos e a probabilidade de uma medida cair no intervalo k é calculada de acordo com a distribuição hipotética. Seja entretanto m_k o número de medidas da nossa amostra pertencentes ao intervalo k. Então, se a mesma amostra serve para estimar os ℓ parâmetros da distribuição (no nosso caso de distribuição normal, $\ell = 2$ e p_k tira-se das tábuas da distribuição normal standardizada), a variável aleatória

$$\chi^2 = \left\{ \sum_{k=1}^{r} \frac{(m_k - mp_k)^2}{mp_k} \right\}$$

distribui-se assimptoticamente como χ^2 com m - ℓ - 1 graus de liberdade. Para um nível de significado α, a zona crítica de rejeição (da hipótese da distribuição da população ser a suposta) é dada por

$$X^2 > \chi^2_{1-\alpha}$$

onde $\chi^2_{1-\alpha}$ é o fractil obtido a partir das tábuas de χ^2 com m - ℓ - 1 graus de liberdade.

Naturalmente que têm de ser tomadas algumas precauções na partição do domínio da variável. Assim o número m_k de observações em cada intervalo deve ser suficientemente grande para que X^2 se aproxime da distribuição de χ^2. Brandt (1973, p. 146) sugere que deva ser $m_k > 4$, como regra empírica. Outros autores apontam para valores maiores. Por outro lado, também o número de intervalos (um dos quais pode ser infinito) não pode ser muito pequeno. Aïvazian (1978, p. 79) sugere $m_k > 7$ e $r > 8$

Outros testes de normalidade são possíveis, como o de Kolmogorov-Smirnov (Silvey, 1970, p. 140-141) ou os testes aproximados baseados no facto de na distribuição normal os coeficientes de simetria e de curtose serem nulos (Aïvazian, 1978, p. 82-83). O teste de bondade de ajuste de Pearson exige uma amostra de razoável número de elementos. Aïvazian (1978, p. 84-87) apresenta dois testes baseados num conjunto de pequenas amostras com número de elementos $m \geq 3$ por amostra. Estes tipos de testes convêm-nos, sobretudo se quisermos testar também a independência das distribuições dos erros a diferentes distâncias interelectródicas e a constância da sua variância (como sabemos, a variância dos erros é igual à das medidas).

4.6.1.4 Estimativa da variância, Homogeneidade e independência

Entretanto, a partir duma amostra de m elementos é possível estimar a média de distribuição da população pela média da amostra e a variância de distribuição da população (σ^2) por $\sigma^{2*} = \frac{m}{m-1} s^2$ onde s^2 é a variância da amostra. Estas estimativas são não enviesadas. Temos assim estimado σ^2.

Sabemos ainda que, para distribuições normais das populações das medidas, $\{m\ s^2/\sigma^2\}$ distribui-se como χ^2 com $m - 1$ graus de liberdade, o que permite, de forma simples, obter intervalos de confiança para a estimativa de σ^2 (Cramer, 1960, p. 438 - 444).

Se recolhermos amostras correspondentes a distâncias interelectródicas diferentes (sejam m_i e m_j os números de elementos dessas amostras), assegurada a normalidade das distribuições, é sabido que, se as duas distribuições tiverem a mesma variância σ^2, a estatística

$$\left\{ \frac{\sigma_i^{2*}}{\sigma_j^{2*}} \right\}$$

distribui-se segundo a lei de Fischer, $F_{m_{i-1},\ m_{j-1}}$, o que nos permite com facilidade testar, a qualquer nível de significado, a hipótese de constância de σ^2 (Winer, 1971, p. 37-41).

Em particular, se $m_i = m_j = m$, pode-se calcular o coeficiente de correlação entre as amostras de medidas, a partir do quociente da sua covariância pelo produto dos seus desvios médios quadráticos. Esse coeficiente de correlação, r*, é uma estimativa do coeficiente de correlação r entre as populações de que as amostras foram retiradas. Sabe-se também que, se o coeficiente de correlação r for nulo, isto é, se as populações não forem realmen-

te correlacionadas, a estatística

$$\frac{|r^*|\sqrt{m-2}}{\sqrt{1-r^{*2}}}$$

distribui-se segundo a lei de Student com m-2 graus de liberdade, o que possibilita testar a hipótese r = 0 (Aïvazian, 1978, p. 107).

Saliente-se, no entanto, que o teste enferma, ainda que, talvez, com menos gravidade, dos defeitos do teste de carácter aleatório de cada amostra. De facto, o cálculo da covariância das amostras depende da maneira como são seriadas. Anote-se também que estes testes com amostras recolhidas a diferentes distâncias interelectródicas exigem que as correntes injectadas (e eventualmente, se se quiser, as dimensões horizontais de eléctrodos) sejam de tal forma escolhidas para cada distância interelectródica que as potências medidas venham da mesma ordem de grandeza, como é óbvio, de amostra para amostra.

4.6.1.5 Medidas aberrantes.

Um outro problema que nos importa abordar: o das medidas que, por razões acidentais, se desviam do comportamento estatístico previsto, tomando valores aberrantes ("outliers"). Dispomos de uma variedade de técnicas para resolver o problema. A mais simples consiste em eliminar da amostra os valores extremos, superior e inferior, ou substituí-los pelos imediatamente contíguos ("Winsorização"). Outros eliminam valores de amostras apenas quando excedem um certo valor. Assim o critério de Chauvenet elimina, numa amostra de m elementos, a medida cuja probabilidade de ocorrência seja 1/2m ou menor, conhecida a hipotética distribuição de população, e estimados os seus parâmetros, naturalmente. Um outro critério é o de eliminar todas as medidas que resultem

fora do intervalo $\pm 3\sigma$, estimado, obviamente.

Importantes no estudo dos "outliers" são também os trabalhos de Mc Millan (1971) e Mc Millan e David (1971) relativos a distribuições normais com variância conhecida ou desconhecida, e a sua importância reside na comparação que fazem da "performance" de outros critérios também usuais na rejeição de "outliers": o de resíduo em excesso duma constante predeterminada, o critério de Murphy e o de Grubbs. O leitor poderá encontrar aí uma descrição desses três tipos de testes. Igualmente de interesse são os trabalhos de Guttman e Smith (1969, 1971), por tratarem especificamente de amostras pequenas retiradas de distribuições normais e por compararem os resultados obtidos por aplicação de três regras que explicitam, uma das quais, aliás, é a "winsorização" de que já falámos.

De uma forma geral, são imediatamente perceptíveis os perigos destes critérios. Por exemplo, numa distribuição normal, qualquer erro pontual, por mais aberrante que pareça, tem probabilidade ainda que mínima de surgir. O nosso caso é particular, pois o nosso algoritmo, ao definir p_r a partir do intervalo 2σ e ao utilizá-lo como majorante do erro, está, no fundo, a considerar como resultados aberrantes os que caem fora desse intervalo, isto porque a probabilidade de isso acontecer (.05) é tão baixa que os poucos que venham a surgir podem ser facilmente rejeitados ou substituídos por novas medidas, sem afectar a interpretação global dos resultados. No entanto, merecem sempre muita atenção, pois podem ter um significado particular. Uma medida aberrante pode, por exemplo, significar a presença de uma formação rochosa anómala e localizada, de interesse de per si, embora sem interesse para o problema de inversão do terreno estratificado em que está embebida, ou pode, significar, por exemplo, uma distracção do operador que

efectuou ou anotou as medidas. Obviamente, a atenção deve redobrar se o número de resultados a rejeitar for superior a um e, particulamente, se eles tiverem qualquer tipo de contiguidade entre si, isto é, se retirarem o comportamento aleatório à amostra, e ainda mais se se detectar correlação entre medições feitas a diferentes distâncias interelectródicas.

O problema dos "outliers" nunca poderá ter, assim, resolução completamente satisfatória. Uma medida aberrante pode evidenciar-se logo na curva da resistividade aparente homogénea. E, logo aí, há que tomar uma decisão sobre se corresponde a uma verdadeira medida aberrante ou a um estrato que só influencia uma particular medida ou a uma formação geológica anómala. Mas pode ficar disfarçada pelo andamento da curva motivado pelo terreno real. Nas curvas de modelos seguintes, se for utilizada como medida fixa, ficará indetectada e, como veremos na secção 4.8, pode até levar à conclusão de que o modelo em estudo não representa o terreno, quando o contrário é que é verdadeiro. Essa é a situação pior e só a utilização de séries (ou falsas séries), que abordaremos a seguir, poderia detectar o "outlier". Entretanto, *se o operador tiver a possibilidade de utilizar medidas fixas diferentes no teste do modelo seguinte, a discrepância de resultados entre os valores dos parâmetros num e noutro modelo alerta-o para a possibilidade de ter utilizado, num ou noutro caso, uma medida aberrante como medida fixa.*

Os "outliers" existentes no fim do lote de medidas são sempre detectáveis ou pelo menos analisáveis (porque não correm o risco de serem utilizados como medidas fixas) quando se atinge o modelo a que correspondem curvas aparentemente horizontais. *O problema reside então em saber se a medida deve ser considerada como aberrante ou significativa de que a horizontalidade ainda não foi conseguida, o que, a ser verdade, exigiria o ensaio de modelos mais complexos.* Se a medida for isolada, o problema pode não ser grave porque en-

tão ou é aberrante ou corresponde à existência de uma estrutura de terreno dificilmente interpretável, mas que em termos práticos pode não ser muito afastada do modelo. Mas, se se apresentarem duas ou três medidas aberrantes consecutivas, o operador será, possivelmente, levado a concluir, erradamente, que o modelo não serve e representa muito mal o terreno

4.6.2 Séries de medidas

4.6.2.1 Vantagens da sua utilização

Recordemos que o nosso objectivo fundamental é estimar σ^2. De facto, conhecido σ^2, fica conhecida uma aproximação, 4.4 , da matriz de covariâncias das estimativas, admitida a linearização das potências na vizinhança apropriada do valor correcto do vector de parâmetros. É então possível, como vimos, estimar o vector de parâmetros com uma certa região de confiança associada.

Uma outra forma de estimar directamente a matriz de covariâncias, sem passar obrigatoriamente por σ^2, é a de considerar, não uma, mas m séries de medidas, m lotes de medidasnas mesmas condições, e fazer m inversões paralelas, obtendo assim uma amostra de m estimativas e *libertando toda a análise da dependência do conhecimento de* σ^2. O processo apresenta algumas, outras, vantagens claras:

Em primeiro lugar, *não exige que as medidas sejam exactamente feitas nas mesmas condições*. Para estimar σ^2 precisávamos de m medidas exactamente com as mesmas distâncias interelectródicas, as mesmas dimensões horizontais de eléctrodos e as mesmas correntes injectadas. Para obter m estimativas do vector de parâmetros basta-nos garantir que as m medidas correspondentes a cada distância interelectródica sejam feitas em condições aproximadamente

iguais, isto é, basta-nos garantir que as distâncias interelectródicas, dimensões de eléctrodos e correntes injectadas sejam da mesma ordem de grandeza, evidentemente não tão díspares que as medidas não constituam uma amostra aleatória. Podemos, inclusivamente, para distâncias interelectródicas e dimensões horizontais de eléctrodos próximas, injectar apropriadamente correntes de forma a que as m medidas das m séries correspondentes a uma certa posição ou ordem nos lotes, associada a uma distância interelectródica, sejam exactamente iguais. Isto, partindo do princípio, comprovado por simulação com o programa, de que a distribuição das estimativas continua a manter as suas características nestas condições, como era, aliás, de prever; a estimativa é determinada pelo que as medidas "vêem" e é insensível a pequenas variações da distância interelectródica ou da dimensão horizontal dos eléctrodos, irrelevantes perante os erros das medidas.

Aliás, o carácter aleatório da amostra e a normalidade das distribuições das estimativas dos parâmetros, distribuições marginais da distribuição multidimensional das estimativas do vector de parâmetros, podem ser testados directamente, o que é muito mais importante do que testar a distribuição dos erros, pois, como vimos, o facto de essas características se verificarem nesta distribuição não assegura automaticamente que se verifiquem naquela. Os testes a utilizar são em tudo iguais aos utilizados no estudo da distribuição dos erros e atrás apresentados. Testes para avaliar da normalidade da distribuição multidimensional das estimativas do vector de parâmetros podem encontrar-se em Gnanadesikan (1977, p. 161-195).

Outra vantagem, e não pequena, é que a média da amostra de estimativas estima o vector de parâmetros com menor desvio quadrático médio marginal (e condicional na origem) do que cada estimativa individual. Na verdade

divide-o por $\sqrt{m}$. Isso permite, para o mesmo nível de probabilidade, definir regiões e intervalos de confiança muito menores.

Seja v* a média das m estimativas de um dado parâmetro correspondentes a uma situação de n medidas, a n distâncias interelectródicas. Seja σ^* a estimativa $\sigma^* = \sqrt{\frac{m}{m-1}}\, s$ do desvio médio quadrático da distribuição das estimativas, onde s é o desvio médio quadrático da amostra. Chamando v ao valor correcto do parâmetro correspondente a essas n distâncias interelectródicas, intervalos de confiança para v podem sem construídos a partir da estatística

$$\left\{\frac{v^* - v}{\sigma^*/\sqrt{m}}\right\}$$

que se distribui segundo a lei de Student com m-1 graus de liberdade.

Esta conclusão ressalta do facto de que, se as estimativas se distribuem normalmente com variância σ^2, então a média duma amostra de m estimativas distribui-se normalmente com variância de σ^2/m e aliás distribui-se assim, mas assimptoticamente, se aquelas estimativas não forem normais.

Os intervalos de confiança são constituídos sobre as distribuições marginais das estimativas do vector de parâmetros, mas, na verdade, esse vector é uma variável multidimensional, e, portanto, permite definir regiões de confiança mais justas.

Prova-se que, definida a estimativa $\Sigma^* = \frac{m}{m-1}\, S$, onde S é a matriz de covariâncias da amostra multidimensional, e definida, segundo Hotelling, a estatística

$$T^2 = \{m\ (\bar{v}^* - \bar{v})^T\ \Sigma^{*-1}\ (\bar{v}^* - \bar{v})\}\ ,$$

a nova estatística

$$\{\frac{m - n}{m\,n - n}\ T^2\}$$

distribui-se segundo a lei de Fischer com n e m-n graus de liberdade, onde n, número de distâncias interelectródicas utilizadas, é igualmente o número de parâmetros componentes do vector de parâmetros. É então possível, a partir desta distribuição, estabelecer regiões de confiança a qualquer nível de probabilidade.

O desvio quadrático médio podia ser reduzido, porém, se, obtidas as séries nas mesmas condições de medição, se fizesse directamente a média das medidas e se procedesse a uma única inversão com essas m médias. Cairíamos então na obrigatoriedade de estimar σ^2 para obter a matriz de covariâncias das estimativas e na situação que abandonámos. Ao realizar inversões paralelas detecta-se melhor o comportamento do algoritmo para as diferentes distâncias interelectródicas e a sobreposição do ruído à informação veiculada. Assim, os critérios de paragem de recuo ficam mais claros.

Também se consegue facilmente abordar o problema da existência de "outliers" ou "wild shots", na acepção ampla que lhe demos, *detectando-os pela anormalidade de uma estimativa particular num quadro de bom condicionamento do algoritmo. O problema da detecção dos "outliers" fica reduzido ao da sua identificação numa amostra duma distribuição normal (ver 4.6.1.5) constituída pelas estimativas.*

4.6.2.2 Formação das séries

As vantagens enumeradas não chegam para recomendar o processo em ter-

mos económicos, se se não pretender grande precisão na estimativa a obter, tal a quantidade de trabalho extra que implicam, quer na recolha de medidas no campo, quer no tempo de computador utilizado. A circunstância do programa que apresentamos no capítulo seguinte efectuar a inversão paralela de m = 9 séries reflecte, mais, o facto do presente trabalho ter apenas a intenção de explorar e estudar uma técnica de inversão e abrir o caminho para o seu futuro aproveitamento mais eficiente. Nestas condições é possível, simulando medidas no campo com um outro programa auxiliar, confirmar e testar alguns resultados de forma mais clara do que utilizando um único lote de medidas. Além disso, como veremos, há situações que exigem mesmo a utilização do método das séries, se algum rigor é pedido.

Há, todavia e felizmente, possibilidade de dispor de um processo semelhante, embora recorrendo a muito menos medidas de campo. De facto, podemos efectuar, por exemplo, apenas 4 séries de medidas e depois fazer inversões paralelas, *cruzando as medidas*. Imaginemos, por exemplo, que testávamos o modelo de um estrato, com 3 parâmetros portanto, para o que precisávamos de 3 medidas a 3 distâncias interelectródicas diferentes. Mas, de facto, correspondentes aproximadamente a cada uma das distâncias interelectródicas, dispomos de 4 medidas, tiradas das nossas 4 séries, de modo que podemos obter $4 \times 4 \times 4$ estimativas. É provável que as estimativas venham não aleatórias, em maior ou menor grau, uma vez que cada medida é utilizada na construção de diferentes estimativas. Referimos já a forma de testar a hipótese de carácter aleatório e de normalidade. No entanto o problema atenua-se. Na realidade, o número de estimativas cresce exponencialmente com o número de parâmetros n exigidos pelo modelo. Não faz sentido efectuar todas as 4^n inversões paralelas (para n = 5, modelo de 2 estratos, 1024 inversões!). A solução é realizar ape-

nas m inversões *escolhidas aleatoriamente* de entre as 4^n possíveis.

Mas, na verdade, nem sequer são estas séries que nos interessam mais, pois ainda assim exigem recolha de medidas no campo. *Quando desejamos utilizar várias medidas, de forma a obtermos para cada medida móvel uma amostra de estimativas, ou quando a dificuldade de interpretação do terreno em estudo o exige, recorremos a "falsas séries", construídas, como veremos, a partir dum único lote ou série real de medidas.* Tudo o que nesta secção foi discutido para as séries verdadeiras é válido para essas falsas séries.

4.7 Análise das curvas de parâmetros aparentes.

4.7.1 Séries de medidas. Medidas não correlacionadas. Definição do problema.

Porque o programa está preparado para inverter em paralelo m séries de medidas, abordaremos em primeiro lugar este procedimento e mencionaremos depois as alterações necessárias para tratar o caso de um único lote de medidas. Também aqui todos os resultados que exporemos são aplicáveis às falsas séries que definiremos mais tarde.

Dispomos, então, não apenas de uma estimativa $\bar{v}^{*k}$ para cada situação definida por n medidas de um único lote, tantas quantas os n parâmetros que definem o modelo em teste, mas de m estimativas $\bar{v}^{*k}$, k = 1, ..., m,. constituindo uma amostra aleatória duma população, em princípio, normalmente distribuída. A matriz de covariâncias da população é estimada de forma não enviesada pela matriz de covariâncias da amostra, com cada elemento multiplicado por m/(m-1).

Começaremos por abordar a análise de cada curva de parâmetros aparentes separadamente, isto é, como se os parâmetros não fossem correlacionados.

Embora isso, como sabemos, despreze informação dada justamente pela correlação, permite a utilização de técnicas mais simples e a maior parte das vezes suficientemente poderosas. Cada curva é então constituída pelas médias das estimativas de cada parâmetro correspondentes a cada situação de n medidas, n-1 fixas e uma móvel (4.2). Sabe-se que estas médias se distribuem marginalmente normalmente, nas condições que estamos a supor, de média ou valor esperado igual ao valor correcto do parâmetro e de variância igual à definida na estimativa da matriz de covariâncias da variável multidimensional, dividida por m.

Os passos fundamentais da análise duma curva de parâmetro aparente são, como vimos na secção 4.2 , verificar se os parâmetros se podem considerar constantes ao longo da curva, determinar quais as medidas fixas a adoptar para testar o modelo seguinte, se o não forem, ou determinar regiões de confiança, a uma certa probabilidade (ou, mais modestamente, uma medida do erro provável), para os parâmetros, no caso inverso. A avaliação do erro dos parâmetros já foi suficientemente tratada. Cada curva é constituída pela média das estimativas do parâmetro. Obviamente, o instrumento fundamental que nos falta para análise (releia-se 4.2) é o testar, a partir dessas médias de estimativas (ou estimativas individuais, se só se dispõe dum lote), se é lícito ou não considerar os parâmetros constantes.

4.7.2 Análise da variância

No caso de termos vários lotes de medidas, é possível testar a hipótese, simultaneamente, para diversos pontos que definem a curva. De facto, em grande parte do domínio da curva de um parâmetro aparente, que designaremos por v, a variância pode supor-se constante. Conhecemos, aliás, processos

de o testar. *O problema que se põe é o de saber, a partir das médias das estimativas, que constituem as diferentes ordenadas desses pontos, se se pode considerar, a um certo nível de confiança, que os valores correctos dos parâmetros nesses pontos são iguais, e surge quando se pretende decidir se a curva é, ou não, horizontal.*

Basta-nos, então, fazer uma análise de variância, técnica devida a Fischer para testar a hipótese de média igual entre um lote de amostras.

Designemos por

$$v_i^{*k} \qquad (k = 1, \ldots, m)$$
$$(i = 1, \ldots, p)$$

uma estimativa particular de v, onde p é o número de pontos da curva a que aplicamos a análise de variância e m o número de séries ou estimativas de que dispomos para cada ponto. Sejam v_i^*, i = 1, ..., p, as médias dessas m estimativas associadas com cada ponto e v^* a média de todas as estimativas.

Definamos

$$S_A = \sum_{i=1}^{p} \sum_{k=1}^{m} (v_i^* - v^*)^2 = m \sum_{i=1}^{p} (v_i^* - v^*)^2$$

$$S_B = \sum_{i=1}^{p} \sum_{k=1}^{m} (v_i^{*k} - v_i^*)^2$$

e

$$S = \sum_{i=1}^{p} \sum_{k=1}^{m} (v_i^{*k} - v^*)^2$$

Atendendo às definições de S_A , S_B e S, pode-se verificar com facilidade que $S = S_A + S_B$.

As p amostras que estamos a considerar supõem-se retiradas de uma mesma população de variância σ^2_v, ou de populações com a mesma variância, para se ser mais exacto.

São conhecidas as seguintes distribuições, supostas distribuições normais das estimativas: S/σ^2_v segue χ^2 com mp-1 graus de liberdade; S_B/σ^2_v segue χ^2 com mp-p graus de liberdade; S_A/σ^2_v segue χ^2 com p-1 graus de liberdade. (Brandt, 1973, p. 211-212).

As expressões

$$s^2 = \frac{S}{m\ p-1}$$

$$s_B^2 = \frac{S_B}{m\ p-p}$$

$$s_A^2 = \frac{S_A}{p\ -\ 1}$$

são estimativas não enviesadas da variância da população.

Prova-se que $Q = \{s_A^2/s_B^2\}$ se distribui segundo $F_{(p-1,\ m\ p-p)}$. Se a hipótese de igualdade das médias das populações, valores correctos de v, for falsa, então as médias das respectivas amostras serão muito diferentes. Isso aumentará significativamente S_A^2. A região crítica de rejeição da hipótese de médias iguais, a um nível de significado α, é

$$Q > F_{1-\alpha\ ,\ p-1,\ m\ p-p}$$

4.7.3 Comparação de dois pontos da curva

Muitas vezes não é a situação de comparar as médias ao longo duma parte da curva que nos interessa. Por exemplo, *ao escolher as medidas fixas para testar o modelo seguinte, pode-nos interessar encontrar, a um certo nível de significado, medidas que correspondam, claramente, a parâmetros diferentes*. Por outro lado, podemos ter dúvidas sobre a diferença dos parâmetros, apenas numa ou noutra medida, para optar entre a validade do modelo ou a consideração dum estrato muito delgado e pouco contrastante que influencie apenas essas medidas.

Suponhamos então a distribuição normal e a variância homogénea e duas amostras v_i^{*k}, k = 1,..., m, e v_j^{*k}, k = 1,...,m, de médias v_i^* e v_j^*. A variância pode ser estimada a partir de cada amostra, multiplicando por m/(m-1) a variância da amostra. Sejam σ_i^{2*} e σ_j^{2*} essas estimativas. Sejam v_i e v_j os verdadeiros valores dos parâmetros correspondentes às abcissas de ordem i e j da curva do parâmetro. Então a estatística

$$t = \left\{ \frac{(v_i^* - v_j^*) - (v_i - v_j)}{\sqrt{(\sigma_i^{2*} + \sigma_j^{2*})/m}} \right\}$$

distribui-se segundo a lei de Student com 2 m-2 graus de liberdade. Na hipótese que queremos testar, de $v_i = v_j$, a estatística

$$\left\{ \frac{v_i^* - v_j^*}{\sqrt{(\sigma_i^{2*} + \sigma_j^{2*})/m}} \right\}$$

distribui-se então segundo Student com 2 m-2 graus de liberdade, e a partir das tábuas dessa distribuição, é imediata a construção de testes para a hipótese a qualquer nível de significado. É até possível determinar a potência dos testes (Winer, 1971, p. 33-35)

4.7.4 Variância não homogénea

Infelizmente, nem sempre a variância pode ser considerada homogénea no nosso caso, pois sabemos que ela aumenta à medida que se processa o recuo. Note-se que o *teste que acabámos de apresentar é robusto com respeito a desvios moderados da hipótese de homogeneidade* (Winer, 1971, p. 37-38). Por exemplo, com m = 5, e para o teste de nível .05, o facto da variância duma população ser dupla da da outra introduz um erro de 1% no nível de significado do teste, ou seja, um "erro" total de 5.10^{-4}. Aliás, o teste é também robusto em relação à hipótese de normalidade.

Mesmo assim, há todo o interesse em abordar o problema na hipótese de não homogeneidade da variância. A estatística que tem vindo a ser utilizada continua a ser a mesma

$$t = \{\frac{(v_i^* - v_j^*) - (v_i - v_j)}{\sqrt{(\sigma_i^{2*} + \sigma_j^{2*})/m}}\}$$

mas, para valores não muito grandes de m (inferiores, digamos, a 30, o que é o nosso caso), já *não se distribui segundo a lei de Student*. Welch (1947) estudou a distribuição e Aspin (1949) preparou tábuas para manipulação. No entanto, o assunto ainda parece ser tema de controvérsia (Winer, 1971, p. 42). O desenvolvimento do teste é em tudo idêntico ao anterior com utilização das

tábuas de Aspin. Bishop e Dudewicz (1977), entretanto, alargaram a aplicabilidade da técnica de análise de variância ao caso de não homogeneidade.

4.7.5 Análise multidimensional

Temos estado a trabalhar com cada parâmetro isoladamente. Naturalmente que *muito mais informação se pode retirar da análise conjunta de todos os parâmetros*. Por exemplo, uma inflexão na curva de um parâmetro ganha muito mais significado se for acompanhada por inflexões simultâneas nas outras curvas e tanto mais quanto menos correlacionados os parâmetros. Isto é, é muito mais eficiente a análise efectuada sobre a variável multidimensional $\bar{v}$, vector de parâmetros.

A técnica de análise de variância pode, nas condições de homogeneidade da matriz de covariâncias da distribuição multidimensional das populações, ser utilizada também aqui, com as modificações apropriadas (Winer, 1971, p. 232-240). O tratamento matemático envolvido é simples mas computacionalmente pesado, demasiado pesado.

De mais interesse, e de mais fácil aplicação, é o teste para verificar apenas a hipótese de dois vectores de parâmetros correspondentes a dois pontos da curva serem iguais. Trata-se de estender às distribuições multidimensionais alguns resultados bem conhecidos da teoria da amostragem de variáveis unidimensionais. Assim, o teste é análogo ao equivalente para cada parâmetro de per si e baseia-se, como nesse caso, no facto de a distribuição da média da amostra constituída pelas m estimativas do vector de parâmetros, obtidas com as n medidas, a n distâncias interelectródicas, correspondentes a um ponto da curva, ser considerada normal, de média igual ao verdadeiro vector

de parâmetros nesse ponto. E o que é mais importante é que a diferença das médias de duas amostras correspondentes a dois pontos diferentes da curva é, similarmente ao que acontece no caso de um único parâmetro, distribuída normalmente de média igual à diferença dos vectores de parâmetros correspondentes aos dois pontos.

Chamaremos $\bar{v}_i^*$ e $\bar{v}_j^*$ às médias das amostras dos dois pontos i e j da curva. Suponhamos que as estimativas se distribuem, independentemente do ponto da curva, com a mesma matriz de covariâncias, $\Sigma = \Sigma_i = \Sigma_j$. Sejam Σ_i^* e Σ_j^* estimativas dessa matriz, obtidas a partir das matrizes de covariâncias das amostras multiplicadas por $\frac{m}{m-1}$ para que sejam não enviesadas, como tínhamos feito com as variâncias no caso de um parâmetro só. Definamos

$$\Sigma = \frac{\Sigma_i^* + \Sigma_j^*}{2}$$

ainda uma estimativa não enviesada de Σ.

O objectivo é testar a hipótese $\bar{v}_i = \bar{v}_j$ de igualdade dos vectores de parâmetros nos pontos i e j. O teste a utilizar é conhecido como o teste de Hotelling. Definamos a estatística

$$T^2 = \{\frac{m}{2} (\bar{v}_i^* - \bar{v}_j^*)^T \Sigma^{*-1} (\bar{v}_i^* - \bar{v}_j^*)\}$$

O teste baseia-se então na circunstância de que, se a hipótese for verdadeira, a estatística

$$\{\frac{2m - n - 1}{(2m - 2)n} T^2\}$$

se distribui segundo a lei de Fischer F com graus de liberdade n e 2 m - n - 1 ($F_{n,\ 2\,m\,-\,n\,-\,1}$).

Um teste global, mas aproximado, para verificação da hipótese $\Sigma_i = \Sigma_j$ pode ver-se em Davies (1973, p. 436-442) ou Winer (1971, p. 594-599) (teste de Box)

Infelizmente, e como era de prever pelo exemplo das distribuições unidimensionais, ligadas a um único parâmetro, não é fácil desenvolver testes económicos e eficientes para o caso das duas matrizes de covariâncias Σ_i e Σ_j serem diferentes. O leitor interessado poderá debruçar-se sobre o problema em Gnanadesikan (1977, p. 82-103) ou Dudewicz e Bishop (1979).

4.7.6 Estimativas correlacionadas

Veremos, mais à frente, que o processo de inversões paralelas pode conduzir a estimativas v_i^{*k}, k = 1, ..., m, e v_j^{*k}, k = 1, ..., m, correlacionadas. É possível ainda assim testar a igualdade $v_i = v_j$. Construamos a amostra

$$d^{*k} = v_i^{*k} - v_j^{*k} \quad ,k = 1, \ldots, m$$

e estimemos a respectiva variância de população por $\sigma_d^{2*} = \frac{m}{m-1} s_d^2$, onde s_d^2 é a variância da amostra. Então, na hipótese de igualdade de v_i e v_j, a estatística

$$\left\{\frac{d^*}{\sqrt{\sigma_d^{2*}/m}}\right\}$$

onde d* é a média da amostra, segue a lei de Student com m - 1 graus de liberdade, o que permite então a elaboração do teste da hipótese.

Outra forma de resolver o problema das estimativas correlacionadas é desfazer, de certa forma, a correlação, sorteando-as ("randomization"), e recuperando assim a possibilidade de utilizar todas as ferramentas estatísticas que abordámos, incluindo a técnica da análise de variância. Naturalmente, o processo é um pouco grosseiro, pois baseia-se, no fundo, na destruição da informação que a correlação exprime.

4.7.7 Uma única série de medidas

Suponhamos agora que não utilizávamos m séries, mas apenas um lote de medidas. Nessas circunstâncias supomos σ^2, ou conhecido, ou estimado independentemente da nossa série de medidas, e portanto com a confiança que quisermos, o que nos permite tomar essa estimativa como valor correcto. Podemos então, dentro da hipótese de normalidade e de linearibilidade das potências, considerar conhecida a matriz de covariâncias da distribuição multidimensional das estimativas do vector de parâmetros, correspondente a qualquer pontos das curvas de parâmetros aparentes, e, obviamente, conhecidas as variâncias das distribuições marginais (e condicionais na origem) das estimativas dos parâmetros componentes daquele vector.

As técnicas de análise de variância não são aqui aplicáveis, mas continua a ser possível testar a hipótese de igualdade de parâmetros entre dois pontos das respectivas curvas.

Comecemos pelos testes sobre as distribuições marginais. Sejam v_i^{*k} e v_j^{*k} as duas estimativas que possuímos nos pontos i e j da curva do parâ-

metro v e σ_i^2 e σ_j^2 as variâncias das estimativas nesses dois pontos. Então na hipótese de $v_i = v_j$ a estatística

$$\left\{ \frac{v_i^{*k} - v_j^{*k}}{\sqrt{\sigma_i^2 + \sigma_j^2}} \right\}$$

distribui-se segundo a lei normal reduzida, com o que se pode construir o teste pretendido.

Quanto aos testes de igualdade de dois vectores de parâmetros $\bar{v}_i$ e $\bar{v}_j$, eles podem ser elaborados, no caso das matrizes de covariâncias das estimativas serem iguais, $\Sigma_i = \Sigma_j = \Sigma$, a partir do facto de, na hipótese de ser verdadeiro $\bar{v}_i = \bar{v}_j$, a estatística

$$\left\{ \frac{1}{2} (\bar{v}_i^{*k} - \bar{v}_j^{*k})^T \Sigma^{-1} (\bar{v}_i^{*k} - \bar{v}_j^{*k}) \right\}$$

se distribuir como χ^2 com n graus de liberdade (Winer, 1971, p. 56).

4.7.8 Solução final

As técnicas que temos vindo a expor permitem-nos, por análise das curvas de parâmetros aparentes, determinadas pelas estimativas individuais ou pelas médias das estimativas fornecidas pelas séries de medidas, ir testando modelos de terrenos estratificados sucessivamente mais complexos até atingirmos um para o qual as curvas se podem considerar horizontais ou, doutro modo, os parâmetros constantes, dentro dos critérios definidos pelos testes utilizados.

Por outro lado, sabemos determinar, a partir duma única estimativa ou duma média de estimativas correspondentes a um ponto das curvas de parâmetros, definidas, portanto, por n ou por nx m medidas a n distâncias interelectródicas, uma região de confiança centrada nessa estimativa ou média e que contém, com uma certa probabilidade, o verdadeiro vector de parâmetros. Dito doutra maneira, temos forma de avaliar o erro que cometemos ao tomar a estimativa ou a média das estimativas como valor correcto do vector de parâmetros.

Mas podemos fazer melhor, uma vez que, *quando garantimos que as curvas são horizontais, todas as estimativas se referem ao mesmo vector de parâmetros, que será o vector de parâmetros que define o terreno, vector de parâmetros real.*

A primeira ideia que poderia ocorrer-nos, para obter um valor mais preciso de cada parâmetro, seria a de tomar a média de todas as estimativas. É imediato concluir que não é realmente a melhor, pois nem todas as estimativas nos merecem a mesma confiança. Aquela ou aquelas que correspondem a um ponto da curva (agora supostamente horizontal) de grande variância de estimativas são menos "seguras". Naturalmente, a filosofia adoptada no recuo é tal que essas zonas de grande variância, que correspondem, normalmente, à situação da medida móvel recuar muito para junto das medidas fixas, são eliminadas ou nem sequer operadas pelo utilizador. Mesmo assim, pode ser que exista uma variância relativamente diferente de ponto para ponto da curva. Uma segunda ideia que ocorre seria a de estimar o vector de parâmetro real a partir das medidas fixas e da medida móvel de maior distância interelectródica, situação que corresponde, normalmente, a menores variâncias. Ou mesmo redefinir n medidas do lote, de modo a obter o melhor condicionamento do pro-

blema e, portanto, menor variância das estimativas. Ou até ajustar pelo método de mínimos quadrados, não n medidas, mas todas as medidas do lote. Parece, no entanto, ilógico desprezar informação, esforços e tempo acumulados no estabelecimento destas curvas de parâmetros com que temos vindo a trabalhar e, ao contrário, introduzir um método muito mais pesado computacionalmente.

Podemos então, na alternativa, ponderar as estimativas.

Sejam, então, v_i^* , i = 1, ..., h, as estimativas ou as médias das estimativas (se usarmos m séries), calculadas em h pontos da curva dum parâmetro v, reconhecidamente horizontal. Sejam σ_i, i = 1, ..., h as respectivas variâncias. Então a variável

$$v^* = \left\{ \frac{\sum_{i=1}^{h} \frac{v_i^*}{\sigma_i^2}}{\sum_{i=1}^{h} \frac{1}{\sigma_i^2}} \right\}$$

é normalmente distribuída com variância

$$\sigma_v^2 = \frac{1}{\sum_{i=1}^{h} \frac{1}{\sigma_i^2}}$$

em torno de v. (Linnik, 1961, p. 120-129).

Infelizmente, não dispomos dos valores exactos de σ_i^2, mas apenas de estimativas. A distribuição de v* resulta, então, praticamente inutilizável. No entanto, as quantidades $1/\sigma_i^{2*}$, inversos das estimativas de σ_i^2, continuam a ter o valor de pesos. E se as estimativas forem suficientemente justas, is-

to é, se o número de séries for relativamente grande ou, na alternativa, for elevado o número de medidas utilizadas para estimar a variância da distribuição dos erros, a sua substituição em v* conduz a uma distribuição ainda aproximadamente normal.

4.7.9 Comportamento assimptótico das curvas

Mas a análise das curvas de parâmetros aparentes tem ainda outras potencialidades, paralelas ao procedimento aqui desenvolvido. É um facto bem conhecido que a análise das curvas de resistividades aparentes, resistividades aparentes de modelo homogéneo, a sua simples inspecção, permite recolher dados sobre as características do terreno estratificado, particularmente a partir das suas assímptotas. Assim,a resistividade aparente tende para a resistividade superficial quando as distâncias interelectródicas tendem para zero e aproxima-se da resistividade do substrato, entendido como a mais profunda resistividade que o lote "vê", quando, ao contrário, a distância interelectródica aumenta. *Não é, então, de estranhar que as curvas de parâmetros aparentes de modelos mais complexos revelem também interessantes propriedades assimptóticas*. Há todo um trabalho a fazer sobre as possibilidades de, a partir das curvas do modelo de n parâmetros, obter informação sobre parâmetros de modelos mais complexos. Em particular interessa-nos o comportamento assimptótico quando a medida móvel é recuada.

Imaginemos, por exemplo, que estávamos a testar o modelo de um estrato e procedíamos ao recuo da medida móvel, desenhando assim as curvas de parâmetros aparentes do modelo. Suponhamos que o terreno não era, na realidade, de um estrato, isto é, que a dimensão do lote de medidas nos pode permitir concluir que o modelo de um estrato não serve. Note-se que é, de facto,

assim que a questão deve ser posta, pois o terreno nunca será verdadeiramente de um estrato, apenas o lote de medidas é que pode "ver" só um estrato ou pode ver mais fundo.

Ao procedermos ao recuo, e se ele pudesse ser levado até ao fim, isto é, até considerarmos 3 medidas que fossem sensíveis apenas aos parâmetros r_1, h_1, r_2, e não a h_2 e r_3 e eventuais outros parâmetros de modelos mais complexos, então determinaríamos, a partir do modelo de um estrato, os verdadeiros valores dos 3 primeiros parâmetros, R_1, H_1 e R_2, qualquer que fosse a estrutura real do terreno. Isso, porém, é muitas vezes impossível, não só porque o recuo, como sabemos, não pode ser levado até onde quisermos, como também essas medidas podem não existir, pelos menos em termos práticos, dado o passo do nosso lote. De facto, acontece frequentemente as primeiras medidas que detectam r_2 virem já "contaminadas" ou determinadas também por resistividades e espessuras de outros estratos e não ser possível determinar então R_1, H_1 e R_2 "limpos", isto é, valores reais desses parâmetros e independentes portanto de outros parâmetros do terreno.

No entanto, podemos tentar encontrar ou prever estimativas dos verdadeiros valores R_1, H_1 e R_2, através do comportamento assimptótico das respectivas curvas de parâmetros do modelo de um estrato. O processo clássico é o de tentar ajustar à curva de cada parâmetro aparente, pelo método dos mínimos quadrados, polinómios, de grau não muito alto, escolhendo qual o polinómio que melhor se adapta por meio de um teste de bondade de ajuste de χ^2 efectuado sobre os resíduos (Meyer, 1975, p. 387-397). Naturalmente, exige-se que existam polinómios de grau baixo e bom ajuste. Já Grant (1956) fez notar que muitos dados geofísicos aceitam facilmente esta exigência. Trata-se de um problema de regressão linear que pode, aliás, ser feita simultaneamente sobre to-

dos os parâmetros, regressão linear múltipla, e para cuja solução qualquer razoável biblioteca de programas possui uma ou mais rotinas, não só utilizando polinómios como outras funções. O leitor pode encontrar em Chan (1970) um exemplo de aproximação polinomial a curvas de resistividade aparente.

Sabe-se também dos riscos envolvidos numa previsão ou extrapolação para valores exteriores ao intervalo da curva sobre o qual se construiu o ajuste. O problema, no nosso caso, agrava-se porque, para além da variância associada a cada ponto do curva ser diferente (perturbações heteroescedásticas, na nomenclatura da teoria da regressão linear), a maior variância ocorre, justamente, no extremo do intervalo da curva para além do qual se pretende extrapolar, o extremo inferior, onde a forma da curva, ainda por cima, é mais imprevisível, porque envolve uma mudança qualitativa, a de a curva poder ter aí um patamar ou não, correspondendo à existência de medidas limpas ou não.

Apesar disso, ainda que com métodos pouco sofisticados, há todo o interesse em inspeccionar os valores extremos das curvas dos parâmetros, pelo menos enquanto a variância e a condição da matriz se mantiverem em valores aceitáveis .

4.8 Enviesamento

4.8.1 Causas e precauções a tomar

Não temos, até aqui, referido um problema de extrema importância que a estratégia de inversão proposta levanta. E não o fizemos porque ele é, em certa medida, *independente do tratamento a que temos vindo a submeter as medidas*. O problema reside em que, ao efectuar o recuo da medida móvel,

desenhando as curvas de parâmetros aparentes do modelo de n parâmetros, mantemos fixas n-1 medidas, o que introduz um certo enviesamento em todas as estimativas que se obtêm, motivado pelo erro particular dessas n-1 medidas. Elas são escolhidas de tal forma que só uma delas é sensível (e pouco) aos dois novos parâmetros que a passagem do modelo n-2 para o modelo n introduz. As outras n-2 medidas fixas são praticamente insensíveis aos dois novos parâmetros e determinam, quase sózinhas, os n-2 parâmetros do modelo n "herdados" do modelo n-2.

Haverá situações de maior ou menor viés. De facto, o enviesamento pode considerar-se dependente de 3 factores. Primeiro, da escolha dessas n-2 medidas iniciais, da estimativa particular que determinam, melhor dizendo, do erro que a afecta. Se forem medidas a que correspondia no modelo n-2 uma má condição do jacobiano ou, doutro modo, uma variância muito alta das estimativas que definem, se variadas dentro do limites do seu erro provável, o enviesamento pode ser muito grande. Por outro lado, esse viés depende do maior ou menor grau de "fixidez" dos n-2 parâmetros herdados, por outras palavras, da maior ou menor sensibilidade dos n-2 medidas iniciais aos dois novos parâmetros. Inversamente, depende também da sensibilidade das duas outras medidas, em particular a fixa de ordem n-1, aos n-2 parâmetros herdados.

O enviesamento é menor se se tiver o cuidado de retirar, para medidas fixas, n-2 medidas, bem condicionantes, no modelo n-2, mas em que pelo menos uma delas seja já sensível aos novos parâmetros, isto é, tal que no modelo n-2 detecte já a presença desses novos parâmetros, um pouco como a medida de ordem n-1.

A experiência mostrou-nos que muita informação pode e deve ser recolhida, a partir não só das curvas do modelo n-2 como das curvas dos modelos

anteriores, por exemplo nesta questão de escolha das medidas de ordem n-2 e n-1.

Suponhamos que testávamos um modelo de 2 estratos. As curvas de resistividade aparente homogénea poderão ter então, na melhor das hipóteses, zonas bem distintas de comportamento. Pode-nos aparecer uma primeira zona constante, correspondente à ausência de influência de R_2 e R_3 sobre as medidas, seguida duma zona de perturbação, correspondente à zona de detecção de R_2, em que o comportamento da curva vai mudar. Nessa zona detecta-se R_2, mas com muito fraca definição; R_2 influencia as medidas, mas a informação que elas transmitem sobre H_1 e R_2 é ainda muito pequena. Na zona seguinte, pode surgir um comportamento da curva bem definido, em que ainda não se vê R_3, mas a influência de H_1 e R_2 é marcada e impõe o comportamento. Nessa zona, já as medidas veiculam informação suficiente sobre H_1 e R_2. Tudo se passa como se as medidas na 2ª zona "vissem" ou "sentissem" já H_1 e R_2, mas não os pudessem "observar" ou "ler", o que seria já possível nesta 3ª zona. Surge então nova zona de transição, correspondente à detecção de H_2 e R_3, e depois uma última zona de influência decisiva de todos os parâmetros. Paralelamente, as curvas do modelo de 1 estrato poderão apresentar uma primeira zona constante, em que só se vê H_1 e R_2, uma zona de perturbação, em que se "vê" H_2 e R_3, e uma zona de comportamento definido, em que se "observa" estes novos parâmetros. Se as curvas tivessem este comportamento sensato, a escolha das medidas para a nossa estratégia não ofereceria dificuldade.

Simplesmente, *é normal faltarem algumas destas zonas*. Imaginemos, por exemplo, que falta uma zona constante, um patamar bem definido nas curvas do modelo de 1 estrato. Isto é, entra-se logo numa zona de perturbação,

em que se vê H_2 e R_3, seguida de outra de comportamento definido. À parte o facto das curvas homogéneas e de modelo de um estrato não começarem na mesma medida, à parte isso, o facto de não existir zona constante nas curvas de um estrato não significa que não seja possível, nas curvas homogéneas, detectar uma zona de comportamento definido de influência maioritária de H_1 e R_2, uma zona de transição de já maior influência de H_2 e R_3 e uma zona de comportamento definido onde essa influência é notória, embora estas zonas possam não ser tão marcadas. É possível, então, recorrer à informação conjunta fornecida pelas curvas todas, para, ao recuar no teste do modelo de 2 estratos, escolher uma medida de ordem n-2 que "veja" H_2 e R_3 e uma medida de ordem n-1 que "observe" esses parâmetros.

Repare-se que a informação dada pela curva homogénea é maior quando tiver um máximo ou mínimo, pois é aí que as zonas de que falamos surgem mais claramente. *É isso é tanto mais útil para nós, quanto é nesses casos que, constatando que o terreno tem mais que um estrato, podemos prescindir do ensaio do modelo de um estrato e, portanto, ficamos obrigados a escolher medidas fixas para o modelo seguinte a partir, só, da curva homogénea.*

De qualquer forma, e regressando ao problema que vínhamos tratando, o enviesamento, que se traduz num erro da estimativa final dos parâmetros independente de qualquer outra consideração, não é detectado pelo processo de análise até aqui desenvolvido. E, pior do que isso, implica que os parâmetros possam variar artificialmente ao longo do recuo, particularmente os dois novos parâmetros (enquanto que os outros se mantêm quase constantes), levando-nos a rejeitar o modelo de n parâmetros, quando na verdade satisfaz o terreno.

De facto, suponhamos uma situação de enviesamento aguda em que as n-2 medidas iniciais determinam os n-2 parâmetros herdados completamente, com o erro de que estão afectadas (e que, se a condição do jacobiano for grande, se traduz num erro relativo muito maior dos n-2 parâmetros). Suponhamos até que esse erro é muito grande, que as medidas são aberrantes. Então, à medida que se faz o recuo, esses n-2 parâmetros vão ser determinados quase da mesma forma e, consequentemente, variar pouco, independentemente, aliás, do terreno real ser representável pelo modelo ou não. Imaginemos que é representável. Os dois novos parâmetros vão então ser determinados de forma a que, com aqueles n-2 outros parâmetros erradamente fixados, satisfaçam as duas novas medidas. Se não variassem de forma a evidenciar que o modelo n não serve, isto é, se variassem, mas de tal modo, aleatoriamente, que pudéssemos concluir que o modelo n serve, então cairíamos na situação de haver *dois tipos de terrenos de n parâmetros satisfazendo as nossas medidas*. O real, de n parâmetros desconhecidos, e um outro, o que determinámos, com, pelo menos, n-2 parâmetros à partida profundamente errados. Conclusão: eles têm de facto de variar e de forma a rejeitar o modelo n. Note-se que a situação pode ser mais complexa porque, na verdade, há mais uma medida fixa. Se acontecer que essa medida fixa seja muito mais sensível a um dos novos parâmetros que ao outro então será este último que variará mais. O que é uma situação relativamente frequente, as derivadas da potência serem maiores em relação a H_2 do que as derivadas em R_3, em termos relativos. Corresponde à situação da medida de ordem n-1, mal escolhida, apenas conseguir definir o fim do estrato de resistividade R_2, sem ver claramente R_3.

Conclui-se, então, que uma única série de medidas, nas condições de estratégia que definimos, não basta para estimar os parâmetros e decidir com segurança da aceitabilidade de modelos, pois, embora o enviesamento pos-

sa não existir significativamente ou ser eliminado por uma escolha cautelosa das medidas (pagando o preço de limitar o domínio do recuo), o nível *existente de viés é desconhecido.*

4.8.2 Eliminação do enviesamento

A primeira tentação que surge, então, é a de abandonar a estratégia defendida e desenvolver outra que garanta a variabilidade de todas as medidas. Uma forma de o fazer seria, por exemplo: fixar apenas a 1.ª medida, que pode ser feita a tão pequena distância interelectródica quanto se queira e repetida com facilidade, estimando assim R_1, resistividade superficial real, e só R_1, quase com o erro que se quiser; e recuar todas as outras de forma a manter uma relação fixa entre si, por exemplo igual espaçamento. A relação a escolher deveria então garantir um razoável condicionamento ao longo do recuo e determinaria então, univocamente, as curvas de parâmetros aparentes. *A nossa experiência revela que não é fácil encontrar uma relação universal adequada, isto é, válida para todo o tipo de terrenos, e que, normalmente, o abandono da estratégia inicialmente defendida acarreta enormes problemas de condicionamento, a suportar em esforço computacional do algoritmo de optimização e em variância de estimativas.*

Conservando a nossa estratégia inicial, temos então que ter mais do que uma série de medidas. O número de séries a utilizar vai depender, em última análise, da precisão e da confiança com que queremos desenvolver a análise. Se queremos apenas uma informação ligeira sobre o terreno, podemos contentar-nos com uma única série, tomar precauções na escolha das medidas e tentar adivinhar, pelo comportamento de todas as curvas de parâmetros aparentes de modelos anteriores ao modelo n, se a variação dos parâmetros encontrada faz sentido ou é artificialmente criada pelo enviesamento.

Com duas séries já podemos fazer muito melhor juízo pois, *se a variação for significativa de não aceitação do modelo, ela é tendencialmente a mesma para as duas séries, mas, no caso contrário, a probabilidade de duas variações artificiais coincidirem é muito menor.* De qualquer forma, a informação retirada de duas séries continua a ser muito pobre em termos do erro da estimativa final dos parâmetros. Pode, no entanto, satisfazer o utilizador pouco exigente. Inclusivamente, com relativamente poucas alterações no programa, é possível considerar os n-2 parâmetros herdados conhecidos, ou por estimação sobre as curvas do modelo n-2, particularmente através do seu comportamento assimptótico, ou por outros métodos geofísicos, e utilizar apenas duas medidas novas para estimar os dois novos parâmetros, o que se traduz numa enorme economia global de esforço. Naturalmente, como vimos, o processo de estimação dos n-2 parâmetros herdados, pelas curvas do modelo n-2, tem particular sucesso se essas curvas apresentarem a tal zona constante, um patamar horizontal donde é possível então extraír medidas móveis para formar grupos de medidas limpas, insensíveis a outros parâmetros introduzidos pelos modelos seguintes.

Mas, se se quiser uma análise mais cuidada e uma avaliação algo melhor dos parâmetros, é preciso recorrer a alternativas dentro do quadro definido pela nossa estratégia. *A melhor alternativa, com utilização duma única série, é a de associar a cada medida móvel, que se toma ao longo do recuo, um grupo de n-1 medidas fixas iniciais diferente, embora todas nas condições definidas pela estratégia.* Pode não ser um grupo diferente para cada posição no recuo ou podem ser grupos em que apenas uma ou duas medidas difiram. Isso perturba um pouco a análise estatística de cada curva porque, por exemplo, dá origem a variâncias eventualmente diferentes conforme o grupo utilizado, *mas, no conjunto, e tanto mais quanto os grupos diferentes forem nume-*

rosos, cancela o enviesamento global da estimativa final e valida a análise da curva.

Se o desejarmos ou se formos a isso obrigados pelas dificuldades de interpretação do terreno, podemos mesmo efectuar, por inteiro, *duas ou mais inversões paralelas com grupos de n-1 medidas fixas diferentes*, suprimindo assim a necessidade de recolha de novas séries reais, criando assim *falsas séries.*

Quer as curvas singulares, quer as curvas resultantes da utilização de falsas séries, são tratáveis e analisáveis nos moldes que temos vindo a expor ao longo do capítulo e revelaram-se eficientes na eliminação do enviesamento, em todos os exemplos de inversão que abordâmos.

Infelizmente, nem sempre é possível ir buscar ao lote um número suficiente de grupos de n-1 medidas, nas condições que queremos, impostas pela estratégia seguida. Nessa altura não há outra alternativa do que recolher no campo mais medidas. Não necessitamos, em princípio, de novas séries inteiras de medidas, se quisermos utilizar a variante de construção de curvas acabada de expor. Basta-nos obter mais medidas para as distâncias interelectródicas menores, formando séries novas mas incompletas. Por exemplo, poderíamos recolher m medidas à menor distância interelectródica, m-1 à distância seguinte e assim por diante, até que às últimas distâncias corresponderia apenas uma única medida.

Mas então talvez a utilização do método de m séries completas tente o utilizador, não só porque permite diminuição segura do enviesamento, como porque estima os parâmetros correspondentes aos estratos profundos de eventuais modelos mais complexoscom precisão, ao contrário dos métodos das séries incompletas e das falsas séries, em que, na verdade, *no que respeita a*

esses parâmetros, acaba por se dispor apenas duma série.

O enviesamento, repete-se, não é consequência automática da adopção de medidas insensíveis aos parâmetros novos apresentados por cada novo modelo. É consequência do seu erro. Se, em particular, as medidas não tivessem erro, o viés desaparecia. O que se consegue com a utilização de várias séries de medidas é diminuir radicalmente o enviesamento. Cada série de medidas fornece estimativas enviesadas. Ao tomar a média de m conjuntos de estimativas supõe-se, correctamente, que a média da distribuição da população das perturbações nas estimativas dos parâmetros, causadas pelo enviesamento, é nula, e espera-se que o erro especificamente introduzido pelo enviesamento em cada parâmetro estimado seja desprezável em comparação com o erro que a análise estatística, que fizemos na secção anterior, prevê. Para garantir esse comportamento podemos, como fizemos no caso de uma única série, variar de alguma forma, e se possível, as medidas fixas adoptadas, inclusivamente cruzando medidas tiradas de todas as séries.

De qualquer forma, a aceitação de um determinado modelo, de acordo com os critérios que temos vindo a definir ao longo desta secção, é sinal de que o enviesamento, a existir ,é pequeno, pois, *se é possível que uma variação artificial dos parâmetros nos possa levar a rejeitar um modelo que devia ser aceite, só por um pouco provável jogo de circunstâncias uma variação artificial se combinaria com uma variação resultante da inadequação do modelo para tornar os parâmetros constantes, levando-nos a aceitar um modelo que deveria ser rejeitado.*

E, se se fizer então questão de eliminar o viés nada, a não ser o custo do esforço computacional envolvido, nos impede de sortear grupos de n medidas bem condicionantes de entre todos os lotes e, partindo da estimativa global obtida, portanto com poucas iterações, uma vez que se dispõe de uma

boa aproximação, determinar nova estimativa não enviesada dos parâmetros.

Entretanto algumas conclusões paralelas ressaltam do estudo do problema do viés.

Em primeiro lugar, as estimativas v_i^{*k} e v_j^{*k}, $k = 1, \ldots, m$, vêm correlacionadas e, quanto mais se verificar serem-no, tanto maior a probabilidade de haver viés nas estimativas. Vimos já que isso não agrava particularmente os métodos de análise estatística utilizados.

Em segundo lugar, de todas as curvas de parâmetros aparentes de um modelo de n parâmetros, *as que apresentam sempre maior variabilidade são as dos dois novos parâmetros (ou dum só), que o modelo introduz.* A constância dos outros parâmetros é índice da possibilidade de viés nas estimativas. Mas nenhum dos dois indicadores permite afirmar que haja concretamente viés. Já, por exemplo, a *constância dos parâmetros herdados em todas as m séries e a valores diferentes (e tanto mais quanto mais diferentes) é índice seguro de viés das estimativas fornecidas por cada série.* Finalmente saliente-se que o problema do viés agrava-se com o aumento de correlação entre os parâmetros, como uma reflexão simples permite imediatamente concluir.

4.9 Hipóteses iniciais ou "guesses" para os parâmetros

Uma outra importantíssima vantagem do nosso método de inversão é o facto da inspecção das curvas do modelo n-2 permitir definir hipóteses ("guesses") para os parâmetros do modelo n, pelo menos para n-2 dos seus parâmetros (e às vezes para mais, por análise do comportamento do modelo n-2 para o outro extremo do lote, o extremo superior). Uma boa hipótese inicial para os parâmetros tem a vantagem de, para além de garantir a convergência,

o que é importante (sabido, como é, que, se há algoritmos teoricamente globalmente convergentes, na prática surgem muitas vezes dificuldades inesperadas), diminuir o número global de iterações e de avaliações da função objectivo. *O nosso método de inversão exige, para cada modelo estudado, quando muito, a escolha arbitrária de duas "guesses" para dois parâmetros, os dois novos parâmetros que o modelo introduz.*

E exige-o só uma vez por modelo, numa situação de bom condicionamento (com a medida móvel no fim do lote), pois, *se o recuo for "suave", as estimativas de uma optimização servem de excelentes hipóteses para a seguinte.* Se o terreno real "visível" precisar de n parâmetros para a sua definição, acabamos, na pior das hipóteses, a do comportamento das curvas dos modelos ensaiados, no fim do lote, não ir sucessivamente fornecendo informação utilizável, por ter de arbitrar na mesma n "guesses" para n parâmetros. Apenas, não o fazemos duma vez, o que para o comportamento do algoritmo de optimização tem muita importância. Basta ver que, por exemplo, quando se testa o modelo n, as n-2 medidas fixas iniciais, pouco sensíveis aos dois novos parâmetros, vêm quase automaticamente ajustadas pelas "guesses" retiradas das curvas do modelo n-2, o que nos compensa, de certo modo, do viés resultante.

Esta circunstância, de ser possível apresentar as "guesses" arbitrárias escalonadamente e de, durante o recuo, as "guesses" para cada optimização serem obtidas a partir dos resultados anteriores, *diminui em muito o esforço computacional que o método pressupõe, permitindo-lhe não ficar muito aquém, nesse aspecto, de outros métodos de mínimos quadrados que, duma maneira ou doutra, invertam globalmente todo o lote de medidas,* necessitando de apresentar aos seus algoritmos, em bloco, n "guesses" arbitrárias.

O problema das hipóteses iniciais de partida para os parâmetros constitui ainda um problema em aberto no campo da optimização. Na verdade, mesmo algoritmos globalmente convergentes têm comportamento extremamente dependente das "guesses" de partida. Por se aplicar directamente à resolução de sistemas, merece especial relevo o trabalho de alguns autores (Moore e Jones, 1977; Moore e Kioustelidis, 1980; Gay, 1981) que, recorrendo à análise intervalar e utilizando o teorema de Miranda e, particularmente, o algoritmo de Krawczyk, verificam se, dado um paralelipípedo qualquer, n dimensional, definido no espaço das n variáveis, ele contém ou não uma solução do sistema. Os últimos desenvolvimentos neste campo têm produzido uma classe de algoritmos globalmente convergentes, ainda que computacionalmente pesados.

4.10 Outros processos de análise das curvas de parâmetros aparentes

Toda a análise das curvas de parâmetros aparentes tem sido cimentada em considerações de tipo estatístico. Saliente-se, desde já, que muitas das técnicas estatísticas apresentadas são dispensáveis na generalidade dos casos e só necessitam ser utilizadas se uma particular situação o pedir. Tanto é assim que não foram implementadas no nosso programa, até porque a maior parte delas existe em rotinas simples em várias bibliotecas de programas. Em particular, as técnicas que ajuízam da horizontalidade das curvas ou, doutro modo, da constância dos parâmetros, utilizadas para decidir se o modelo em teste representa ou não o terreno real "visto" pelo lote de medidas, são, na maior parte dos casos, desnecessárias. Basta, por exemplo, olhar para as curvas de modelo de um estrato do chamado exemplo de Inman, reconhecidamente de difícil inversão (Inman, 1975), Figura IV-2, para verificar que

esse modelo não representa o terreno real. Basta, aliás, olhar para a curva de resistividade aparente homogénea.

Se, porém, a análise não é fácil de fazer por simples inspecção, há outras técnicas, conceptualmente simples, que procuram detectar se há ou não uma tendência ("Trend") numa colecção de dados, afectados de um erro aleatório, como os que constituem uma curva de parâmetros.

Antes de abordarmos alguns, mencionemos, de passagem, que quase todos eles funcionam melhor se os dados estiverem igualmente espaçados. Ora, como veremos no capítulo seguinte, o lote de medidas tem, geralmente, distâncias interelectródicas em progressão geométrica, o que permite facilmente colocar os dados igualmente espaçados se, no eixo das abcissas das curvas, onde se marcavam as distâncias interelectródicas da medida móvel, forem marcados os logaritmos dessas distâncias. Aceita-se então a hipótese, subjacente à definição geométrica do passo do lote, de que a informação sobre as características do terreno a profundidades linearmente crescentes é recolhida por medidas feitas a distâncias interelectródicas geometricamente crescentes. Sabemos que uma tal hipótese está longe de ser verdadeira, como os estudos da profundidade de investigação atrás mencionados revelaram, ainda que, no caso de terreno homogéneo possa ser considerada como aceitável.

Os processos que mencionaremos, de forma aliás muito ligeira, *baseiam-se todos na extracção da informação, residente na curva de parâmetros, por eliminação do ruído introduzido pelo erro das medidas ou, doutro modo, na filtragem das altas frequências do espectro de Fourier associado à curva, fazendo passar o sinal por um filtro passa-baixo.* Essa filtragem pode ser realizada numericamente e implementada em "software", mas também pode ser efectuada tratando electricamente o sinal, via "hardware", o que facilita o de-

senvolvimento de técnicas de inversão de terrenos em "tempo real", no próprio campo, utilizando microprocessadores. Acreditamos que esta seja uma frutuosa via de investigação futura.

A análise de Fourier levada a cabo analiticamente, em computador, pode ser substituída por processos mais simples de proceder a filtragens. Trata-se de, a partir dos dados, definir novas curvas, calculando,em cada abcissa, uma função simples das ordenadas da curva primitiva, correspondentes à abcissa em questão e adjacentes. O filtro mais singelo é o das chamadas médias móveis que, no entanto, filtra as altas frequências mas distorce o sinal. O desenho de filtros mais complexos, utilizando várias abcissas com diferentes pesos, deve naturalmente obedecer às características da banda passante que se pretende, de forma a separar o ruído do sinal sem distorção deste. Todavia o processo corre sempre o risco de eliminar, não só o ruído, como frequências associadas a fenómenos significativos como, por exemplo, a existência de picos determinados por estratos delgados e pouco contrastantes. Por outro lado,é eficaz na eliminação do problema dos "outliers".

4.11 Conclusões

Procurámos neste capítulo abrir, tanto quanto possível, um leque de opções de utilização das curvas de parâmetros aparentes na inversão de terrenos estratificados, cobrindo algumas das situações que podem aparecer. É agora ocasião de, sucintamente, apresentar o método base que preconizamos Para cada modelo de V_a estratos em estudo, poderemos resumi-lo nos seguintes

passos:

1. Rejeição imediata do modelo e passagem ao modelo seguinte, quando a curva de resistividades aparentes do substrato do modelo anterior não é monótona.

2. Avaliação da ordem de grandeza do desvio padrão da distribuição dos erros das medidas e definição, em conformidade, da precisão p_r a utilizar no algoritmo de optimização.

3. Escolha de n-1 grupos de medidas fixas ($n = 2\ V_a + 1$) de acordo com as regras definidas na secção 4.2.1 e 4.8.1 (ver também os exemplos do capítulo seguinte). Admitamos que o grupo de ordem i é formado por m_i medidas. Se um qualquer dos números m_i for muito pequeno é preferível, para evitar enviesamento dos parâmetros a obter, recolher mais medidas no campo a distâncias interelectródicas correspondentes às do respectivo grupo de ordem i.

4. Estabelecer, utilizando o algoritmo de optimização do capítulo anterior, as curvas de parâmetros aparentes do modelo em estudo, recorrendo, para cada medida móvel, a um elemento do produto cartesiano dos grupos de medidas definidos no passo anterior, de forma a constituir as n medidas necessárias, e evitando assim o enviesamento discutido na secção 4.8.

5. De posse das curvas de parâmetros aparentes decidir, de acordo com os critérios definidos ao longo deste capítulo, se o modelo representa o terreno ou não, isto é, se as curvas, dados os erros de medida, podem ser consideradas horizontais ou não. Simultaneamente, decisões devem ser tomadas sobre se uma determinada medida é aberrante ou significativa e, na maior parte dos casos, isso pode ser feito independentemente do desvio padrão da

distribuição dos erros de medidas.

6. No caso da curva poder ser considerada horizontal, as suas diferentes ordenadas, eventualmente pesadas, constituem amostras dos parâmetros reais do terreno e é, então, possível, não só extrair valores mais exactos dos parâmetros, como uma medida do seu erro, independentemente do desvio padrão de distribuição dos erros das medidas, válida mesmo quando esse desvio é grande.

O método exposto necessita da avaliação do desvio padrão de distribuição dos erros das medidas especialmente para, no ponto 3, decidir da aceitação ou não do modelo. Quando essa avaliação não for possível ou quando não for vantajoso que a decisão dela dependa, ou ainda quando for requerida maior precisão, é possível recorrer à variante a que chamamos de falsas séries, em que cada curva de parâmetros aparentes passa a ser a média de várias curvas, obtidas recorrendo, no ponto 4, a diferentes elementos do produto cartesiano aí referido. O método permite então tornar a eliminação dos "outliers" ou medidas aberrantes muito mais segura e independente , também, do desvio da distribuição dos erros das medidas. Nesta variante, ou se substitui o critério de paragem do algoritmo de forma a torná-lo independente, também ele, daquele desvio, ou se recorre, sem prejuízo maior, a um minorante seguro desse desvio padrão, para definir o parâmetro necessário ao critério. Em todos os exemplos que considerámos esta segunda alternativa revelou-se suficiente.

Como se disse já e como é fácil de compreender, a variante das falsas séries, como,aliás, o recurso a verdadeiras séries de medidas recolhidas no campo, é computacionalmente muito mais pesada que o método base. Ora as decisões a tomar no ponto 5, a da horizontalidade ou não horizontalidade das

curvas, a da rejeição ou não rejeição duma medida por aberrante, só exigem a utilização de critérios estatísticos definidos, com recurso ao conhecimento do desvio dos erros das medidas, quando não podem ser tomadas por simples inspecção. *Na maior parte dos casos, basta uma ideia da ordem de grandeza do erro das medidas e uma rápida consideração da curva para rejeitar ou aceitar o modelo.* Isto é, as curvas de parâmetros são informativas. No fundo, de facto, o que se põe é um problema de reconhecimento de formas. A análise estatística só precisa de ser utilizada se o leitor tem dúvidas na sua leitura, e o que nós constatámos é que, a não ser nos casos de terrenos realmente difíceis, não é vulgar tê-las. E justamente, quando as tem, precisa duma avaliação rigorosa do desvio padrão das curvas das medidas, *mesmo quando pretenda utilizar um método global.* Assim, os casos em que se torna de facto obrigatório o recurso às falsas séries ou mesmo à recolha de novas séries no campo são aqueles em que um outro qualquer método obrigaria a um controlo rigoroso do desvio padrão das medidas, com a correspondente carga computacional e de recolha das medidas, como vimos na secção 4.3, e, provavelmente, falharia.

O que é importante, quanto a nós, é que, nos casos onde essa exigência se não põe, *a segurança com que as curvas de parâmetros aparentes simples, descritas no método base, apenas com uma ideia da ordem de grandeza do erro das medidas, permitem tomar a decisão de rejeitar ou não um modelo é, de longe, muito superior àquela com que se toma a mesma decisão nos métodos globais.*

Não dou tudo como certo, mas apenas pedirei aos Senhores Teólogos que me expliquem como se pode produzir tudo isto

W. Heybtesbury e R. Swineshead, séc. XII

CAPÍTULO V

PROGRAMAS E EXEMPLOS DE INVERSÃO DE TERRENOS

5.1 Introdução

Com base no algoritmo de optimização explanado no capítulo III foi desenvolvido um programa, *JOANA*, que encontra os parâmetros aparentes V(I) dum modelo homogéneo, de um ou de dois estratos (VA = 0, 1 ou 2), para quaisquer SI = 2 VA + 1 medidas dadas, e calcula algumas das estatísticas úteis na análise de curvas de parâmetros aparentes. Paralelamente, foi desenvolvido um outro programa, *CACILDA*, que simula um ou mais lotes de medidas efectuadas sobre um terreno qualquer de 0, 1 ou 2 estratos horizontais. Particularmente, considerou-se a simulação de 9 lotes de medidas fornecidas por uma configuração electródica de Schlumberger. O programa JOANA chama uma rotina, CALCULA, que determina os parâmetros para cada situação definida pelo utilizador no programa principal, recorrendo por sua vez a duas subrotinas: ALFA, que calcula, quando necessário, o parâmetro de Van Dam (ver secção 3.2.1); e INVERTE, que, por decomposição em valores singulares (ver secção 3.3.2) efectuada por uma outra subrotina, SVD, resolve sistemas a solicitação de CALCULA. A descrição de programas e rotinas ocupa o subcapítulo 5.2. Os programas estão escritos em Fortran 5 e foram corridos no Cyber 170-720, do C.I.U.P..

O estudo detalhado da inversão dum terreno, proposto por Inman (1975), pondo em evidência algumas das considerações feitas ao longo dos capítulos anteriores, é objecto do subcapítulo 5.3. Serão também, aí, analisadas algumas características de "performance" dos programas.

Finalmente, no subcapítulo 5.4 será apresentada uma colecção de curvas de parâmetros aparentes, obtidas a partir de diferentes tipos de terrenos, que, sem pretender ser exaustiva, procura mostrar o funcionamento do método nalgumas particulares situações.

5.2 Programas e rotinas

5.2.1 Considerações gerais

Ao longo dos capítulos anteriores já foi, por diversas vezes, afirmado que não se pretendeu neste trabalho obter um programa compacto, inteiramente optimizado e preparado para utilização indescriminada por utentes não familiarizados com as suas características. Apenas no cálculo de potências e derivadas, e sómente a nível estrutural, de construção do algoritmo, se procurou, de alguma forma, optimizar.

Assim, algumas características dos programas reflectem esta filosofia de abordagem do trabalho. Uma delas é a utilização, em todas as partes principais e rotinas dos programas, de *dupla precisão*.

Sabemos que a dupla precisão é absolutamente necessária, por exemplo, no cálculo de potências e derivadas e no algoritmo de aceleração de séries, sempre que a utilização dos programas atinja zonas que, embora de pouco interesse para a estratégia de inversão, como referimos em capítulos anteriores, queiramos, mesmo assim, considerar. Se, por exemplo,insistirmos em calcular a derivada da potência em ordem a um parâmetro quando a distância interelectródica correspondente é tal que a medida mal "vê" o parâmetro, é de esperar que a derivada, por muito pequena, exija, no seu cálculo, dupla precisão. Os programas e rotinas estão então preparados para atender utilizadores que requeiram o máximo de precisão possível para situações destas. Até porque elas e outras similares podem ocorrer eventualmente numa qualquer iteração, mesmo usando de todo o cuidado na escolha de medidas e "guesses". O recomeço com novas medidas e sobretudo novas "guesses" é, então, uma solução sempre possível. A dupla precisão pode, em casos extremos, significar a diminuição da

frequência destes recomeços.

Por outro lado, se há segmentos ou partes, ou mesmo rotinas, que não necessitam claramente de dupla precisão, como toda a rotina ALFA que calcula o valor do parâmetro de Van Dam, LA, o qual não requer ser obtido com muito rigor, outros há, como a rotina de decomposição em valores singulares e resolução dos sistemas que, em princípio e devido à sua robustez, poderiam ser escritas em precisão simples, mas cujo comportamento, quando do alargamento futuro a modelos de muito mais estratos, pode vir então a exigir dupla precisão.

Por tudo isto, e porque as partes que, manifestamente, não exigem dupla precisão, ou são muito restritas ou, comparativamente, de pouco peso no esforço total do método, optou-se por manter a versão base dos programas toda em dupla precisão.

Saliente-se, finalmente, que o compilador FTN5 do computador utilizado é extremamente poderoso em termos de precisão. A precisão simples é assim de, aproximadamente, 14 dígitos decimais e a dupla, de cerca de 29. Manifestamente, uma precisão dupla desta ordem ultrapassa, certamente, as necessidades de qualquer utilizador dos nossos programas.

Outra característica importante dos programas, em especial de JOANA, é o seu carácter interactivo. E também a flexibilidade da sua utilização. O programa tem um carácter modular. Ao utilizador cabe a definição das medidas a utilizar e o seu número, ligado ao tipo de modelo que resolve ensaiar, a decisão de conservação ou não dos resultados da optimização an-

terior para "guesses" da nova optimização e, por vezes, até a decisão de aceitação ou rejeição dos resultados da optimização. Tudo isso é tarefa do utilizador que a deve executar para cada conjunto novo de medidas. É ele que escolhe a forma de recuo ao longo do lote para obter as curvas de parâmetros e é ele que define os seus limites, em função dos resultados e indicações que vai obtendo. O programa carece assim de "inteligência" para, em função de alguns parâmetros gerais, previamente definidos, interpretar os resultados que vai obtendo e proceder a escolhas que a estratégia de inversão imponha.

Reconhecemos, no entanto, que o desenvolvimento dum "package" com estas características se reveste da maior importância e é possível, embora a sua elaboração não seja fácil e exija o estudo duma gama variada de exemplos para definição empírica de alguns dos parâmetros necessários. Orellana (1972, p. 256), citando Allan Spector, afirma textualmente: "A interpretação geofísica não pode nunca automatizar-se ou mecanizar-se. As técnicas matemáticas de cálculo electrónico são só ferramentas que, quando são habilmente empregues pelo geofísico - conhecedor das aplicações e limitações destas técnicas - levam à utilização óptima dos dados". Ainda que não partilhemos integralmente deste pessimismo, e este trabalho é prova disso, estamos, todavia, convencidos que a complexidade e a diversidade das situações que podem ocorrer não facilitam a tarefa de implementação de um programa de inversão automática de um terreno estratificado com as características algo ambiciosas do nosso método. Porém, isso não invalida o facto de que os programas que desenvolvemos podiam, sem sair dos limites do nosso trabalho, incorporar muito mais "inteligência" do que a que contêm. Achamos, no entanto, muito mais útil uma concepção dos programas aberta, como a presente é, ver-

sátil, constituindo uma ferramenta para futuros desenvolvimentos, se não se perder, como não se perde, sob controlo interactivo do utilizador, a eficácia que a estratégia, que especificamente definimos, confere a esses programas.

Ainda a mesma preocupação de manter a generalidade da possibilidade de utilização dos programas determinou que não procedêssemos neles a qualquer simplificação de vulto que uma particular configuração electródica simulada ou uma particular técnica de medições suposta pudessem facultar. Assim, por exemplo, a configuração de Schlumberger, por implicar, para cada distância interelectródica, dimensão horizontal do eléctrodo aparente muito próxima da metade daquela distância, permite notáveis simplificações nos termos das séries que calculam potências e derivadas e assim reduzir substancialmente o esforço computacional envolvido. Não as fizemos, no entanto, e, por isso, com alterações a introduzir apenas na secção de leitura de dados, JOANA aceita qualquer configuração, mesmo aquela que, não tendo sido até agora testada, se queira ensaiar. Da mesma forma, sabemos que as 9 séries utilizadas não precisam de ter distâncias interelectródicas exactamente iguais, nove a nove (ver secção 4.6). Sem perda de generalidade, utilizámos distâncias iguais, mas, se simplificámos o programa CACILDA, gerador das medidas simuladas, de acordo com essa opção, não fizemos o mesmo a JOANA, pelo que *este último programa aceita, com alterações mínimas e também a nível de leitura dos dados, distâncias quaisquer.*

Alguns segmentos dos programas poderiam ser escritos de forma mais eficiente, conduzindo a menores tempos de execução. O número de posições de memória utilizadas poderia ser substancialmente reduzido, em especial o das reservadas a elementos de matrizes, quer planeando as operações de forma mais

compacta e económica, quer utilizando as mesmas posições em segmentos independentes do mesmo programa. Preferiu-se, no entanto, sempre que as alterações necessárias a este tipo de optimização dos programas viessem a, de algum modo, prejudicar a sua legibilidade ou segmentação natural e desde que o ganho em eficiência que introduzissem não fosse decisivo, não as fazer.

Há mesmo casos de variáveis ou parâmetros de controlo de certo modo desnecessários e cuja única justificação reside em uma possível eventual utilização. Por exemplo, os parâmetros LUZ, que indica o princípio duma iteração, e SOPOT, que indica que só devem ser calculadas, na respectiva secção de cálculo, potências (e não as derivadas das potências), poderiam, de forma simples, ser reduzidos a um único parâmetro. Mas, da forma como os programas estão escritos, com LUZ e SOPOT, pode o utilizador, com alterações de apenas instruções de controlo de SOPOT, obter uma versão que utilize em novas iterações a matriz das derivadas da iteração anterior.

Note-se, no entanto, que algumas das alterações feitas ou aconselhadas só têm sentido quando os programas são compilados pelo compilador CDS FTN5. A sua utilidade é, aliás, relativa uma vez que o próprio compilador pode, por opção, executar, automaticamente, a maior parte delas (ver CDS FORTRAN version 5 Reference Manual (60497800)).

5.2.2 Programa JOANA

Depois de inicializar algumas matrizes, B, T e Y, que vão ser utilizadas na rotina CALCULA que JOANA chama, o programa apresenta uma primeira parte ou secção em que lê dados.

A leitura de dados apresenta alguns aspectos particulares e simplificados, pois JOANA pressupõe-os fornecidos pelo programa CACILDA; especificamente pressupõe configuração de Schlumberger e 9 séries de medidas a distâncias interelectródicas iguais, nove a nove.

Assim, lê dum ficheiro TAPE 12, saída de CACILDA:

- a menor distância interelectródica, D (1,1);
- o quociente, constante, entre cada distância interelectródica e a dimensão horizontal do eléctrodo aparente correspondente, BE;
- a razão da progressão geométrica que as distâncias interelectródicas sucessivas constituem, FE;
- o número total de medidas de cada lote, NM;
- um indicador do tipo de distribuição dos erros simulados das medidas, uniforme ou pseudo normal, IDE;
- consoante o caso, o erro máximo relativo ou o dobro do pseudo desvio padrão relativo, PREPOM;
- a matriz 9 × NM dos quadrados das correntes injectadas, CIP;
- a matriz 9 × NM das potências medidas P (na versão apresentada de CACILDA são todas iguais, como veremos);
- e, finalmente, no fim do programa, os parâmetros reais do terreno, para mais fácil comparação com os resultados que, entretanto, se obtiverem.

Com estes dados constrói as matrizes 9 × NM de distâncias interelectródicas, D, e de dimensões horizontais de eléctrodos aparentes, C, matrizes

que, com a actual versão de CACILDA, se traduzem cada uma delas em 9 vectores iguais de NM componentes. Define, ainda, outras matrizes necessárias para a determinação, em CALCULA, de potências e derivadas; CS, N1 e N2. Ainda na mesma secção, o programa define ICMI, EZE, EMM e VTE, parâmetros a utilizar no algoritmo de aceleração de séries de CALCULA, e DEEP, variância dos erros das medidas. A seguir, o programa escreve em TAPE 13, que é o seu ficheiro genérico de saída, todos os dados que leu e que sejam de interesse. Define ainda PREPOC e PREDER, precisões de cálculo, respectivamente, de potências e derivadas.

A estrutura deste sector de leitura de dados pode ser facilmente alterada, de forma a ler *de qualquer outro ficheiro com qualquer outra origem*.

Seguidamente, o programa calcula as estimativas das resistividades aparentes homogéneas, V (I), a partir de cada medida, e faz as médias e os desvios padrões das amostras (na verdade, as estimativas não enviesadas dos desvios padrões das respectivas populações) constituídas a partir dos grupos de 9 medidas correspondentes a cada distância interelectródica. A resistividade obtida a partir da 1.ª medida da 1.ª série é tomada, em princípio, como "guess" inicial para a futura optimização com modelo de um ou dois estratos, se a hipótese de terreno homogéneo for rejeitada pelo utilizador. A aplicação de critérios de aceitação ou rejeição é da responsabilidade dele, utilizador (ver capítulo 4).

O programa dá depois a possibilidade ao utilizador de optar por um esquema em que ele próprio, antes de cada chamada da rotina CALCULA, determina o modelo, as hipóteses iniciais ou "guesses" e as medidas que vai

utilizar, de entre todas as 9 × NM possíveis, ou, em alternativa, um outro em que, fornecidos o modelo, as "guesses" e os números de ordem das medidas, o programa resolve 9 problemas de optimização seguidos utilizando sucessivamente, com os números de ordem indicados, medidas retiradas das 9 séries existentes. Faz ainda a média e os desvios padrões marginais estimados da população e da média das amostras, absolutos e relativos, a partir das 9 estimativas, de cada parâmetro, só então voltando a pedir ao utilizador novas orientações.

Neste procedimento é dada a possibilidade de, analisados os resíduos ea diminuição do gradiente e da função objectivo, obtidos de CALCULA, aceitar como solução uma resposta de CALCULA para os parâmetros, mesmo que não se tenha verificado a convergência a menos de PREPOM/10. Se, todavia, não for aceite, não entra, naturalmente, na formação das médias nem dos desvios (NCM ≠ 9). Nessa eventualidade, o programa aceita novas "guesses" para a optimização seguinte.

O controlo das hipóteses iniciais a apresentar a cada optimização é mais elaborado na opção de inversão paralela. Assim, permite-se que no teste do modelo de 2 estratos, e após o teste do modelo de 1 estrato, se mantenham como "guesses" as estimativas dos parâmetros então obtidas, o que exige, apenas, a apresentação de hipóteses iniciais para os novos parâmetros. Mais; é possível (JBAN = 1), para toda e cada optimização com o modelo de 2 estratos, *utilizar como "guesses" os parâmetros estimados na optimização correspondente com o modelo de 1 estrato*, isto é, na optimização que utilizou as medidas fixas definidas agora para o ensaio do modelo de 2 estratos. Se a variância das estimativas for muito grande, isso pode diminuir o número total de iterações necessárias.

Qualquer destas possibilidades está, aliás, aberta no caso do esquema da definição das medidas passo a passo, só que deve ser concretizada "manualmente", introduzindo as "guesses" também passo a passo.

A rotina CALCULA é sempre chamada com os parâmetros SOPOT = 0, COV = 0 e LULA = 0. Vimos que o primeiro parâmetro indica se se devem ou não calcular derivadas. O segundo vai ser devolvido por CALCULA com a indicação de convergência com sucesso, a menos de PREPOM/10, (COV = 1) ou de insucesso (COV = 0); e o terceiro com a indicação de que o algoritmo abortou (LULA = 1) ou não (LULA = 0). A rotina é também chamada com os vectores CT, N1U, DU, CU, N2U, PU e CIPU, de dimensão igual ao número de medidas, e que são extraídos das matrizes C, N1, D, C, N2, P e CIP tomando os seus elementos correspondentes às medidas utilizadas.

5.2.3 Subrotina CALCULA

A subrotina começa por inicializar a zero alguns parâmetros que, ou são utilizados pela própria rotina, ou por outras que ela chama. NAV e NLL vão, respectivamente, contabilizar o número de avaliações da função objectivo e de iterações executadas em cada optimização, isto é, em cada utilização da rotina. CASA vai conter a condição do jacobiano calculada em INVERTE e ARQ, o parâmetro de Marquardt. MCO é um parâmetro de controlo utilizado para eventual paragem do algoritmo por excessivo número de iterações. NAOP é um parâmetro de controlo de escrita no ficheiro TAPE 13. A rotina define também à cabeça o grau de aproximação exigido entre potências medidas e calculadas, PREPOL, e parâmetros de paragem do cálculo de potências e derivadas, quando se pode utilizar o algoritmo de aceleração de séries, PREPE, e quando não se pode, PREP. Define ainda os pesos iniciais, $1/\sqrt{ASI}$, que vão multiplicar

potências e resíduos e que irão ser alterados, em W , quando o algoritmo, satisfazendo o critério geral de convergência, não aproxima contudo as potências a menos de PREPOL (ver 3.3.7).

Numa segunda secção da rotina calcula-se ETA, variável θ_k (ver secção 3.3.5) utilizada no critério de convergência, e multiplicam-se as potências medidas pelos respectivos pesos.

A terceira secção da rotina começa por inicializar a zero o parâmetro LUZ, indicativo do início de nova iteração, e guarda no vector VIZ o valor actual do vector de parâmetros, V.

A última secção da rotina, antes do cálculo das potências e derivadas (da sua parte integral, melhor dizendo), inicializa a zero as variáveis PNORM e RPNORM onde, posteriormente, enquanto se procede àquele cálculo, vão ser escritas, respectivamente, a soma dos quadrados dos resíduos pesados e a soma dos quadrados dos resíduos não pesados, função objectivo inicial. Também aqui, nesta secção, são calculadas as partes não integrais das potências e inicializadas diversas matrizes utilizadas no algoritmo de aceleração de séries e alguns parâmetros de controlo, entre os quais IBA e BA, indicadores futuros de que uma ou mais derivadas ou potências foram já calculadas com a precisão pretendida.

Deixaremos para a secção seguinte a descrição da parte da rotina que calcula potências e derivadas. De referir apenas que, no fim desse cálculo, se encontram na matriz S (II, VC) as derivadas em ordem aos parâmetros VC (quando VC $\neq$ 0) das potências, pesadas, de ordem II, e no vector KK (II) os resíduos de ordem II. Quando VC = 0 são as potências calculadas que ficam armazenadas. A matriz S (II, VC) é preenchida de forma a que a VC = 1 corresponda a derivada em ordem ao parâmetro "mais profundo" e a VC = SI, a deri-

vada em ordem ao mais superficial. Assim, se, por exemplo, o modelo for de 1 estrato, S (II, 1), II = 1, 2, 3, contém as derivadas das potências em r_2 nas três distâncias interelectródicas de ordem 1, 2, 3, enquanto que S (II, 3) contém as derivadas em r_1. Esta ordenação, que depois é reconvertida noutra mais natural, quando de S se obtém uma nova matriz DAS, corresponde a uma organização do próprio cálculo de potências e derivadas que permite, após alterações mínimas, utilizar, se se quiser, apenas algumas medidas para determinar apenas alguns dos parâmetros do modelo, supostos os outros conhecidos.

Calculadas potências e derivadas e executadas, passando da matriz S para a matriz DAS, as operações necessárias para que o algoritmo minimize, implicitamente, a função objectivo como função das raízes quadradas dos parâmetros e não dos parâmetros propriamente ditos, de modo a, como vimos (secção 3.3.4), resolver o problema das constrições a que estes estão sujeitos, a rotina testa o grau de aproximação entre potências medidas e calculadas. Em particular, se todos os resíduos vêm menores que PREPOM, arma a bandeira JA e, se menores que PREPOL, a bandeira COV.

A rotina vai depois proceder ao controlo das iterações. Distingue à partida, duas situações, a de se tratar do início de uma iteração, LUZ = 0, ou não, LUZ = 1.

Começaremos por abordar o caso de LUZ = 0. Alguns critérios de abortamento do algoritmo de optimização são então testados. Em primeiro lugar, se a condição do jacobiano no fim de cada iteração ultrapassar 10^{10}, o algoritmo aborta. O número de iterações efectuadasé utilizado também para decidir do prolongamento dos cálculos. Quando o número de iterações, NLL, chega a 100, o algoritmo aborta, mas permite-se optar pela sua interrupção quando se atingem as

5 * SI e as 10 * SI iterações. Se, entretanto, não houver razão para abortamento, a rotina guarda em FNORM o valor de PNORM e no, caso de se tratar da 1.ª iteração, guarda em FNORM 1 a soma dos quadrados dos resíduos não pesados, RPNORM, obtida no ponto de partida dessa 1.ª iteração.

Em seguida, é chamada a subrotina INVERTE que resolve o sistema e permite determinar os parâmetros. A matriz do sistema é-lhe entregue em DAS, o número de equações em SI e o vector dos termos independentes em KK. São entretanto azerados os parâmetros LCON e ICAL. A resposta de INVERTE, a solução do sistema, é recebida em SAS. De facto, a solução não é constituída directamente pelos parâmetros, mas pela variação das raízes quadradas dos parâmetros, e daí a necessidade de obter o vector de parâmetros V a partir dos vectores SAS e VIZ. Entretanto o vector KK, constituído pelos resíduos iniciais na iteração, é guardado em BN.

Finalmente, a rotina, nesta secção, faz SOPOT = 1 e LUZ = 1 e regressa à instrução de endereço 1005 onde se inicia a última parte da rotina antes do cálculo do termo integral de potências e derivadas, mas agora com a indicação de que não se trata do início duma iteração e com a instrução de só calcular potências. Na verdade o algoritmo vai agora apenas verificar se, com os novos parâmetros obtidos, a função objectivo diminui ou não, para poder decidir entre calcular outros parâmetros por alteração do parâmetro de Marquardt, ARQ, ou dar por concluída a iteração em curso. Portanto, ao reiniciar a secção que começa na instrução 1005, o algoritmo mantém a sua definição de ETA, do vector de pesos W e do vector de parâmetros de partida VIZ. E vai calcular novo vector de resíduos KK e novas funções objectivo, pesada, PNORM, e não pesada, RPNORM. *Mas não calcula novas derivadas.*

Ao regressar à secção de controlo de iterações vem agora com LUZ = = 1. A primeira coisa que faz então é testar se a função objectivo diminuiu ou não, isto é, se PNORM < FNORM.

Suponhamos que não diminuiu. Então a rotina faz ICAL = 0, aumenta o parâmetro de Marquardt, multiplicando-o por 10, e recorre de novo à rotina INVERTE, exactamente com os mesmos parâmetros com que a tinha chamado no início da iteração, pois entrega como vector de termos independentes, BN. É o parâmetro ICAL, como veremos, que conduz a que INVERTE actue diferentemente conforme se trate duma chamada no início duma iteração ou duma chamada posterior. O parâmetro LCON é tratado em INVERTE, mas o critério de abortamento do algoritmo a que, como também veremos, está ligado, encontra-se em CALCULA. Entretanto, se não houver causa para abortamento, o algoritmo regressa de novo à instrução 1005, de onde vai testar novamente a diminuição da função objectivo.

Ao contrário, se PNORM < FNORM, isto é, se a função objectivo diminuiu, a iteração considera-se acabada. Resta decidir se a convergência foi conseguida ou se são necessárias mais iterações. Para isso, as necessárias normas ANGRAD, DNORM e VNORM são calculadas e os testes de convergência levados a efeito. SOPOT é preventivamente azerado significando que, se se vai proceder a nova iteração, há que calcular potências e derivadas. Se a convergência não foi conseguida, o parâmetro de Marquardt é reduzido (multiplicado por .4) e o algoritmo retorna à instrução de endereço 1002, recomeçando nova iteração com LUZ = 0 e guardando em VIZ os novos parâmetros de partida, obtidos na iteração justamente concluída.

Se os testes de convergência são satisfeitos e a aproximação é me-

nor que PREPOL, a rotina CALCULA remete o controlo para o programa principal, com indicação de convergência com sucesso (COV = 1). Se, porém, os testes são satisfeitos mas a aproximação conseguida não é suficiente, a rotina define novos pesos apropriados (secção 3.3.7) e, diminuindo o parâmetro de Marquardt, reinicia não só nova iteração mas até todo o processo de optimização, regressando à instrução de "label" 1001, donde começa por redefinir novo ETA para os critérios de convergência. Se, eventualmente, a situação de convergência com deficiência de aproximação se repetir indefinidamente, a rotina acaba por abortar por algum dos critérios instalados, quando mais não seja por número excessivo de iterações. No entanto, como já vimos, a rotina CALCULA ao passar, então, o controlo para o programa principal, fornece-lhe dados suficientes para que o utilizador possa, ainda assim, decidir da razoabilidade do vector V a que se chegou. O mesmo acontece se o algoritmo aborta (LULA = 1) quando as aproximações são satisfatórias (COV = 1), mas os testes de convergência não foram satisfeitos.

Antes de passar o controlo para o programa principal, a rotina escreve ainda no ficheiro TAPE 13 algumas quantidades de interesse para a análise e o estudo das curvas de parâmetros aparentes. Assim, reproduz os vectores de parâmetros e de dados, guardados de INVERTE nas matrizes UVU e VUV, e os valores singulares, em SIGMA. Escreve ainda os desvios padrões e os coeficientes de correlação aproximados estimados a partir da expressão 4.8 da matriz de covariâncias, na hipótese de linearização possível do estimador de mínimos quadrados. Note-se que a decomposição em valores singulares é feita sobre a matriz das derivadas em ordem à raíz quadrada dos parâmetros. Isso pode não afectar muito os coeficientes de correlação aproximados mas origina desvios padrões aproximados diferentes, pelo que é necessária a respectiva

correcção. Mas é só de facto no cálculo desses desvios que a questão assume importância. A análise espectral (secção 3.3.3), por exemplo, é feita em relação às raízes quadradas dos parâmetros, mas as conclusões continuam qualitativamente válidas para os próprios parâmetros. No entanto, é possível fazer, aí também, a passagem para a decomposição da matriz da derivadas nos parâmetros propriamente ditos. Se for $\underline{M}$ essa matriz, a relação entre $\underline{DAS}$ e $\underline{M}$ é dada por

$$\underline{DAS} = \underline{M}\ \xi$$

onde ξ é uma matriz diagonal, e resulta, para o cálculo da matriz de covariâncias aproximada,

$$(\underline{M}^T\ \underline{M})^{-1} = \xi\,(\underline{DAS}^T\ \underline{DAS})^{-1}\ \xi$$

Temos também até aqui ignorado um factor 2 que deve multiplicar o jacobiano (ou $\underline{DAS}$), se se quiser que ele de facto resulte da função objectivo considerada e não da sua metade. Se a sua consideração é irrelevante em todo o trabalho, não é esse o caso no cálculo dos desvios padrões aproximados. Em conclusão, é preciso, para obter os desvios padrões aproximados, multiplicar os desvios calculados a partir da decomposição de $\underline{DAS}$ pelas raízes quadradas dos parâmetros respectivos.

5.2.4 Cálculo de potências e derivadas

Nesta secção só nos interessa, naturalmente, descrever o cálculo da parte integral das potências e derivadas. E referiremos, apenas, o seu

cálculo no caso de dois estratos, a partir do que é fácil ao leitor estudar o esquema de cálculo no caso de um estrato.

Como vimos nas secções 3.2.2 e 3.2.3, a estrutura das potências e derivadas é a mesma:

$$f(C, D, I) + g(I) \alpha \sum_{p=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \phi(p,\lambda) (1 - \alpha Q(\lambda))^p$$

$$(J_0(\lambda C) - J_0(\lambda(D-C))) \, d\lambda \qquad (5.1)$$

O cálculo de qualquer potência ou derivada vai resumir-se à soma de um certo número de integrais do tipo 3.4 ou 3.9, o número dependente do grau de aproximação à soma da série que se deseje, isto é, do valor máximo de p considerado.

É possível pôr em evidência em cada uma dessas somas um factor do tipo $h I^2$, com h apenas dependente dos parâmetros e do parâmetro de Van Dam, LA. Os diferentes factores h, para cada tipo de derivada ou potência, são armazenados no vector MAL e os quadrados das correntes, a cada distância inter-electródica correspondendo em princípio uma corrente, em CIPU.

A função $\phi(p, \lambda)$ é constituída por exponenciais com expoentes dependentes das profundidades, arquivados no vector H (na verdade divididos por 2), e com coeficientes ora dependentes apenas dos parâmetros resistivos, ora destes e do valor de p, que é armazenado em N.

Coeficientes apenas dependentes dos parâmetros (como aliás outras quantidades apenas dependentes dos parâmetros e que são utilizadas no cálculo) estão colocados, depois de isolados factores comuns que são tratados como

factores de MAL, em CF, V_1, V_2, V_3 V_4, V_5, V_6, V_7, V_8, V_9, V_{10}, V_{11}, D_1 D_2, D_3, D_4, D_5. Coeficientes também dependentes do valor de N são guardados em M_1, M_2, M_3, M_4, M_5, M_6, M_7, M_8, M_9 e M_{10}.

De cada vez que N aumenta, a soma de cada série é acrescida de uma parcela. Essas diferentes parcelas são, para cada distância interelectródica DU (II), colocadas no vector SN. Cada uma delas, SN (I), é formada pelo produto dum factor MAL (I). CIPU (II) por uma soma de termos constituídos, por sua vez, pelo produto dum dos coeficientes, dependente dos parâmetros ou destes e de N, atrás referidos, por um elemento T (II, VC) ou Y (II, VC) das matrizes, respectivamente, T e Y.

Como se definem os elementos destas matrizes? Para cada valor de N, o desenvolvimento de 5.1, $(1 - \alpha Q(\lambda))^{N}$, pode ser obtido a partir do desenvolvimento $(1 - \alpha Q(\lambda))^{N-1}$ multiplicando-o por $(1 - \alpha Q(\lambda))$. Isso é feito multiplicando os coeficientes das exponenciais em λ do desenvolvimento para N-1 pelos coeficientes das exponenciais de $(1 - \alpha Q(\lambda))$ e colocando-os numa matriz A, e posteriormente noutra matriz B, em que os índices de cada elemento das matrizes indicam, após manipulação simples, o expoente correspondente, função de h_1 e h_2. Cada coeficiente do desenvolvimento é, temporariamente, guardado em X e cada expoente em N_3.

Todos os termos do desenvolvimento de $(1 - \alpha Q(\lambda))^{N}$ vão ser multiplicados pelos termos de $\phi(N,\lambda)$. Os expoentes dos termos de $\phi(N,\lambda)$ estão armazenados em H.

T (II, VC) vai conter a soma dos integrais do tipo 3.4, que surgem nas potências e nas derivadas em ordem às resistividades, correspondentes a todos os termos que resultam do produto de $(1 - \alpha Q(\lambda))^{N}$ pela exponencial $e^{-H(VC)}$, para a distância interelectródica DU (II). Note-se que no cálculo

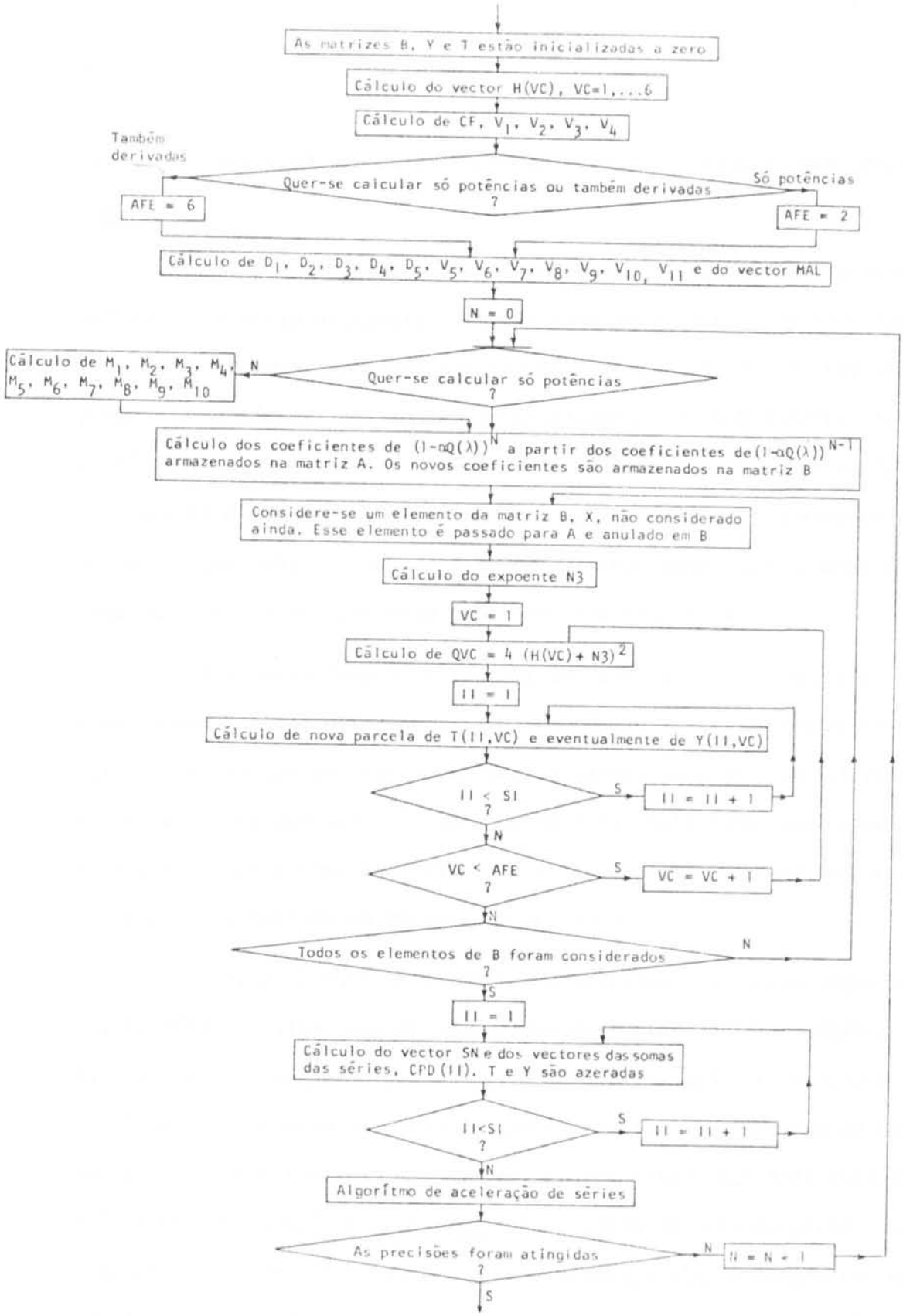


Figura V-1 - Organigrama do cálculo de potências e derivadas.

destes integrais há uma parte comum a todas as distâncias que designamos por QVC.

Saliente-se que, quando a potência e todas as derivadas correspondentes a uma certa distância interelectródica II estiverem calculadas com a precisão pretendida, o algoritmo faz BA (II) = 1 e os cálculos específicos para essa distância deixam de ser efectuados quando N aumenta. Isso tem importância porque as séries comportam-se de maneira diferente conforme a distância interelectródica e é, assim, possível economizar muito esforço computacional. Aliás, alguns cálculos deixam logo de ser realizados quando apenas uma derivada ou potência atinjam essa precisão (IBA (I, II) = 1).

Por outro lado as situações de calcular só potências ou potências e derivadas são tão diferentes e de frequência relativa também tão diferente que justificam que se tratem, em certas partes do algoritmo, diferenciadamente. A rotina dispõe dum controlo que lhe permite, calculadas todas as derivadas, e repare-se que a precisão requerida no seu cálculo é menor, optar pelo algoritmo de cálculo de potências sem derivadas.

Para o cálculo de potências e derivadas são ainda importantes a rotina ALFA e o algoritmo de aceleração de séries. A rotina ALFA é muito simples e o seu corpo principal consiste na determinação dos máximo e mínimo de Q (λ) por um processo de bissecção de intervalos. O algoritmo de aceleração de séries é, com ligeiras alterações, o apresentado por Brezinski (1978, p. 175- 176) (ver secção 3.2.5). ICMI é o número de colunas permitidas, EMM, o número total de termos da série admissíveis, e VTE, um parâmetro para decisão da aplicabilidade do algoritmo sob risco de ocorrência possível de erros de "cancelamento".

5.2.5 Subrotina INVERTE

A subrotina INVERTE resolve sistemas de N equações e incógnitas (SI de CALCULA), matriz de coeficientes A (DAS), vector de termos independentes Y (KK ou BN), produzindo a solução C (SAS). Resolve-os recorrendo a uma outra subrotina SVD que faz a decomposição em valores singulares da matriz A, fornecendo a INVERTE, não só os valores singulares, no vector SIGMA, como também as matrizes de vectores próprios U e V. A rotina SVD, devida a Golub e Reinsch (1970), é uma rotina suficientemente tratada e testada (ver secção 3.3.2) e por isso não a abordaremos aqui em detalhe.

ICAL, definido em CALCULA, é um parâmetro fundamental no controlo da rotina. A situação ICAL = 1 só acontece quando se inicia uma iteração em CALCULA e, portanto, só então se chama SVD para efectuar uma decomposição em valores singulares, uma vez que, ao longo de cada iteração, a matriz A das derivadas das potências não é alterada.

Também só no caso de ICAL = 1 se vai comparar o valor do parâmetro de Marquardt, definido entretanto em CALCULA, com o quadrado do menor valor singular dividido por 10, ARMI. O utilizador pode ainda, no princípio da 1.ª iteração, definir ele próprio um valor para ARQ, se verificar que o jacobiano é muito mal condicionado com a "guess" proposta para os parâmetros. Esta possibilidade de opção depende do valor de IARQ definido no programa principal. Se se quiser prescindir dela, basta alterar no programa principal IARQ = 1 para IARQ = 0. A condição do jacobiano é calculada também em INVERTE.

O parâmetro LCON é utilizado aqui como controlo que visa, quando se detecta que o parâmetro de Marquardt excede o quadrado do maior valor singular multiplicado por 100 (ARMA), o permitir, no entanto, algumas tentativas

de progresso na direcção próxima da de maior declive, até porque a situação pode ser acidental, resultante por exemplo duma súbita diminuição de ARMA na nova iteração.

Finalmente, a rotina calcula a solução do sistema, vector C.

5.2.6 Saída de JOANA

O ficheiro geral de saída de JOANA é TAPE 13. O objectivo desta secção é enumerar o que é escrito no ficheiro, na actual versão do programa:

- o tipo de distribuição dos erros:
- conforme o caso, o erro máximo relativo ou o desvio padrão relativo dessa distribuição;
- a menor e a maior distância interelectródica;
- o número de medidas de cada série;
- o número de colunas permitidas no algoritmo de aceleração de séries;
- a tolerância para o erro de "cancelamento" nesse algoritmo;
- a primeira e última potências da 1.ª série de medidas;
- todas as distâncias interelectródicas e todas as correntes injectadas;
- todas as resistividades aparentes homogéneas e, no caso de se tratarem 9 séries paralelamente, médias e desvios padrões;
- todos os parâmetros propostos como "guesses" pelo utilizador, e identificados como tal, seja em que momento for;

- os números de ordem de todas as medidas utilizadas;

- em cada iteração, os parâmetros a que a iteração chegou, os números de iteraçoes e avaliações da função objectivo até esse instante e desde que essa particular optimização começou, e a condição do jacobiano;

- se IARQ = 1, a quando da 1ª iteração, os valores de ARMI e ARMA e depois o valor do parâmetro de Marquardt inicial que o utilizador definiu;

- se alguma série não pôde ser calculada, por risco de erro de "cancelamento"grave, utilizando o algoritmo de aceleração, indicação do facto;

- a indicação, também, se for esse o caso de cumprimento dos critérios de convergência, de que convergiu por atingir um valor muito pequeno do gradiente;

- no final de cada optimização, bem sucedida ou não, os vectores de dados e de parâmetros na solução, os valores singulares, o parâmetro de Marquardt e o valor de ARMI (o que identifica por comparação o tipo de convergência final, se do tipo Newton ou direcção de máximo declive, ou intermédia), e a matriz de covariâncias estimada segundo 4.8, com os respectivos coeficientes de correlação;

- no caso de insucesso da optimização, a que se deveu, o valor inicial (no princípio da optimização) e final do gradiente não pesado, bem como a soma de quadrados de resíduos, também não pe-

sada, e o valor dos resíduos;

- a indicação eventual de que os valores foram rejeitados;
- para cada conjunto de 9 optimizações, no caso de se trabalhar com as 9 séries em inversão paralela, as médias dos parâmetros e a respectiva matriz de covariâncias estimada a partir da matriz de covariâncias da amostra multivariável definida, bem como o tamanho desta (pois os valores de uma ou mais optimizações podem ter sido rejeitados, de entre as 9);
- finalmente, os valores reais dos parâmetros, lidos directamente de TAPE 12, ficheiro de entrada.

JOANA tem outro ficheiro de saída, TAPE 5, de que apresentaremos um exemplo em anexo.

5.2.7 Listagem de JOANA e rotinas

As matrizes D, CS, N2, P, C, CIP, N1 estão dimensionadas para 9 séries de 30 medidas. O programa só considera terrenos até 2 estratos ou 5 parâmetros. Daí a dimensão 5 em muitas das matrizes, quer do programa principal, quer das rotinas. B, T e Y são matrizes utilizadas no cálculo de potências e derivadas. Se o número de estratos tratados aumentar, as suas dimensões terão que ser aumentadas. As matrizes EMD, EPRD, EPD, EDD relacionam-se com o algoritmo de aceleração de convergência e as suas dimensões devem cobrir o número máximo previsível de termos das séries.

As listagens aparecem incluídas no corpo da dissertação, e não em apêndice, apenas para comodidade do leitor.

```
      PROGRAM JOANA(TAPE12,TAPE13,INPUT,OUTPUT,TAPE5)
C  ******************************************************
C    COPYRIGHT CARLOS MANUEL CHAVES ESPAIN DE OLIVEIRA
C    1984
C    ALGORITMO EPSILON DA AUTORIA DE BREZINSKI
C    SUBROTINA SVD DA AUTORIA DE GOLUB E REINSCH
C  ******************************************************
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
      DIMENSION  D(9,30),CS(9,30),N2(9,30),P(9,30),C(9,30),
     +          CIP(9,30),N1(9,30),II(5),I2(5),UVA(5)
      DIMENSION IVC(5),SMED(5),DESV(5),VAZ(9,5),SOM(5),SOMQ(5),SOMC(5,5)
      DOUBLE PRECISION N1,N2,KK,N1U,N2U,KP
      INTEGER CM,SOPOT,VA,COV,SI,EMM
      REAL SECOND, STIME
      CHARACTER DATE*10
      COMMON/P/KP,V(5),DU(5),CU(5),N2U(5),SOPOT,SI,VA,IARQ,
     +   PREPOM,PREPOC,PREDER,B(100,100),RPNORM,FNORM1,RANGRAD,
     +        Y(5,6),PU(5),T(5,6),ANGRAD1,KK(5),
     +  COV,CT(5),N1U(5),ICMI,EZE,EMM,CIPU(5),VTE,DEEP,LULA,II
      DATA B/10000(0.0D0)/
      DATA T/30(0.0D0)/
      DATA Y/30(0.0D0)/

C  ***************************************************************************
C       ENTRADA DE DADOS E INICIALIZACOES.A ENTRADA E CONSTITUIDA PELA
C       TAPE12 DE SAIDA DE CACILDA.A CONFIGURACAO E DE SCHLUMBERGER DE
C       PASSO FE,COM 9*NM MEDIDAS DE PRECISAO PREPOM.AS DISTANCIAS INTER
C       ELEC. ESTAO NA MATRIZ D E AS RESPECTIVAS CORRENTES QUADRADAS NA
C       MATRIZ CIP.BE E UMA CONSTANTE QUE RELACIONA AS DISTANCIAS D COM
C       AS SEMI-LARGURAS DOS ELECTRODOS APARENTES,C.AS MATRIZES TEM DOIS
C       INDICES;O PRIMEIRO INDICA A SERIE E O SEGUNDO A ORDEM NA SERIE.
C  ***************************************************************************

      STIME = SECOND()
      READ(12)D(1,1),BE,FE,NM,PREPOM,IDE
      IF (BE .EQ. .4D0) WRITE (5,1000) DATE ()
      READ(12)((CIP(J,I),J=1,9),I=1,NM)
      KP=1.0D0/3.14159265358979313846264300
      DO 10 J=1,NM
         EF=FE**(J-1)
      DO 9 I=1,9
      D(I,J)=D(1,1)*EF
      C(I,J)=D(I,J)*BE
      CS(I,J)=D(I,J)-C(I,J)
      N1(I,J)=C(I,J)*C(I,J)
      N2(I,J)=CS(I,J)*CS(I,J)
9     CONTINUE
10    CONTINUE
      READ(12)((P(J,I),J=1,9),I=1,NM)

        ICMI=20
      IF(2*(ICMI/2).NE.ICMI)ICMI=ICMI-1
      EZE=1E-60
      EMM=100
       VTE=.000000001

        PRINT*,'D(1,1),BE,FE,NM,PREPOM'
        PRINT*,D(1,1),BE,FE,NM,PREPOM
       IF(IDE.EQ.1)THEN
       PRINT*,'DISTR. UNIFORME DOS ERROS.ERRO REL. MAX. =',PREPOM
       WRITE(13,*)'DISTRIBUICAO UNIFORME DOS ERROS'
       WRITE(13,*)'ERRO RELATIVO MAXIMO (PRECISAO DAS MEDIDAS) =',PREPOM
      WRITE (5,1001) PREPOM
```

```
      DEEP=PREPOM*P(1,1)/DSQRT(3.000)
      ELSE
      PRINT*,'DISTR. PSEUDO-NORMAL DOS ERROS'
      PRINT*,'DESVIO MEDIO QUADRATICO RELATIVO =',PREPOM/2.000
      WRITE(13,*)'DISTRIBUICAO PSEUDO-NORMAL DOS ERROS'
      WRITE(13,*)'DESVIO MEDIO QUADRATICO RELATIVO =',PREPOM/2.000
      DEEP=PREPOM*P(1,1)/2.000
      ENDIF
      WRITE(13,11)
   11 FORMAT(1H1,50X,27HCARACTERISTICAS DAS MEDIDAS)
      WRITE(13,*)'MENOR DISTANCIA INTERELECTRODICA =',D(1,1)
      WRITE(13,*)'MAIOR DISTANCIA INTERELECTRODICA =',D(3,NM)
      WRITE(13,*)'NUMERO DE MEDIDAS =',NM
      WRITE(13,*)'NUMERO DE COLUNAS NO EPSILON =',ICMI
       WRITE(13,*)'TOLERANCIA PARA O ERRO DE CANCELAMENTO NO EPSILON'
          WRITE(13,6)VTE
    6     FORMAT(F10.9)
      PRINT*,'PRIMEIRA E ULTIMA POTENCIAS DO LOTE'
      PRINT*,P(1,1),P(9,NM)
         WRITE(13,*)'PRIMEIRA E ULTIMA POTENCIAS DO LOTE'
         WRITE(13,*)P(1,1),P(9,NM)
          WRITE(13,*)' '
         WRITE (5,1002) P(1,1), INT(D(1,1)), FE, NM,
     W                  DSQRT(CIP(1,1)), DSQRT(CIP(1,NM))
      WRITE(13,13)
   13 FORMAT(1H0,50X,30HDISTANCIAS E CORRENTES MEDIDAS)
      WRITE(13,15)((D(J,I),DSQRT(CIP(J,I)),J=1,9),I=1,NM)
   15 FORMAT(1X,5(F6.1,1X,F14.5,5X))

C  ***************************************************************************
C   PREPOC E A PRECISAO DE CALCULO DAS POTENCIAS
C   PREDER E A PRECISAO DE CALCULO DAS DERIVADAS DAS POTENCIAS
C  ***************************************************************************

      PREPOC=PREPOM/100.000
      PREDER=PREPOM/10.000

       WRITE(13,*)' '
       WRITE(13,*)'MEDIAS E DESV. PADROES ABS. E REL. DAS RESISTIV. RI'

       WRITE(13,*)' '
       DO 19 I=1,NM
       SOM(I)=0.000
       SOMQ(I)=0.000
       DO 18 J=1,9
       V(I)=P(J,I)/(KP/C(J,I)-KP/CS(J,I))/CIP(J,I)
          WRITE(13,*)V(I)
          SOM(I)=SOM(I)+V(I)
          SOMQ(I)=SOMQ(I)+V(I)*V(I)
   18  CONTINUE
       SMED(I)=SOM(I)/9.000
       DESV(I)=DSQRT(9.000*SOMQ(I)-SOM(I)**2)/9.000/8.000

       WRITE(13,*)SMED(I),DESV(I),DESV(I)/SMED(I)
       PRINT*,SMED(I),DESV(I),DESV(I)/SMED(I)
        PRINT*,' '
        WRITE(13,*)' '

   19  CONTINUE

       WRITE(13,*)' '

          PRINT*,'PARO'
```

```
      READ*,IPARO
      IF(IPARO.EQ.1)GOTO 100

C  ***************************************************************************
C   A RESISTIVIDADE R1 A TOMAR COMO GUESS É CALCULADA COM A PRIMEIRA MEDIDA
C   A HIPOTESE INICIAL É DE TERRENO HOMOGENEO (VA=0)
C  ***************************************************************************

      VA=0
         R1=V(1)-P(1,1)/(KP/C(1,1)-KP/CS(1,1))/CIP(1,1)

      PRINT*,'R1 =',R1
      WRITE(13,*)' '
      WRITE(13,*)'RESISTIVIDADE OBTIDA COM A PRIMEIRA MEDIDA =',R1

         PRINT*,'QUER DEFINIR AS MEDIDAS PASSO A PASSO ='
         READ*,JJQ
         IF(JJQ.EQ.0)GOTO 31
 32      PRINT*,'QUANTOS ESTRATOS CONSIDERO ='
         READ*,VA
         SI=2*VA+1
         IARQ=1
         PRINT*,'CONSERVO OS PARAMETROS ='
         READ*,JVC
         IF(JVC.EQ.1)GOTO 34
         DO 33 I=1,SI
         PRINT*,'V(',I,') ='
         READ*,V(I)
         WRITE(13,*)'PARAMETRO PROPOSTO V(',I,') =',V(I)
 33      CONTINUE
 34     WRITE(13,*)' '
         DO 35 I=1,SI
         PRINT*,'NUMEROS DE ORDEM E DE SERIE DA MEDIDA ',I
         READ*,I1(I),I2(I)
        WRITE(13,*)'NUM. DE ORDEM E DE SERIE DA MED. ',I,':',I1(I),I2(I)
 35      CONTINUE
         DO 36 I=1,SI
          CT(I)=C(I2(I),I1(I))
          N1U(I)=N1(I2(I),I1(I))
          DU(I)=D(I2(I),I1(I))
          CU(I)=CS(I2(I),I1(I))
          N2U(I)=N2(I2(I),I1(I))
          PU(I)=P(I2(I),I1(I))
          CIPU(I)=CIP(I2(I),I1(I))
 36      CONTINUE
       WRITE (5,1003) (I1(I),I=1,SI), (DU(I),I=1,SI), (I,I=1,SI)
         SOPOT=0
         COV=0
        LULA=0
         CALL CALCULA

         IF(COV.EQ.1)THEN
         PRINT*,' '
         WRITE(13,*)'     '
         DO 37 I=1,SI
         PRINT*,V(I)
         WRITE(13,*)V(I)
 37      CONTINUE
        ENDIF
         PRINT*,'PARO='
         READ*,IPARO
         IF(IPARO.EQ.1)GOTO 100
         GOTO 32
```

```
190
191          31      JBAN=0
192                PRINT*,'QUANTOS ESTRATOS CONSIDERO '
193                  READ*,JVC
194                  IF(JVC.EQ.2)THEN
195                  CM=JVC-1
196                  ELSE
197                  CM=JVC
198                  ENDIF
199          40      I=2*CM
200                  PRINT*,'T+'
201                  READ*,V(I)
202                  J=I+1
203                  PRINT*,'R+'
204                  READ*,V(J)
205
206                WRITE(13,*)' '
207                WRITE(13,*)'ESPESSURA PROPOSTA PARA O ESTRATO =',V(I)
208                WRITE(13,*)'RESISTIVIDADE PROPOSTA PARA O ESTRATO =',V(J)
209
210                    IF(CM.EQ.(JVC-1))THEN
211                    CM=JVC
212                    GOTO 40
213                    ENDIF
214                    VA=JVC
215
216                WRITE(13,43)
217           43   FORMAT(1HO,50X,20HINVERSOES EFECTUADAS)
218
219          C  ***************************************************************************
220          C   E PRECISO INDICAR  QUAIS AS ORDENS DAS MEDIDAS A UTILIZAR
221          C   NA INVERSAO
222          C  ***************************************************************************
223
224           50   SI=2*VA+1
225                   IARQ=1
226                DO 57 I=1,SI
227                SOM(I)=SOMQ(I)=0.000
228                   DO 56 J=1,SI
229                   SOMC(J,I)=0.000
230           56      CONTINUE
231           57   CONTINUE
232                NCN=0
233
234                WRITE(13,*)'NUMERO DE ORDEM DAS MEDIDAS UTILIZADAS'
235
236                DO 60 I=1,SI
237                PRINT*,'NUMERO DE ORDEM DA MEDIDA ',I
238                READ*,IVC(I)
239
240                WRITE(13,*)IVC(I)
241
242           60   CONTINUE
243
244                DO 90 IJ=1,9
245                   IF(VA.EQ.2.AND.JBAN.EQ.1)THEN
246                   DO 77 I=1,3
247                   V(I)=VAZ(IJ,I)
248           77      CONTINUE
249                   ENDIF
250                DO 80 I=1,SI
251                CT(I)=C(IJ,IVC(I))
252                N1J(I)=N1(IJ,IVC(I))
```

```
253                DU(I)=D(IJ,IVC(I))
254                CU(I)=CS(IJ,IVC(I))
255                N2U(I)=N2(IJ,IVC(I))
256                PU(I)=P(IJ,IVC(I))
257                CIPU(I)=CIP(IJ,IVC(I))
258             80 CONTINUE
259
260                WRITE(13,*)' '
261
262                SOPOT=0
263                COV=0
264                 LULA=0
265                 III=0
266
267                CALL CALCULA
268
269                IF(COV.EQ.1.AND.LULA.EQ.0)GOTO 82
270
271                PRINT*,'NAO CONVERGIU A MENOS DE PREPOM/10 -'
272                   WRITE(13,*)'NAO CONVERGIU A MENOS DE PREPOM/10 -'
273                    PRINT*,'GRADIENTE INICIAL =',ANGRAD1
274                    WRITE(13,*)'GRADIENTE INICIAL =',ANGRAD1
275                    PRINT*,'GRADIENTE ACTUAL =',RANGRAD
276                    WRITE(13,*)'GRADIENTE ACTUAL =',RANGRAD
277                    PRINT*,'SOMA DE QUADRADOS INICIAL=',FNORM1
278                    WRITE(13,*)'SOMA DE QUADRADOS INICIAL =',FNORM1
279                    PRINT*,'SOMA DE QUADRADOS ACTUAL =',RPNORM
280                    WRITE(13,*)'SOMA DE QUADRADOS ACTUAL =',RPNORM
281                    PRINT*,'APROXIMACOES RELATIVAS'
282                   WRITE(13,*)'APROXIMACOES RELATIVAS'
283                    DO 76 I=1,SI
284                    PRINT*,DABS(KK(I))/PU(I)
285                    WRITE(13,*)DABS(KK(I))/PU(I)
286             76     CONTINUE
287
288                PRINT*,'CONSIDERO ESTES VALORES ?'
289                READ*,COV
290
291                 IF(COV.EQ.1)WRITE(13,*)'OS VALORES FORAM CONSIDERADOS'
292
293                   IF(IJ.LT.9)THEN
294                   PRINT*,'NOVOS PARAMETROS?'
295                   READ*,III
296                   IF(III.EQ.1)THEN
297
298                    WRITE(13,*)'NOVOS PARAMETROS'
299
300                   DO 86 I=1,SI
301                   PRINT*,'V(',I,')'
302                   READ*,UVA(I)
303
304             86    CONTINUE
305                   ENDIF
306                   ENDIF
307
308             82 WRITE(13,*)' '
309                PRINT*,' '
310
311                DO 81 I=1,SI
312
313                PRINT*,V(I)
314                WRITE(13,*)V(I)
315
```

```
316                 VAZ(IJ,I)=V(I)
317                 IF(III.EQ.1)VAZ(IJ,I)*UVA(I)
318           81    CONTINUE
319
320                 IF(COV.EQ.1)THEN
321                 NCN=NCN+1
322                 DO 96 I=1,SI
323                 SOM(I)=SOM(I)+V(I)
324                 SOMQ(I)=SOMQ(I)+V(I)*V(I)
325                   DO 97 J=I+1,SI
326                     SOMC(I,J)=SOMC(I,J)+V(I)*V(J)
327           97      CONTINUE
328                   IF(III.EQ.1)V(I)=UVA(I)
329           96    CONTINUE
330                 ENDIF
331           90    CONTINUE
332
333                 PRINT*,'MEDIAS E DESVIOS'
334                 WRITE(13,*)' '
335                 WRITE(13,*)'MED.,DESV.,DESV. DAS MED.,DESV. E DESV. DAS MED. REL.'
336                  WRITE(13,*)'              NUMERO DE MEDIDAS=',NCN
337
338                 DO 63 I=1,SI
339                 SMED(I)=SOM(I)/NCN
340                 DESV(I)=DSQRT((NCN*SOMQ(I)-SOM(I)**2)/NCN/(NCN-1))
341
342                    DNCN=NCN
343                 PRINT*,SMED(I),DESV(I),DESV(I)/SMED(I),DESV(I)/DSQRT(DNCN)
344                 WRITE(13,*)SMED(I),DESV(I),DESV(I)/DSQRT(DNCN)
345                  WRITE(13,*)DESV(I)/SMED(I),DESV(I)/SMED(I)/DSQRT(DNCN)
346
347           63    CONTINUE
348                  WRITE(13,*)' '
349                  WRITE(13,*)'COVARIANCIAS E COEFICIENTES DE CORRELACCAO'
350                  DO 62 I=1,SI
351                   DO 61 J=I+1,SI
352                  COEF=(NCN*SOMC(I,J)-SOM(I)*SOM(J))/NCN/(NCN-1)
353                  WRITE(13,*)'COVARIANCIA ENTRE V(',I,') E V(',J,') =',COEF
354                  PRINT*,'COVARIANCIA ENTRE V(',I,') E V(',J,') =',COEF
355                  COEF=COEF/DESV(I)/DESV(J)
356                  WRITE(13,*)'CORRELAC. ENTRE V(',I,') E V(',J,') =',COEF
357                  PRINT*,'CORREL. ENTRE V(',I,') E V(',J,') =',COEF
358           61      CONTINUE
359           62     CONTINUE
360                  WRITE(13,*)' '
361                  PRINT*,' '
362                 JVA=VA
363                 PRINT*,'PARO ?'
364                 READ*,IPARO
365
366                 IF(IPARO.EQ.1)GOTO 100
367
368                 PRINT*,'QUANTOS ESTRATOS CONSIDERO ?'
369                  READ*,JVC
370                  IF(JVC.NE.JVA)THEN
371                  CM=JVC
372                  IF(JVC.EQ.2)THEN
373                  PRINT*,'UTILIZO SEMPRE OS VALORES DO ESTRATO ANTERIOR ?'
374                  READ*,JBAN
375                  ENDIF
376                  GOTO 40
377                  ENDIF
378
```

```
      PRINT*,'NOVOS PARAMETROS ++
      READ*,I

      IF(I.EQ.0)GOTO 50

      DO 91 I=1,SI
      PRINT*,'V(',I,')++
      READ*,V(I)
 91   CONTINUE

      WRITE(13,*)' '
      WRITE(13,94)
 94   FORMAT(22H PARAMETROS PROPOSTOS )
      WRITE(13,*)(V(I),I=1,SI)
      WRITE(13,*)' '

      GOTO 50

C  ***************************************************************************
C   SAO LIDOS OS PARAMETROS REAIS
C  ***************************************************************************

 100  READ(12)VA,(V(I),I=1,2*VA+1)

      PRINT*,VA,(V(I),I=1,2*VA+1)
      WRITE(13,*)' '
      WRITE(13,117)
 117  FORMAT(1H0,50X,17H PARAMETROS REAIS)
      WRITE(13,*)(V(I),I=1,SI)
      WRITE (5,1005) VA, (V(I),I=1,2*VA+1), SECOND()-STIME

      STOP
1000 FORMAT ('1'///T80,'JOANA,TAPE5,CARLOS M. C. ESPAIN',A10,15(/)
     F         T10,'TIPO DE CONFIGURACAO : SCHLUMBERGER'//)
1001 FORMAT (T10,'TIPO DE DISTRIBUICAO DE ERROS : UNIFORME'//
     F         T10,'ERRO RELATIVO MAXIMO (PREPOM) =',F4.2//)
1002 FORMAT (T10,'POTENCIA MEDIDA =',E9.2//
     F         T10,'PRIMEIRA DISTANCIA INTERELECTRODICA =',I3//
     F         T10,'PASSO DAS DISTANCIAS =',F5.2//
     F         T10,'NUMERO DE MEDIDAS =',I3//
     F         T10,'MENOR CORRENTE INJECTADA =',F6.3//
     F         T10,'MAIOR CORRENTE INJECTADA =',F6.3)
1003 FORMAT ('1',T10,'NUMEROS DE ORDEM DAS MEDIDAS A UTILIZ',
     F         'AR :     ',5I8//
     F         T10,'DISTANCIAS INTERELECTRODICAS CORRESPONDEN',
     F         'TES :',5F8.1///
     F         T10,'ITERACOES'/T10,9('-')//
     F         T14,5('          V(',I1,')')/)
1005 FORMAT ('1'//////T10,'NUMERO DE ESTRATOS DO TERRENO =',I2//
     F         T10,'PARAMETROS REAIS :',4(F8.3,',',),F8.3//
     F         T10,'TEMPO DE EXECUCAO DO PROGRAMA =',F10.3,' SECS')
      END
```

```
--VARIABLE MAP--(LD=M/A/R)
 -NAME---ADDRESS--BLOCK-----PROPERTIES-------TYPE---------SIZE---REFERENCES-

  ANGRAD1 473348  /P/                        DOUBLE                16    273/W  274/W
  B          648  /P/                        DOUBLE       10000    16     20/I
  BE      143318                             DOUBLE                35/2  36     43     58/W
  C       105738                             DOUBLE         270     9     43/S   44     45     45     109    136    164    251
  CIP     117278                             DOUBLE         270     9     37/R   86/A   86/A   90/A   109    136    170    257
  CIPU    474018  /P/                        DOUBLE           5    16    170/S  257/S

                                                                    A=ARGLIST, C=CTRL OF DO, I=DATA INIT,
                                                                    R=READ, S=STORE, U=I/O UNIT, W=WRITE
```

NAME	ADDRESS	BLOCK	PROPERTIES	TYPE	SIZE	REFERENCES
CM	143273			INTEGER		13 195/S 197/S 199 210 211/S 371/S
COEF	144073			DOUBLE		352/S 353/W 354/W 355 355/S 356/W 357/W
COV	473503		/P/	INTEGER		13 16 174/S 178 263/S 269 269/R 291 320
CS	55473			DOUBLE	270	9 44/S 46 46 109 136 167 254
CT	473513		/P/	DOUBLE	5	16 164/S 251/S
CU	268		/P/	DOUBLE	5	16 167/S 254/S
D	45138			DOUBLE	270	9 35/R 42 42/S 43 44 58/W 74/W 75/W 83/A
						90/W 166 253
DEEP	474158		/P/	DOUBLE		16 64/S 70/S
DESV	143558			DOUBLE	5	11 115/S 117/W 117/W 118/W 118/W 340/S 343/W 343/W 343/W
						344/W 344/W 345/W 345/W 355 355
DNCN	144038			DOUBLE		342/S 343/A 344/A 345/A
DU	148		/P/	DOUBLE	5	16 166/S 172/W 253/S
EF	143428			DOUBLE		40/S 42
EMM	474008		/P/	INTEGER		13 16 54/S
EZE	473768		/P/	DOUBLE		16 53/S
FE	143338			DOUBLE		35/R 40 58/W 86/W
FNORM1	471268		/P/	DOUBLE		16 277/W 278/W
I	143408			INTEGER		37 41/C 42 43 43 44 44 44 45 49
						45 46 46 46 49 90 90/C 90 90 103/C
						109 109 109 109 152/C 153/W 154 155/W 155 155/C
						159/W 160 160 161/W 161 161 163/C 164 164 164
						165 165 165 166 166 166 167 167 167 168
						168 168 169 169 169 170 170 170 172 172
						172/C 172/W 181/C 182 183 199/S 201 202 207 223/C
						227 227 229 236/C 237/W 238 240 246/C 247 247
						250/C 251 251 252 252 253 253 254 254 253
						255 256 256 257 257 283/C 284 284 285 285
						300/C 301/W 302 311/C 313 314 316 316 317 317
						322/C 323 323 323 324 324 324 324 325/C 325
						326 326 328 328 338/C 339 339 340 340 340
						343 343 343 343 343 344 344 344 345 345
						345 345 350/C 351/C 352 352 353/W 354/W 355 355/W
						357/W 380/R 382 384/C 385/W 386 392 401 401/C 401
						403 403/C 403 407 408 408/C 408
IARG	558		/P/	INTEGER		16 148/S 225/S
ICMI	473758		/P/	INTEGER		16 51/S 52 52 52 52 52/S 77/W
IDE	143368			INTEGER		35/R 59
III	143748			INTEGER		265/S 295/R 296 317 328
IJ	143708			INTEGER		244/C 247 251 252 253 254 255 256 257 293
						316 317
IPARG	143518			INTEGER		127/R 128 187/R 188 364/R 366
IVC	140368			INTEGER	5	11 238/R 240/W 251 252 253 254 255 256 257
I1	474208		/P/	INTEGER	5	9 16 160/R 161/W 164 165 166 167 168 169
						170 172/W
I2	140178			INTEGER	5	9 160/R 161/W 164 165 166 167 168 169 170
J	143378			INTEGER		37 39/C 40 40 42 43 43 44 44 44
						45 45 45 46 46 46 49 90 90/C 93
						90 108/C 109 109 109 109 202/S 204 208 223/C
						229 325/C 326 326 326 351/C 352 352 353/W 354/W
						355 356/W 357/W
JOAN	143638			INTEGER		191/S 245 374/R
JJQ	143548			INTEGER		143/R 144
JVA	144118			INTEGER		362/S 370
JVC	143558			INTEGER		150/R 151 193/R 194 195 197 210 210 211 214
						369/R 370 371 372
KK	473368		/P/	DOUBLE	5	12 16 284/A 285/A
KP	03		/P/	DOUBLE		12 16 38/S 109 109 109 136 136 136
LULA	474178		/P/	INTEGER		16 175/S 264/S 269
NCN	143668			INTEGER		232/S 321 321/S 336/W 339 340/A 340 340/A 340/A 340
						342 352 352 352 352 352
NM	143358			INTEGER		35/R 37 39/C 49 58/W 75 76/W 82 84 85/W
						86 90/C 105/C

-NAME-	-ADDRESS-	-BLOCK-	-PROPERTIES-	-TYPE-	-SIZE-	-REFERENCES-									
N1	127638			DOUBLE	270	9	12	45/S	165	252					
N1U	473638	/P/		DOUBLE	5	12	15	165/S	252/S						
N2	66038			DOUBLE	270	9	12	45/S	168	255					
N2U	408	/P/		DOUBLE	5	12	16	168/S	255/S						
P	75378			DOUBLE	270	9	49/R	64	70	82/W	82/W	84/W	84/W	86/W	10?
						136	169	256							
PREDER	628	/P/		DOUBLE		16	99/S								
PREPOC	608	/P/		DOUBLE		16	98/S								
PREPOM	568	/P/		DOUBLE		16	35/R	58/W	60/W	62/W	63/W	64	67/W	69/W	7?
						98	99								
PU	472268	/P/		DOUBLE	5	16	169/S	256/S	284/W	285/W					
RANGRAD	471308	/P/		DOUBLE		16	275/W	276/W							
RPNORM	471248	/P/		DOUBLE		16	279/W	280/W							
R1	143528			DOUBLE		136/S	138/W	140/W							
SI	538	/P/		INTEGER		13	16	147/S	152/C	158/C	163/C	172	172	172/C	181/C
						224/S	226/C	228/C	236/C	250/C	283/C	300/C	311/C	322/C	329/C
						338/C	350/C	351/C	384/C	392	407				
SMED	140433			DOUBLE	5	11	114/S	117/W	117/W	118/W	118/W	339/S	343/W	343/W	344/W
						345/W	345/W								
SOM	142213			DOUBLE	5	11	106/S	111	111/S	114	115/A	227/S	323	323/S	339
						340	352	352							
SOMC	142458			DOUBLE	25	11	229/S	326	326/S	352					
SOMQ	142338			DOUBLE	5	11	107/S	112	112/S	115/A	227/S	324	324/S	340	
SOPOT	528	/P/		INTEGER		13	16	173/S	262/S						
STIME	143308			REAL		14	34/S	408/W							
T	472408	/P/		DOUBLE	30	16	21/I								
UVA	140248			DOUBLE	5	9	302/R	317	328						
V	23	/P/		DOUBLE	5	16	109/S	110/W	111	112	112	136/S	154/R	155/W	182/W
						183/W	201/R	204/R	207/W	208/W	247/S	313/W	314/W	316	323
						324	324	326	326	328/S	386/R	392/W	401/R	403/W	407/W
						408/W									
VA	548	/P/		INTEGER		13	16	135/S	146/R	147	214/S	224	245	362	401/R
						401	401/C	403/W	403	403/C	408/W	408	408/C		
VAZ	140678			DOUBLE	45	11	247	316/S	317/S						
VTE	474138	/P/		DOUBLE		16	55/S	79/W							
Y	471328	/P/		DOUBLE	30	16	22/I								

--PROCEDURES--(LO=M/A/R)

D=DEF LINE OF STMT FUNC
A=ACTUAL ARGUMENT

-NAME-	-TYPE-	-ARGS-	-CLASS-	-REFERENCES-								
CALCULA		0	SUBROUTINE	176	267							
DABS	DOUBLE	1	INTRINSIC	284/W	285/W							
DATE	CHAR*10	0	FUNCTION	15	36/W							
DSQRT	DOUBLE	1	INTRINSIC	64	86/W	86/W	90/W	115	340	343/W	344/W	345/W
INT	GENERIC	1	INTRINSIC	86/W								
SECOND	REAL	0	INTRINSIC	14	34	408/W						

--STATEMENT LABELS--(LO=M/A/R)

A=ASSIGN STMT, D=DO STMT,
R=READ, W=WRITE

-LABEL-	-ADDRESS-	-PROPERTIES-	-DEF-	-REFERENCES-
6	33638	FORMAT	80	79/W
9	INACTIVE	DO-TERM	47	41/D
10	INACTIVE	DO-TERM	48	39/D
11	33568	FORMAT	73	72/W
13	33658	FORMAT	89	88/W
15	33738	FORMAT	91	90/W
18	INACTIVE	DO-TERM	113	108/D
19	INACTIVE	DO-TERM	122	105/D
31	13148		191	144
32	10123		145	189
33	INACTIVE	DO-TERM	156	152/D

```
 -LABEL--ADDRESS---PROPERTIES-----DEF--REFERENCES-

     34    10658                    157    151
     35   INACTIVE DO-TERM          162    158/D
     36   INACTIVE DO-TERM          171    163/D
     37   INACTIVE DO-TERM          184    181/D
     40    13333                    199    212    376
     43    33778   FORMAT           217    216/W
     50    14168                    224    382    395
     56   INACTIVE DO-TERM          230    228/D
     57   INACTIVE DO-TERM          231    226/D
     60   INACTIVE DO-TERM          242    236/D
     61   INACTIVE DO-TERM          358    351/D
     62   INACTIVE DO-TERM          359    350/D
     63   INACTIVE DO-TERM          347    338/D
     76   INACTIVE DO-TERM          286    283/D
     77   INACTIVE DO-TERM          248    246/D
     80   INACTIVE DO-TERM          258    250/D
     81   INACTIVE DO-TERM          318    311/D
     82    20318                    308    269
     86   INACTIVE DO-TERM          304    300/D
     90   INACTIVE DO-TERM          331    244/D
     91   INACTIVE DO-TERM          387    384/D
     94    34048   FORMAT           391    390/W
     96   INACTIVE DO-TERM          329    322/D
     97   INACTIVE DO-TERM          327    325/D
    100    27238                    401    128    188    366
    117    34108   FORMAT           406    405/W
   1000    34148   FORMAT           411     36/W
   1001    34278   FORMAT           413     63/W
   1002    34428   FORMAT           415     86/W
   1003    34728   FORMAT           421    172/W
   1005    35168   FORMAT           427    408/W


--ENTRY POINTS--(LO*M/A/R)                                  D=DEFINITION, R=RETURN
 -NAME---ADDRESS--ARGS------REFERENCES-

  JOANA      228     0          1/D


--DO LOOPS--(LO*M/A/R)
 -LABEL--ADDRESS----PROPERTIES-------------INDEX---FROM-----TO

     10  *NO REFS*  XREF/OUTER              J         39     48
      9  *NO REFS*                          I         41     47
  I/O    *NO REFS*  XREF/OUTER              I         90     90
  I/O    *NO REFS*  XREF                    J         90     90
     19  *NO REFS*  XREF/OUTER              I        105    122
     18  *NO REFS*  XREF                    J        108    113
     33  *NO REFS*  XREF                    I        152    156
     35  *NO REFS*  XREF                    I        158    162
     36  *NO REFS*                          I        163    171
  I/O    *NO REFS*  XREF                    I        172    172
     37  *NO REFS*  XREF                    I        181    184
     57  *NO REFS*  OUTER                   I        226    231
     56  *NO REFS*                          J        228    230
     60  *NO REFS*  XREF                    I        236    242
     90  *NO REFS*  XREF/OUTER              IJ       244    331
     77  *NO REFS*                          I        246    248
     80  *NO REFS*                          I        250    258
     76  *NO REFS*  XREF                    I        283    286
     86  *NO REFS*  XREF                    I        300    304
     81  *NO REFS*  XREF                    I        311    318
     96  *NO REFS*  OUTER                   I        322    329
```

```
 -LABEL--ADDRESS----PROPERTIES-------------INDEX---FROM-----TO

     97  *NO REFS*                          J        325     327
     63  *NO REFS*  XREF                    I        338     347
     62  *NO REFS*  XREF/OUTER              I        350     359
     61  *NO REFS*  XREF                    J        351     358
     91  *NO REFS*  XREF                    I        384     387
  I/O    *NO REFS*  XREF                    I        401     401
  I/O    *NO REFS*  XREF                    I        403     403
  I/O    *NO REFS*  XREF                    I        408     408


--COMMON+EQUIVALENCE--(LO=M/A/R)


  /P/       LEVEL = 1, SIZE = 20245 WORDS CM
     KP<1-2>                V<3-12>                DU<13-22>              CU<23-32>              N2U<33-42>             SOPOT<43>
     SI<44>                 VA<45>                 IARQ<46>               PREPOM<47-48>          PREPOC<49-50>          PREDER<51-52>
     B<53-20052>            RPNORM<20053-20054>    FNORM1<20055-20056>    RANGRAD<20057-20058>   Y<20059-20118>         PU<20119-20128>
     T<20129-20188>         ANGRAD1<20189-20190>   KK<20191-20200>        COV<20201>             CT<20202-20211>
     N1U<20212-20221>       ICMI<20222>            EZE<20223-20224>       EMM<20225>             CIPU<20226-20235>
     VTE<20236-20237>       DEEP<20238-20239>      LULA<20240>            I1<20241-20245>


--I/O UNITS--(LO=M/A/R)                                                          R=READ, W=WRITE
 -NAME--- PROPERTIES-------------REFERENCES-

  TAPE12  BIN/SEQ                  35/R   37/R   49/R  401/R
  TAPE13  FMT/SEQ                  61/W   62/W   68/W   69/W   72/W   74/W   75/W   76/W   77/W   78/W   79/W   83/W   84/W   85/W
                                   88/W   90/W  101/W  102/W  104/W  110/W  117/W  120/W  124/W  139/W  140/W  155/W  157/W  161/W
                                  180/W  183/W  206/W  207/W  208/W  216/W  234/W  240/W  260/W  272/W  274/W  276/W  278/W  280/W
                                  282/W  285/W  291/W  298/W  308/W  314/W  334/W  335/W  336/W  344/W  345/W  348/W  349/W  353/W
                                  356/W  360/W  389/W  390/W  392/W  393/W  404/W  405/W  407/W
  TAPE5   FMT/SEQ                  36/W   63/W   86/W  172/W  408/W


--STATISTICS--

  PROGRAM-UNIT LENGTH          144168 =  6414
  CM LABELLED COMMON LENGTH    474258 =  20245
  CM STORAGE USED              714008 =  29440
  COMPILE TIME                 5.493 SECONDS
```

```
      SUBROUTINE CALCULA
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
      DIMENSION H(6),S(5,0:5),BA(5),CPD(0:5,5),
     +    SN(0:5),MAL(5),DCU(5),VIZ(5),TUVU(5,5),SUVU(5,5),
     +    GRAD(5),SIGMA(5),PPU(5),A(100,100),RGRAD(5),DEV(5),
     +    EMD(0:5,5),EPRD(0:5,5),BN(5),PREPE(0:5),PREP(0:5),IBA(0:5,5),
     +    EPD(0:5,5,100),DAS(5,5),SAS(5),UVU(5,5),VUV(5,5),
     +    EDD(0:5,5,100),DF(0:5,5),ICMD(0:5,5),W(5)
      DOUBLE PRECISION KK,N3,K1,K2,MAL,M1,M2,M3,M4,M5,M6,M7,M8,M9,M10,
     +         N1U,N2U,MALO,MAL1,MAL2,MAL3,LA,KP
      INTEGER SOPOT,SI,VA,AFE,BA,VC,SBA,SAB,BAB,ABA,
     +             COV,EMD,EMA,EMM,EL
      COMMON/P/KP,V(5),DU(5),CU(5),N2U(5),SOPOT,SI,VA,IARQ,
     +   PREPOM,PREPOC,PREDER,B(100,100),RPNORM,FNORM1,RANGRAD,
     +        Y(5,6),PU(5),T(5,6),ANGRAD1,KK(5),
     +  COV,CT(5),N1U(5),ICMI,EZE,EMM,CIPU(5),VTE,DEEP,LULA,I1(5)
      COMMON/A/K1,K2,H1,H2,LA
       COMMON/Q/LCON,SIGMA,ICAL,ARMI,ARMA,ARQ,CASA

C       CALCULA RESISTIVIDADES E ESPESSURAS PARA 1 E 2 ESTRATOS

        ASI=SI
       CASA=0.0D0
       NAV=0
        NLL=0
        MCO=0
        ARQ=0.0D0
      DO 999 I=1,SI
      DCU(I)=N2U(I)-N1U(I)
  999 CONTINUE
      PREPOL=PREPOM/10.000
      NAOP=1
      PREPE(0)=PREPOC
      PREP(0)=PREPOC/100.000
      DO 1006 I=1,SI
      PREPE(I)=PREDER
      PREP(I)=PREDER/100.000
      W(I)=1.0D0/DSQRT(ASI)
      PPU(I)=PU(I)
 1006 CONTINUE

 1001 ETA=0.0D0
      DO 1003 I=1,SI
      PU(I)=W(I)*PPU(I)
      ETA=ETA+PU(I)*PU(I)
 1003 CONTINUE
      ETA=PREPOM*PREPOM*ETA/1000.000

 1002 LUZ=0
      DO 1004 J=1,SI
      VIZ(J)=V(J)
 1004 CONTINUE

 1005 PNORM=0.000
       RPNORM=0.000
       NAV=NAV+1
      IF(SOPOT.EQ.1)THEN
      NUC=0
      ELSE
      NUC=SI
      ENDIF
      R1=V(1)
```

```
64                H1=V(2)
65                R2=V(3)
66                K1=(R2-R1)/(R2+R1)
67                PARF=KP*R1
68                CF=2.0D0*PARF
69                DO 1010 I=1,SI
70                DF(0,I)=PARF*(1.0D0/CT(I)-1.0D0/CU(I))*CIPU(I)
71                CPD(0,I)=0.0D0
72                IBA(0,I)=BA(I)*0
73                  EMD(0,I)=1
74                  EPRD(0,I)=1.0D0/EZE
75                  ICMD(0,I)=ICMI
76                 DO 1020 J=1,NUC
77                 DF(J,I)=CPD(J,I)=0.0D0
78                 IBA(J,I)=0
79                  EMD(J,I)=1
80                  EPRD(J,I)=1.0D0/EZE
81                  ICMD(J,I)=ICMI
82           1020  CONTINUE
83                 IF(VA.EQ.1)DF(3,I)=DF(0,I)/R1
84                 IF(VA.EQ.2)DF(5,I)=DF(0,I)/R1
85           1010 CONTINUE
86
87                IF(VA.EQ.1)GOTO 2000
88
89           C  ************************************************************************
90           C   SITUACAO DE 2 ESTRATOS
91           C   ************************************************************************
92
93                H2=V(4)+V(2)
94                R3=V(5)
95                H(1)=H1
96                H(2)=H2
97                H(3)=H1+H2
98                H(4)=2.0D0*H2
99                H(5)=2.0D0*H2-H1
100               H(6)=2.0D0*H1
101               K2=(R3-R2)/(R3+R2)
102
103                 IF(K1.LE.0.0D0.AND.K2.LE.0.0D0)THEN
104                  CALL ALFA
105                 ELSE
106                  LA=1.0D0
107                 ENDIF
108                 IF(LA.EQ.1.0D0)THEN
109                 MLA=1
110                 ELSE
111                 MLA=0
112                 ENDIF
113               CF=LA*CF
114               V1=1.0D0-LA
115               V2=K1*LA
116               V3=K2*LA
117               V4=K1*K2*LA
118
119                   IF(NUC.EQ.0)THEN
120                   AFE=2
121                   GOTO 1031
122                   ENDIF
123
124               AFE=6
125
126               D1=-2.0D0*R2/(R1+R2)/(R1+R2)
```

```
127                D2=-D1*R1/R2
128                D3=-2.0D0*R3/(R2+R3)/(R2+R3)
129                D4=-D3*R2/R3
130                D5=K1*D3+K2*D2
131                V5=K1*V2
132                V6=K2*V3
133                V7=D5*V2
134                V8=D5*V3
135                V9=D2*V2
136                V10=D3*V3
137                V11=D5*LA
138                MAL(3)=CF
139                 MAL(1)=D4*CF
140                 MAL(2)=-4.0D0*K2*CF
141                MAL(4)=-4.0D0*K1*CF
142                MAL(5)=D1*CF
143
144          C  ************************************************************************
145          C       CALCULO DOS TERMOS DAS SERIES DE POTENCIAS E RESPECTIVAS DERIVADAS
146          C ************************************************************************
147
148           1031 N=0
149                 B(1,1)=1.0D0
150
151           1040 NS=N+1
152                IF(NUC.NE.0)THEN
153                M1=1.0D0-NS*V5
154                M2=NS*V2
155                M3=NS*V3
156                M4=-NS*V4
157                M5=D3-NS*V7
158                M6=NS*V9
159                M7=NS*V11
160                M8=NS*V10
161                M9=-NS*V8
162                M10=NS*V6
163                ENDIF
164                 DO 1080 J=1,N
165                 J1=J+1
166                 IF(MLA.EQ.1)THEN
167                 NII=2*N-2*J+1
168                 ELSE
169                 NII=N-J+1
170                 ENDIF
171                 DO 1070 I=NII,2*N-J
172                 X=A(I,J)
173                 B(I+2,J)=B(I+2,J)+V2*X
174                 B(I,J1)=B(I,J1)-V4*X
175                 B(I+1,J1)=B(I+1,J1)+V3*X
176                 IF(MLA.EQ.0)B(I+1,J)=B(I+1,J)+V1*X
177           1070  CONTINUE
178           1080   CONTINUE
179
180                DO 1140 J=1,NS
181                 IF(MLA.EQ.1)THEN
182                 NII=2*NS-2*J+1
183                 ELSE
184                 NII=NS-J+1
185                 ENDIF
186
187                DO 1130 I=NII,2*NS-J
188                X=A(I,J)*B(I,J)
189                B(I,J)=0.0D0
```

```
190                N3=(I-NS)*H1+(J-1)*H2
191                IF(NUC.EQ.0)THEN
192                DO 1100 VC=1,AFE
193                ZVC=H(VC)+N3
194                QVC=4.0D0*ZVC*ZVC
195                DO 1090 II=1,SI
196                IF(BA(II).EQ.1)GOTO 1090
197                RHH=DSQRT(QVC+N2U(II))
198                RYY=DSQRT(QVC+N1U(II))
199                T(II,VC)=T(II,VC)+DCU(II)*X/RHH/RYY/(RHH+RYY)
200           1090 CONTINUE
201           1100 CONTINUE
202                ELSE
203                DO 1120 VC=1,AFE
204                ZVC=H(VC)+N3
205                QVC=4.0D0*ZVC*ZVC
206                DO 1110 II=1,SI
207                IF(BA(II).EQ.1)GOTO 1110
208                HH=QVC+N2U(II)
209                RHH=DSQRT(HH)
210                YY=QVC+N1U(II)
211                RYY=DSQRT(YY)
212                YHY=1.0D0/RHH/RYY
213                TF=DCU(II)*X*YHY/(RHH+RYY)
214                T(II,VC)=T(II,VC)+TF
215                Y(II,VC)=Y(II,VC)+TF*(1.0D0/HH+1.0D0/YY+YHY)*ZVC
216           1110 CONTINUE
217           1120 CONTINUE
218                ENDIF
219           1130 CONTINUE
220
221           1140 CONTINUE
222
223                SBA=0
224                SAB=0
225
226                DO 1180 II=1,SI
227
228                IF(BA(II).EQ.1)GOTO 1180
229
230                CAP=CIPU(II)
231                BAB=0
232                ABA=0
233                W1=T(II,1)
234                W2=T(II,2)
235                T(II,2)=T(II,1)*0.0D0
236                IF(IBA(0,II).EQ.1.AND.IBA(5,II).EQ.1)GOTO 1139
237                SN(0)=CF*(K1*W1+K2*W2)*CAP
238                CPD(0,II)=CPD(0,II)+SN(0)
239           1139 IF(NUC.EQ.0)GOTO 1150
240                W3=T(II,3)
241                W4=T(II,4)
242                W5=T(II,5)
243                Z1=Y(II,1)
244                Z2=Y(II,2)
245                Z3=Y(II,3)
246                Z4=Y(II,4)
247                Z5=Y(II,5)
248                T(II,5)=T(II,4)=T(II,3)=Y(II,5)=Y(II,4)=Y(II,3)=0.0D0
249                Y(II,1)=Y(II,2)=0.0D0
250                IF(IBA(1,II).EQ.1)GOTO 1141
251                SN(1)=(M1*W2+M2*W3+M3*W4+M4*W5)*MAL(1)*CAP
252                CPD(1,II)=CPD(1,II)+SN(1)
```

```
 1141 IF(IBA(2,II).EQ.1.AND.IBA(4,II).EQ.1)GOTO 1142
      SN(2)=(M1*Z2+M2*Z3+M3*Z4+M4*Z5)*MAL(2)*CAP
      CPD(2,II)=CPD(2,II)+SN(2)
 1142 W6=T(II,6)
      Z6=Y(II,6)
      T(II,6)=Y(II,6)=0.0D0
      IF(IBA(3,II).EQ.1)GOTO 1143
      SN(3)=(D2*W1+M5*W2+M6*W6+M7*W3+M8*W4+M9*W5)*MAL(3)*CAP
      CPD(3,II)=CPD(3,II)+SN(3)
 1143 IF(IBA(4,II).EQ.1)GOTO 1144
      SN(4)=(Z1+M2*Z6-M4*Z2+M3*Z3+M10*Z5)*MAL(4)*CAP+SN(2)
      CPD(4,II)=CPD(4,II)+SN(4)
 1144 IF(IBA(5,II).EQ.1)GOTO 1150
      SN(5)=(W1+M2*W6+M4*W2+M3*W3-M10*W5)*CAP*MAL(5)+SN(0)/R1
      CPD(5,II)=CPD(5,II)+SN(5)

 1150 GOTO 7500

 1180 CONTINUE

      IF(SBA.EQ.0)GOTO 1200
      IF(SAB.EQ.0)NUC=0

      N=N+1
      GOTO 1040

 1200 GOTO 3000

C  ***********************************************************************
C   SITUACAO DE UM ESTRATO
C  ***********************************************************************

 2000 M1=4.0D0*H1*H1
      M2=2.0D0*R1/(K1*(R1+R2)*(R1+R2))
      M3=-4.0D0*H1
      M4=-R2/R1

C   ***************************************************************************
C      CALCULO DOS TERMOS DAS SERIES DAS POTENCIAS E RESPECTIVAS DERIVADAS
C   ***************************************************************************

      N=1

 2030 M5=K1**N*CF
      M6=N*N
      M7=M1*M6
      MAL0=M5
      IF(NUC.EQ.0)GOTO 2040
      MAL1=N*M5*M2
      MAL2=M6*M5*M3
      MAL3=MAL1*M4

 2040 SBA=0
      SAB=0

      DO 2080 II=1,SI
      CAP=CIPU(II)
      IF(BA(II).EQ.1)GOTO 2080
      YY=1.0D0/DSQRT(M7+N1U(II))
      HH=1.0D0/DSQRT(M7+N2U(II))
      YH=YY-HH
      BAB=0
      ABA=0
```

```
316                IF(IBA(0,II).EQ.1.AND.IBA(3,II).EQ.1)GOTO 2139
317                SN(0)=MAL0*YH*CAP
318                CPD(0,II)=CPD(0,II)+SN(0)
319           2139 IF(NUC.EQ.0)GOTO 2050
320                IF(IBA(1,II).EQ.1)GOTO 2141
321                SN(1)=MAL1*YH*CAP
322                CPD(1,II)=CPD(1,II)+SN(1)
323           2141 IF(IBA(2,II).EQ.1)GOTO 2142
324                SN(2)=MAL2*(YY**3-HH**3)*CAP
325                CPD(2,II)=CPD(2,II)+SN(2)
326           2142 IF(IBA(3,II).EQ.1)GOTO 2050
327                SN(3)=MAL3*YH*CAP+SN(0)/R1
328                CPD(3,II)=CPD(3,II)+SN(3)
329
330           2050 GOTO 7500
331
332           2080 CONTINUE
333
334                IF(SBA.EQ.0)GOTO 3000
335                IF(SAB.EQ.0)NUC=0
336
337                N=N+1
338                GOTO 2030
339
340           C    ****************************************************************
341           C          ALGORITMO EPSILON
342           C    ****************************************************************
343           7500 DO 399 VC=0,NUC
344                IF(IBA(VC,II).EQ.1)THEN
345                BAB=BAB+1
346                IF(VC.NE.0)ABA=ABA+1
347                GOTO 399
348                ENDIF
349                IF(ICMD(VC,II).EQ.0)GOTO 6604
350                IF(VA.EQ.1.AND.N.EQ.1.OR.VA.EQ.2.AND.N.EQ.0)THEN
351                ER=CPD(VC,II)
352                EPD(VC,II,1)=CPD(VC,II)
353                GOTO 399
354                ENDIF
355                EMD(VC,II)=EMD(VC,II)+1
356                IF(EMD(VC,II).GT.(ICMD(VC,II)+1))EMD(VC,II)=ICMD(VC,II)+1
357                EMA=EMD(VC,II)
358                IF(EMA.GT.EMM)THEN
359                PRINT*,'DIMENSOES INSUFICIENTES'
360                STOP
361                ENDIF
362                EDD(VC,II,1)=CPD(VC,II)
363                DO 392 J=2,EMA
364                EB=0.000
365                IF(J.NE.2)EB=EPD(VC,II,J-2)
366                ES=EDD(VC,II,J-1)-EPD(VC,II,J-1)
367                IF(DABS(ES/EPD(VC,II,J-1)).LT.VTE)THEN
368                WRITE(13,*)'EPSILON NAO PODE CONTINUAR',II,VC
369                ICMD(VC,II)=0
370                GOTO 6604
371                ENDIF
372                IF(DABS(ES).LT.EZE)ES=EZE
373                EDD(VC,II,J)=EB+1.000/ES
374           392  CONTINUE
375                EL=EMA
376                IF(2*(EMA/2).EQ.EMA)EL=EMA-1
377                ER=EDD(VC,II,EL)
378                IF(EMA.EQ.2)GOTO 396
```

```
379                EPRD(VC,II)=EPD(VC,II,EL-2)
380                IF(DABS(EPRD(VC,II)).LT.EZE)GOTO 394
381                EPRD(VC,II)=DABS((EPRD(VC,II)-ER)/(EPRD(VC,II)+DF(VC,II)))
382                GOTO 396
383           394  EPRD(VC,II)=DABS(ER+DF(VC,II))
384           396  DO 398 J=1,EMA
385                EPD(VC,II,J)=EDD(VC,II,J)
386           398  CONTINUE
387                S(II,VC)=(ER+DF(VC,II))*W(II)
388                IF(EPRD(VC,II).LT.PREPE(VC))THEN
389                BAB=BAB+1
390                IF(VC.NE.0)ABA=ABA+1
391                IBA(VC,II)=1
392                GOTO 399
393                ENDIF
394           6604 IF(DABS(SN(VC)/(CPD(VC,II)+DF(VC,II))).LT.PREP(VC))THEN
395                IBA(VC,II)=1
396                BAB=BAB+1
397                IF(VC.NE.0)ABA=ABA+1
398                S(II,VC)=(CPD(VC,II)+DF(VC,II))*W(II)
399                ENDIF
400           399  CONTINUE
401
402                 IF(BAB.EQ.(NUC+1))THEN
403                 BA(II)=1
404                 KK(II)=PU(II)-S(II,0)
405                 PNORM=PNORM+KK(II)*KK(II)
406                   RPNORM=RPNORM+KK(II)*KK(II)/W(II)/W(II)
407                 ELSE
408                 SBA=1
409                 IF(ABA.NE.NUC)SAB=1
410                 ENDIF
411                IF(VA.EQ.1)GOTO 2080
412                IF(VA.EQ.2)GOTO 1180
413
414           3000 COV=1
415                JA=1
416                IF(NAOP.EQ.0)GOTO 3002
417
418                PRINT*,' '
419                WRITE(13,*)' '
420                PRINT*,'PARAMETROS: ',(V(I),I=1,SI)
421                WRITE(13,*)'PARAMETROS: ',(V(I),I=1,SI)
422                WRITE (5,2004) (V(I),I=1,SI)
423
424           3002 DO 4030 I=1,SI
425                IF(SOPOT.EQ.1)GOTO 4020
426                VC=SI+1-I
427                DO 4010 J=1,SI
428                DAS(J,1)=S(J,VC)+2.0D0*DSQRT(V(I))
429           4010 CONTINUE
430           4020 IF(DABS(KK(I)/PU(I)).GT.PREPOL)COV=0
431                IF(DABS(KK(I)/PU(I)).GT.PREPOM)JA=0
432           4030 CONTINUE
433
434                IF(NAOP.EQ.1)THEN
435                   IF(JA.EQ.1)THEN
436                   PRINT*,'APROXIMACAO MENOR QUE PREPOM'
437                    WRITE(13,*)'APROXIMACAO MENOR QUE PREPOM'
438                   ENDIF
439                   IF(COV.EQ.1)THEN
440                   PRINT*,'APROXIMACAO MENOR QUE PREPOM/10'
441                   WRITE(13,*)'APROXIMACAO MENOR QUE PREPOM/10'
```

```
                ENDIF
                PRINT*,'NUMERO DE AVALIACOES DA FUNCAO OBJECTIVO=',NAV
                WRITE(13,*)'NUMERO DE AVALIACOES DA FUNCAO OBJECTIVO=',NAV
                ENDIF

      C     ********************************************************
      C          CONTROLO DAS ITERACOES
      C     ********************************************************

            IF(LUZ.EQ.0)THEN

             LCON=0
            NLL=NLL+1

              PRINT*,'NUMERO DE ITERACOES =',NLL
              WRITE(13,*)'NUMERO DE ITERACOES =',NLL

                 IF(CASA.GT.10.0D10)THEN
                 PRINT*,'ABORTOU POR MATRIZ QUASE SINGULAR'
                 WRITE(13,*)'ABORTOU POR MATRIZ QUASE SINGULAR'
                 LULA=1
                 GOTO 8998
                 ENDIF
                 IF(NLL.GT.5*SI.AND.MCO.EQ.0)THEN
                    MCO=1
                 PRINT*,'ALGORITMO LENTO.ACABO'
                 READ*,I
                 IF(I.EQ.1)THEN

                 WRITE(13,*)'FORCADO A PARAR AS 5*SI ITERACOES'
               LULA=1
                 GOTO 8998
                 ENDIF
                 ENDIF
                 IF(NLL.GT.10*SI.AND.MCO.EQ.1)THEN
                   MCO=2
                 PRINT*,'ACABO'
                 READ*,I
                 IF(I.EQ.1)THEN

                 WRITE(13,*)'FORCADO A PARAR AS 10*SI ITERACOES'
                LULA=1
                 GOTO 8998
                 ENDIF

                 ENDIF

                 IF(NLL.GT.100)THEN
                 PRINT*,'ABORTOU POR NUM.DE ITER.'
                 WRITE(13,*)'ABORTOU POR NUM. DE ITER.'
                LULA=1
                 GOTO 8998
                 ENDIF

            FNORM=PNORM
            IF(NLL.EQ.1)FNORM1=RPNORM
            LUZ=1
            NAJP=0
            ICAL=1

            CALL INVERTE(SI,DAS,KK,SAS,UVU,VUV,IARQ)

            DO 5130 I=1,SI
```

```
505                V(I)=(SAS(I)+DSQRT(VIZ(I)))**2
506           5130 CONTINUE
507                SOPOT=1
508                DO 5005 I=1,SI
509                BN(I)=KK(I)
510           5005 CONTINUE
511
512                GOTO 1005
513
514                ENDIF
515
516                IF(PNORM.GE.FNORM)THEN
517
518                ARQ=10.0D0*ARQ
519                ICAL=0
520
521                CALL INVERTE(SI,DAS,BN,SAS,UVU,VUV,IARQ)
522
523                DO 5010 I=1,SI
524                V(I)=(SAS(I)+DSQRT(VIZ(I)))**2
525           5010 CONTINUE
526
527                IF(LCON.GT.3)THEN
528                PRINT*,'ABORTOU'
529                WRITE(13,*)'ABORTOU'
530                LULA=1
531                GOTO 8998
532                ENDIF
533
534                GOTO 1005
535
536                ENDIF
537
538                          RANGRAD=ANGRAD*DNORM*VNORM*0.0D0
539                SOPOT=0
540                DO 6010 I=1,SI
541                GRAD(I)=0.0D0
542                 RGRAD(I)=0.0D0
543                DO 6005 J=1,SI
544                GRAD(I)=GRAD(I)+BN(J)*DAS(J,I)
545                   RGRAD(I)=RGRAD(I)+BN(J)*DAS(J,I)/W(J)/W(J)
546           6005 CONTINUE
547                ANGRAD=ANGRAD+GRAD(I)*GRAD(I)
548                   RANGRAD=RANGRAD+RGRAD(I)*RGRAD(I)
549                DNORM=DNORM+SAS(I)*SAS(I)
550                VNORM=VNORM+V(I)
551           6010 CONTINUE
552                ANGRAD=DSQRT(ANGRAD)
553                  RANGRAD=DSQRT(RANGRAD)
554                 IF(NLL.EQ.1)ANGRAD1=RANGRAD
555                DNORM=DSQRT(DNORM)
556                VNORM=DSQRT(VNORM)
557                DTA=ETA/(1.0D0+DABS(PNORM))
558                JJ=1
559                IF((FNORM-PNORM).GE.ETA)JJ=0
560                IF(DNORM.GE.DSQRT(DTA)*(1.0D0+VNORM))JJ=0
561                IF(ANGRAD.GT.DTA**(1.0D0/3.0D0)*(1.0D0+FNORM))JJ=0
562
563                 IF(ANGRAD.LE.ETA)THEN
564                 PRINT*,'GRADIENTE MUITO PEQUENO'
565                 WRITE(13,*)'GRADIENTE MUITO PEQUENO'
566                 GOTO 8998
567                 ENDIF
```

```
568
569                IF(JJ.EQ.0)THEN
570
571                ARQ=.400*ARQ
572                NAOP=1
573
574                GOTO 1002
575
576                ENDIF
577
578                IF(CDV.EQ.1)GOTO 8998
579
580                  PRINT*,'O SISTEMA JA SATISFEZ AS CONDICOES DE CONV.VOU PESAR'
581                  WRITE(13,*)'SISTEMA SATISFEZ CONDICOES DE CONV.'
582
583                SW=0.0D0
584                DO 6015 I=1,SI
585                SW=SW+KK(I)*KK(I)
586           6015 CONTINUE
587                SW=DSQRT(SW)
588                DO 6020 I=1,SI
589                W(I)=DABS(KK(I))/SW
590           6020 CONTINUE
591                  ARQ=.400*ARQ
592                  NAOP=1
593
594                GOTO 1001
595
596           8998     WRITE(13,*)' '
597                      WRITE(13,*)'VECTORES DE DADOS'
598                WRITE (5,2009) (V(I),I=1,SI)
599                IF (CDV .EQ. 1) WRITE (5,2005)
600                WRITE (5,2006) INT(CASA), NAV
601                     DO 8999 J=1,SI
602                     WRITE(13,*)(UVU(I,J),I=1,SI)
603           8999      CONTINUE
604                    WRITE(13,*)' '
605                      WRITE(13,*)'VECTORES DE PARAMETRO'
606                      DO 9003 J=1,SI
607                      WRITE(13,*)(VUV(I,J),I=1,SI)
608           9003      CONTINUE
609                    WRITE(13,*)' '
610                      WRITE(13,*)'VALORES SINGULARES'
611                      DO 9005 J=1,SI
612                      WRITE(13,*)SIGMA(J)
613           9005      CONTINUE
614                WRITE (5,2007) (II(I),I=1,SI), (I,I=1,SI),
615               W                ((UVU(I,J),I=1,SI), SIGMA(J),
616               W                (VUV(I,J),I=1,SI),J=1,SI)
617                    WRITE(13,*)' '
618                     WRITE(13,*) 'PARAMETRO DE MARQUADT =',ARQ
619                     WRITE(13,*) 'ARMI=',ARMI
620                    WRITE(13,*)' '
621
622                   PRINT*,' '
623                   DO 9020 I=1,SI
624                   PIGMA=(DEEP/SIGMA(I))**2
625                   DO 9010 J=1,SI
626                   TUVU(I,J)=VUV(J,I)*PIGMA
627           9010  CONTINUE
628           9020  CONTINUE
629                 DO 9040 I=1,SI
630                 DO 9030 J=I,SI
```

```
      631                 SUVU(I,J)=0.000
      632                 DO 9025 IJL=1,SI
      633                 SUVU(I,J)=SUVU(I,J)+VUV(I,IJL)*TUVU(IJL,J)
      634           9025  CONTINUE
      635                  SUVU(I,J)=SUVU(I,J)*DSQRT(V(I)*V(J))
      636           9030  CONTINUE
      637           9040  CONTINUE
      638                 DO 9060 I=1,SI
      639                 DO 9050 J=I,SI
      640                 IF(I.EQ.J)THEN
      641                 DEV(I)=DSQRT(SUVU(I,J))
      642                 PRINT*,'DESVIO MED. QUADR. APROX. DO PAR. V(',I,') =',DEV(I)
      643                 WRITE(13,*)'DESVIO MED. QUA. APROX. DO PAR. V(',I,') =',DEV(I)
      644                 ELSE
      645                   PRINT*,'COVARIANCIA ENTRE V(',I,') E V(',J,') =',SUVU(I,J)
      646                 WRITE(13,*)'COVARIAN. ENTRE V(',I,') E V(',J,') =',SUVU(I,J)
      647                 SUVU(I,J)=SUVU(I,J)/DSQRT(SUVU(I,I))/DSQRT(SUVU(J,J))
      648                 PRINT*,'CORR. APROX. ENTRE V(',I,') E V(',J,') =',SUVU(I,J)
      649                 WRITE(13,*)'COEF. DE CORR. APROX. ENTRE V(',I,') E V(',J,')'
      650                 WRITE(13,*)SUVU(I,J)
      651                 ENDIF
      652           9050  CONTINUE
      653           9060  CONTINUE
      654                WRITE (5,2008) (I,I=1,SI), (DEV(I),I=1,SI)
      655                 WRITE(13,*)' '
      656
      657                 RETURN
      658           2004 FORMAT (T15,5F13.3)
      659           2005 FORMAT (///T10,'APROXIMACAO MENOR QUE PREPOM / 10')
      660           2006 FORMAT (T10,'CONDICAO DO JACOBIANO =',I4//
      661               F         T10,'NUMERO TOTAL DE AVALIACOES DA FUNCAO OBJEC',
      662               F         'TIVO =',I3)
      663           2007 FORMAT (///T26,'VECTORES DE DADOS',17X,'VALORES SINGULA',
      664               F         'RES',10X,'VECTORES DE PARAMETROS'/
      665               F         T11,5I9,19X,5('      V(',I1,')')//
      666               F         (T13,5F9.3,E16.2,2X,5F9.3/))
      667           2008 FORMAT (//T10,'DESVIOS MEDIOS QUADRATICOS APROXIMADOS D',
      668               F         'OS PARAMETROS'//
      669               F         T15,5('    V(',I1,')')/T15,5F8.2)
      670           2009 FORMAT (T15,5F13.3)
      671                 END
```

--VARIABLE MAP--(LO=M/A/R)

A=ARGLIST, C=CTRL OF DO, I=DATA INIT, R=READ, S=STORE, U=I/O UNIT, W=WRITE

-NAME-	--ADDRESS--	-BLOCK-	----PROPERTIES----	----TYPE----	----SIZE---	----REFERENCES-									
A	76458			DOUBLE	10000	4	172	188/S							
ABA	1071723			INTEGER		12	232/S	315/S	346	346/S	390	390/S	397	397/S	402
AFE	1071653			INTEGER		12	120/S	124/S	192/C	203/C					
ANGRAD	1074208			DOUBLE		538/S	547	547/S	552/A	552/S	561	563			
ANGRAD1	473348	/P/		DOUBLE		14	554/S								
ARMA	168	/Q/		DOUBLE		19									
ARMI	143	/Q/		DOUBLE		19	619/W								
ARQ	203	/Q/		DOUBLE		19	28/S	518	518/S	571	571/S	591	591/S	618/W	
ASI	1071753			DOUBLE		23/S	39/A								
B	643	/P/		DOUBLE	10000	14	149/S	173	173/S	174	174/S	175	175/S	176	176/S
						188	189/S								
BA	73023			INTEGER	5	4	12	72/S	196	207	228	310	403/S		
BAB	1071718			INTEGER		12	231/S	314/S	345	345/S	389	389/S	396	396/S	402
BN	570633			DOUBLE	5	4	509/S	521/A	544	545					
CAP	1073368			DOUBLE		230/S	237	251	254	260	263	266	309/S	317	321
						324	327								
CASA	228	/Q/		DOUBLE		19	24/S	459	600/A						

-NAME-	-ADDRESS-	-BLOCK-	-PROPERTIES-	-TYPE-	-SIZE-	-REFERENCES-									
CF	1072273			DOUBLE		68/S	113	113/S	138	139	140	141	142	237	295
CIPU	474013	/P/		DOUBLE	5	14	70	230	309						
COV	473503	/P/		INTEGER		12	14	414/S	430/S	439	578	599			
CPD	73073			DOUBLE	30	4	71/S	77/S	238	238/S	252	252/S	255	255/S	261
						261/S	264	264/S	267	267/S	318	318/S	322	322/S	323
						325/S	328	328/S	351	352	362	394/A	394	398	399
CT	473513	/P/		DOUBLE	5	14	70								
CU	263	/P/		DOUBLE	5	14	70								
DAS	727433			DOUBLE	25	4	428/S	502/A	521/A	544	545				
DCU	74313			DOUBLE	5	4	30/S	199	213						
DEEP	474153	/P/		DOUBLE		14	624	624							
DEV	567173			DOUBLE	5	4	641/S	642/W	643/W	654/W					
DF	1067633			DOUBLE	30	4	70/S	77/S	83	83/S	84	84/S	381	383/A	387
						394	398								
DNORM	1074163			DOUBLE		538/S	549	549/S	555/A	555/S	560				
DU	148	/P/		DOUBLE	5	14									
D1	1072463			DOUBLE		126/S	127	142							
D2	1072503			DOUBLE		127/S	130	135	260	260					
D3	1072523			DOUBLE		128/S	129	130	136	157					
D4	1072543			DOUBLE		129/S	139								
D5	1072563			DOUBLE		130/S	133	134	137						
E8	1073773			DOUBLE		364/S	365/S	373							
EDD	732033			DOUBLE	3000	4	362/S	366	373/S	377	385				
EL	1071743			INTEGER		12	375/S	376/S	377	379					
EMA	1071733			INTEGER		12	357/S	358	363/C	375	376	376	376	376	378
						384/C									
EMD	567313			INTEGER	30	4	12	73/S	79/S	355	355/S	356	356/S	357	
EMM	474003	/P/		INTEGER		12	14	358							
EPD	571633			DOUBLE	3000	4	352/S	365	366	367/A	379	385/S			
EPRD	567673			DOUBLE	30	4	74/S	80/S	379/S	380/A	381/A	381	381/A	381	381/S
						383/S	388								
ER	1073743			DOUBLE		351/S	377/S	391	383/A	387	387				
ES	1074013			DOUBLE		366/S	367/A	372/A	372/S	373					
ETA	1072103			DOUBLE		43/S	46	46/S	48	48/S	557	559	563		
EZE	473793	/P/		DOUBLE		14	74	80	372	372	380				
FNORM	1074073			DOUBLE		496/S	516	559	559	561					
FNORM1	471263	/P/		DOUBLE		14	497/S								
GRAD	76013			DOUBLE	5	4	541/S	544	544/S	547	547				
H	71723			DOUBLE	6	4	95/S	96/S	97/S	98/S	99/S	100/S	193	204	
HH	1073253			DOUBLE		208/S	209/A	215	312/S	313	324				
H1	43	/A/		DOUBLE		18	64/S	95	97	99	100	190	285	285	287
H2	63	/A/		DOUBLE		18	93/S	96	97	98	99	190			
I	1072023			INTEGER		29/C	30	30	30	36/C	37	38	39	40	42
						44/C	45	45	45	46	46	69/C	70	70	72
						70	71	72	72	73	74	75	77	77	78
						79	80	81	83	83	84	84	171/C	172	173
						173	174	174	175	175	176	176	187/C	188	189
						189	190	190	420	421	422	424/C	426	428	428
						430	430	431	431	468/R	469	479/R	480	504/C	505
						505	505	508/C	509	509	523/C	524	524	524	543/C
						541	542	544	544	544	545	545	545	547	547
						548	548	549	549	550	584/C	585	585	588/C	589
						589	598	602	602	607	607	614	614/C	614/W	614
						614	614/C	614	623/C	624	625	626	629/C	630/C	631
						633	633	633	635	635	635	638/C	639/C	640	641
						641	642/W	642	643/W	643	645/W	645	646/W	646	647
						647	647	647	648/W	648	649/W	650	654/C	654/W	655
IARQ	553	/P/		INTEGER		14	502/A	521/A							
IBA	571253			INTEGER	30	4	72/S	78/S	236	236	250	253	253	259	262
						265	316	316	320	323	326	344	391/S	395/S	
ICAL	133	/Q/		INTEGER		19	500/S	519/S							
ICMD	1070573			INTEGER	30	4	75/S	81/S	349	356	356	356	369/S		
ICMI	473753	/P/		INTEGER		14	75	81							

-NAME-	--ADDRESS--	-BLOCK-	----PROPERTIES----	----TYPE----	SIZE	---REFERENCES-									
II	1073158			INTEGER		195/C	196	197	198	199	199	199	206/C	207	208
						210	213	214	214	215	215	226/C	228	230	233
						234	235	235	236	236	238	238	240	241	242
						243	244	245	246	247	248	248	248	248	248
						248	249	249	250	252	252	253	253	255	255
						256	257	258	258	259	261	261	262	264	264
						265	267	267	308/C	309	310	311	312	316	315
						318	318	320	322	322	323	325	325	326	328
						328	344	349	351	352	352	355	355	356	356
						356	356	357	362	362	365	366	366	367	368/M
						369	373	377	379	379	380	381	381	381	381
						383	383	385	385	387	387	387	388	391	394
						394	395	398	398	398	398	403	404	404	404
						405	405	406	406	406	406				
IJL	1074478			INTEGER		632/C	633	633							
II	474208	/P/		INTEGER	5	14	614/M								
J	1072148			INTEGER		51/C	52	52	76/C	77	77	78	79	80	81
						164/C	165	167	169	171/C	172	173	173	176	176
						180/C	182	184	187/C	188	188	189	190	190	363/C
						365	365	366	366	367	373	384/C	385	385	427/C
						428	428	543/C	544	544	545	545	545	545	601/C
						602	602	606/C	607	607	611/C	612	614	614/C	614
						614	614	625/C	626	626	630/C	631	633	633	633
						635	635	635	639/C	640	641	645/M	645	646/M	645
						647	647	647	647	648/M	648	649/M	650		
JA	1074048			INTEGER		415/S	431/S	435							
JJ	1074268			INTEGER		558/S	559/S	560/S	561/S	569					
J1	1073018			INTEGER		165/S	174	174	175	175					
KK	473368	/P/		DOUBLE	5	10	14	404/S	405	405	406	406	430/A	431/A	502/A
						509	585	585	589/A						
KP	08	/P/		DOUBLE		10	14	67							
K1	08	/A/		DOUBLE		10	18	66/S	103	115	117	130	131	141	237
						237	286	286	296						
K2	28	/A/		DOUBLE		10	18	101/S	103	116	117	130	132	140	237
LA	108	/A/		DOUBLE		10	18	106/S	108	113	114	115	116	117	137
LCON	08	/Q/		INTEGER		19	453/S	527							
LULA	474178	/P/		INTEGER		14	462/S	472/S	483/S	492/S	530/S				
LUZ	1072138			INTEGER		50/S	451	498/S							
MAL	74178			DOUBLE	5	4	10	138/S	139/S	140/S	141/S	142/S	251	254	263
						263	266								
MALO	1071558			DOUBLE		10	299/S	317							
MAL1	1071578			DOUBLE		10	301/S	303	321						
MAL2	1071618			DOUBLE		10	302/S	324							
MAL3	1071638			DOUBLE		10	303/S	327							
MCO	1072018			INTEGER		27/S	465	466/S	476	477/S					
MLA	1072358			INTEGER		109/S	111/S	166	176	181					
M1	1071318			DOUBLE		10	153/S	251	251	254	254	285/S	298		
M10	1071538			DOUBLE		10	162/S	263	266						
M2	1071338			DOUBLE		10	154/S	251	254	263	266	286/S	301		
M3	1071358			DOUBLE		10	155/S	251	254	263	266	287/S	302		
M4	1071378			DOUBLE		10	156/S	251	254	263	266	288/S	303		
M5	1071418			DOUBLE		10	157/S	260	296/S	299	301	302			
M6	1071438			DOUBLE		10	158/S	260	297/S	298	302				
M7	1071458			DOUBLE		10	159/S	260	298/S	311/A	312/A				
M8	1071478			DOUBLE		10	160/S	260							
M9	1071518			DOUBLE		10	161/S	260							
N	1072768			INTEGER		148/S	151	164/C	167	169	171/C	276	276/S	294/S	295
						297	297	301	337	337/S	350	350			
NADP	1072068			INTEGER		33/S	416	434	499/S	572/S	592/S				
NAV	1071778			INTEGER		25/S	57	57/S	443/M	444/M	600/M				
NII	1073028			INTEGER		167/S	169/S	171/C	182/S	184/S	187/C				
NLL	1072008			INTEGER		26/S	454	454/S	456/M	457/M	465	476	489	497	554
NS	1072778			INTEGER		151/S	153	154	155	156	157	158	159	160	161

-NAME-	--ADDRESS--	BLOCK	PROPERTIES	TYPE	SIZE	REFERENCES
						182 180/C 182 184 187/C 190
NUC	1072208			INTEGER		59/S 61/S 76/C 119 152 191 239 274/S 300 319
						335/S 343/C 402 402 409
N1U	471838	/P/		DOUBLE	5	10 14 30 198/A 210 311/A
N2U	408	/P/		DOUBLE	5	10 14 30 197/A 208 312/A
N3	1071278			DOUBLE		10 190/S 193 204
OTA	1074248			DOUBLE		557/S 560/A 561
PARF	1072258			DOUBLE		67/S 68 70
PIGMA	1074428			DOUBLE		624/S 626
PNORM	1072168			DOUBLE		55/S 405 405/S 496 516 557/A 559
PPU	75338			DOUBLE	5	4 40/S 45
PREDER	628	/P/		DOUBLE		14 37 38
PREP	571118			DOUBLE	6	4 35/S 38/S 394
PREPE	570758			DOUBLE	6	4 34/S 37/S 388
PREPOC	608	/P/		DOUBLE		14 34 35
PREPOL	1072048			DOUBLE		32/S 430
PREPOM	568	/P/		DOUBLE		14 32 48 48 431
PU	472268	/P/		DOUBLE	5	14 40 45/S 46 46 404 430/A 431/A
QVC	1073138			DOUBLE		194/S 197/A 198/A 205/S 208 210
RANGRAD	471308	/P/		DOUBLE		14 538/S 548 548/S 553/A 553/S 554
RGRAD	567058			DOUBLE	5	4 542/S 545 545/S 548 548
RHH	1073178			DOUBLE		197/S 199 199 199 209/S 212 213 213
RPNORM	471248	/P/		DOUBLE		14 56/S 406 406/S 497
RYY	1073218			DOUBLE		198/S 199 199 211/S 212 213
R1	1072218			DOUBLE		63/S 66 66 67 83 84 126 126 126 126
						127 266 286 286 286 286 286 288 327
R2	1072238			DOUBLE		65/S 66 66 66 66 101 101 126 126 126
						127 128 128 128 128 129 286 286 288
R3	1072338			DOUBLE		94/S 101 101 101 101 128 128 128 129
S	72068			DOUBLE	30	4 387/S 398/S 404 428
SAB	1071738			INTEGER		12 224/S 274 306/S 335 409/S
SAS	730258			DOUBLE	5	4 502/A 505 505 521/A 524 524 549 549
SBA	1071678			INTEGER		12 223/S 273 305/S 334 408/S
SI	538	/P/		INTEGER		12 14 23 29/C 36/C 44/C 51/C 61 69/C 193/C
						206/C 226/C 308/C 420 421 422 424/C 426 427/C 463
						476 502/A 504/C 508/C 521/A 523/C 540/C 543/C 584/C 587/C
						598 601/C 602 606/C 607 611/C 614 614/C 614 614/C
						614/C 623/C 625/C 629/C 630/C 632/C 638/C 639/C 654/C 654
SIGMA	18	/Q/		DOUBLE	5	4 19 612/W 614/W 624
SN	74038			DOUBLE	6	4 237/S 238 251/S 252 254/S 255 260/S 261 263
						263/S 264 266 266/S 267 317/S 318 321/S 322 324/S
						325 327 327/S 328 394/A
SOPOT	528	/P/		INTEGER		12 14 58 425 507/S 539/S
SUVU	75378			DOUBLE	25	4 631/S 633 633/S 635 635/S 641/A 645/W 646/W 647
						647/A 647/A 647/S 648/W 650/W
SW	1074278			DOUBLE		583/S 585 585/S 587/A 587/S 589
T	472408	/P/		DOUBLE	30	14 199 199/S 214 214/S 233 234 235/S 235/S 240
						241 242 248/S 248/S 248/S 256 258/S
TF	1073338			DOUBLE		213/S 214 215
TUVU	74558			DOUBLE	25	4 626/S 633
UVU	730378			DOUBLE	25	4 502/A 521/A 602/W 614/W
V	28	/P/		DOUBLE	5	14 52 63 64 65 93 93 94 420/W 421/W
						422/W 428/A 505/S 524/S 550 598/W 635/A 635/A
VA	548	/P/		INTEGER		12 14 83 84 87 350 350 411 412
VC	1071568			INTEGER		12 192/C 193 199 199 203/C 204 214 214 215
						215 343/C 344 346 349 351 352 352 355 358
						356 356 356 356 357 362 362 365 366 369
						367 368/W 369 373 377 379 379 380 381 381
						381 381 383 383 385 385 387 387 388 388
						390 391 394 394 394 394 395 397 398 398
						398 426/S 428
VTZ	74438			DOUBLE	5	4 52/S 505/A 524/A
VNORM	1074148			DOUBLE		538/S 550 550/S 556/A 556/S 560

-NAME-	--ADDRESS-	-BLOCK-----	PROPERTIES------	-TYPE---------	SIZE-	--REFERENCES-									
VTE	47+138	/P/		DOUBLE		14	367								
VUV	731218			DOUBLE	25	4	502/A	521/A	607/M	614/M	625	633			
V1	1072368			DOUBLE		114/S	176								
V10	1072728			DOUBLE		136/S	160								
V11	1072748			DOUBLE		137/S	159								
V2	1072408			DOUBLE		115/S	131	133	135	154	173				
V3	1072428			DOUBLE		116/S	132	134	136	155	175				
V4	1072448			DOUBLE		117/S	156	174							
V5	1072608			DOUBLE		131/S	153								
V6	1072628			DOUBLE		132/S	162								
V7	1072648			DOUBLE		133/S	157								
V8	1072668			DOUBLE		134/S	161								
V9	1072708			DOUBLE		135/S	158								
W	1071158			DOUBLE	5	4	39/S	45	387	398	406	406	545	545	569/S
W1	1073408			DOUBLE		233/S	237	260	266	266					
W2	1073428			DOUBLE		234/S	237	251	260	266					
W3	1073448			DOUBLE		240/S	251	260	266						
W4	1073468			DOUBLE		241/S	251	260							
W5	1073508			DOUBLE		242/S	251	260	266						
W6	1073648			DOUBLE		256/S	260	266							
X	1073048			DOUBLE		172/S	173	174	175	176	186/S	199	213		
Y	471328	/P/		DOUBLE	30	14	215	215/S	243	244	245	246	247	248/S	248/S
						248/S	249/S	249/S	257	258/S					
YH	1073718			DOUBLE		313/S	317	321	327						
YHY	1073318			DOUBLE		212/S	213	215							
YY	1073278			DOUBLE		210/S	211/A	215	311/S	313	324	324			
ZVC	1073118			DOUBLE		193/S	194	194	204/S	205	205	215			
Z1	1073528			DOUBLE		243/S	253	253							
Z2	1073548			DOUBLE		244/S	254	253							
Z3	1073568			DOUBLE		245/S	254	253							
Z4	1073608			DOUBLE		246/S	254								
Z5	1073628			DOUBLE		247/S	254	253							
Z6	1073668			DOUBLE		257/S	253								

--PROCEDURES--(LD=M/A/R)

D=DEF LINE OF STMT FUNC
A=ACTUAL ARGUMENT

-NAME-	----TYPE------	ARGS-	----CLASS-----	-REFERENCES-											
ALFA		0	SUBROUTINE	104											
DABS	DOUBLE	1	INTRINSIC	367	372	380	381	383	394	430	431	557	589		
DSQRT	DOUBLE	1	INTRINSIC	39	197	198	209	211	311	312	428	505	524	552	553	555
				556	560	587	635	641	647	647						
INT	GENERIC	1	INTRINSIC	600/M											
INVERTE		7	SUBROUTINE	502	521										

--STATEMENT LABELS--(LD=M/A/R)

A=ASSIGN STMT, D=DO STMT,
R=READ, W=WRITE

-LABEL-	-ADDRESS-	--PROPERTIES-----	DEF-	-REFERENCES-			
392		INACTIVE DO-TERM	374	363/D			
394	40118		383	380			
396	40258		384	378	382		
398		INACTIVE DO-TERM	386	384/D			
399	41778	DO-TERM	400	343/D	347	353	392
999		INACTIVE DO-TERM	31	29/D			
1001	1368		43	594			
1002	2208		50	574			
1003		INACTIVE DO-TERM	47	44/D			
1004		INACTIVE DO-TERM	53	51/D			
1005	2418		55	512	534		
1006		INACTIVE DO-TERM	41	36/D			
1010		INACTIVE DO-TERM	85	69/D			
1020		INACTIVE DO-TERM	82	76/D			

CEEUP (I.N.I.C.) PORTO BIBLIOTECA

-LABEL-	--ADDRESS--	---PROPERTIES---	----DEF--	--REFERENCES-					
1031	11628		148	121					
1040	11708		151	277					
1070	INACTIVE	DO-TERM	177	171/D					
1080	INACTIVE	DO-TERM	178	164/D					
1090	16748	DO-TERM	200	195/D	196				
1100	INACTIVE	DO-TERM	201	192/D					
1110	21218	DO-TERM	216	206/D	207				
1120	INACTIVE	DO-TERM	217	203/D					
1130	INACTIVE	DO-TERM	219	187/D					
1139	22518		239	236					
1140	INACTIVE	DO-TERM	221	180/D					
1141	24268		253	250					
1142	25068		256	253					
1143	25218		262	259					
1144	27058		265	262					
1150	27778		269	239	265				
1180	30008	DO-TERM	271	226/D	228	412			
1200	30168		279	273					
2000	30178		285	87					
2004	65338	FORMAT	658	422/W					
2005	65368	FORMAT	659	599/W					
2006	65448	FORMAT	660	600/W					
2007	65578	FORMAT	663	614/W					
2008	65778	FORMAT	667	654/W					
2009	66138	FORMAT	670	598/W					
2030	30778		296	338					
2040	31558		305	300					
2050	34248		330	319	326				
2080	34258	DO-TERM	332	308/D	310	411			
2139	32778		319	316					
2141	33278		323	320					
2142	33658		326	323					
3000	43178		414	279	334				
3002	43538		424	416					
4010	INACTIVE	DO-TERM	429	427/D					
4020	44238		430	425					
4030	INACTIVE	DO-TERM	432	424/D					
5005	INACTIVE	DO-TERM	510	508/D					
5010	INACTIVE	DO-TERM	525	523/D					
5130	INACTIVE	DO-TERM	506	504/D					
6005	INACTIVE	DO-TERM	546	543/D					
6010	INACTIVE	DO-TERM	551	540/D					
6015	INACTIVE	DO-TERM	586	584/D					
6020	INACTIVE	DO-TERM	590	589/D					
6604	41148		394	349	370				
7500	34438		343	269	330				
8998	54738		596	463	473	484	493	531	556	578
8999	INACTIVE	DO-TERM	603	601/D					
9003	INACTIVE	DO-TERM	608	606/D					
9005	INACTIVE	DO-TERM	613	611/D					
9010	INACTIVE	DO-TERM	627	625/D					
9020	INACTIVE	DO-TERM	628	623/D					
9025	INACTIVE	DO-TERM	634	632/D					
9030	INACTIVE	DO-TERM	636	630/D					
9040	INACTIVE	DO-TERM	637	629/D					
9050	INACTIVE	DO-TERM	652	639/D					
9060	INACTIVE	DO-TERM	653	638/D					

--ENTRY POINTS--(LO=M/A/R) D=DEFINITION, R=RETURN

-NAME---	ADDRESS--	ARGS------	REFERENCES-
CALCULA	48	0	2/D 657/R

--DO LOOPS--(LO=M/A/R)

-LABEL--	ADDRESS----	PROPERTIES----------	INDEX---	FROM-----	TO
999	*NO REFS*		I	29	31
1006	*NO REFS*	XREF	I	36	41
1003	*NO REFS*		I	44	47
1004	*NO REFS*		J	51	53
1010	*NO REFS*	OUTER	I	69	85
1020	*NO REFS*		J	76	82
1080	*NO REFS*	OUTER	J	164	178
1070	*NO REFS*		I	171	177
1140	*NO REFS*	XREF/OUTER	J	180	221
1130	*NO REFS*	XREF/OUTER	I	187	219
1100	*NO REFS*	XREF/OUTER	VC	192	201
1090	*NO REFS*	XREF	II	195	200
1120	*NO REFS*	XREF/OUTER	VC	203	217
1110	*NO REFS*	XREF	II	206	216
1180	*NO REFS*	EXIT	II	226	271
2080	*NO REFS*	XREF/EXIT	II	308	332
399	*NO REFS*	XREF/OUTER	VC	343	400
392	*NO REFS*	XREF/EXIT	J	363	374
398	*NO REFS*		J	384	386
4030	*NO REFS*	XREF/OUTER	I	424	432
4010	*NO REFS*	XREF	J	427	429
5130	*NO REFS*	XREF	I	504	506
5005	*NO REFS*		I	508	510
5010	*NO REFS*	XREF	I	523	525
6010	*NO REFS*	OUTER	I	540	551
6005	*NO REFS*		J	543	546
6015	*NO REFS*		I	584	586
6020	*NO REFS*		I	588	590
8999	*NO REFS*	XREF	J	601	603
9003	*NO REFS*	XREF	J	606	608
9005	*NO REFS*	XREF	J	611	613
I/O	*NO REFS*	XREF	I	614	614
I/O	*NO REFS*	XREF/OUTER	J	614	614
I/O	*NO REFS*	XREF	I	614	614
9020	*NO REFS*	OUTER	I	623	628
9010	*NO REFS*		J	625	627
9040	*NO REFS*	XREF/OUTER	I	629	637
9030	*NO REFS*	XREF/OUTER	J	630	636
9025	*NO REFS*		IJL	632	634
9060	*NO REFS*	XREF/OUTER	I	638	653
9050	*NO REFS*	XREF	J	639	652
I/O	*NO REFS*	XREF	I	654	654

--COMMON+EQUIVALENCE--(LO=M/A/R)

/P/ LEVEL = 1, SIZE = 20245 WORDS CM

KP<1-2>	V<3-12>	DU<13-22>	CU<23-32>	N2U<33-42>	SOPOT<43>
SI<44>	VA<45>	IARQ<46>	PREPOM<47-48>	PREPOC<49-50>	PREDER<51-52>
B<53-20052>	RPNORM<20053-20054>	FNORMI<20055-20056>	RANGRAD<20057-20058>	Y<20059-20118>	PU<20119-20128>
T<20129-20188>	ANGRAD1<20189-20190>	KK<20191-20200>	COV<20201>	CT<20202-20211>	
N1U<20212-20221>	ICMI<20222>	EZE<20223-20224>	EMM<20225>	CIPU<20226-20235>	

```
   VTE<20236-20237>      DEEP<20239-20239>      LULA<20240>           I1<20241-20245>

 /A/       LEVEL = 1, SIZE = 10 WORDS CM
   K1<1-2>               K2<3-4>               H1<5-6>               H2<7-8>               LA<9-10>

 /C/       LEVEL = 1, SIZE = 20 WORDS CM
   LCON<1>               SIGMA<2-11>           ICAL<12>              ARMI<13-14>           ARMA<15-16>           G<17-18>
   CASA<19-20>


--I/O UNITS--(LO=M/A/R)                                                                   R=READ, W=WRITE
 -NAME--- PROPERTIES-------------REFERENCES-

  TAPE13  FMT/SEQ                368/W  419/W  421/W  437/W  441/W  444/W  457/W  461/W  471/W  482/W  491/W  529/W  565/W  581/W
                                 595/W  597/W  602/W  604/W  605/W  607/W  609/W  610/W  612/W  617/W  618/W  619/W  62 /W  643/W
                                 646/W  649/W  650/W  655/W
  TAPE5   FMT/SEQ                422/W  598/W  599/W  600/W  614/W  654/W


--STATISTICS--

  PROGRAM-UNIT LENGTH         1074548 =  36652
  CM LABELLED COMMON LENGTH    474638 =  20275
  CM STORAGE USED              714008 =  29440
  COMPILE TIME                 9.569 SECONDS
```

```
      SUBROUTINE ALFA
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
      DOUBLE PRECISION NQN,MQM,IE,ID,IN,MAIS,MEN,ME,MD,K1,K2,LA
      COMMON/A/K1,K2,H1,H2,LA

C     ******************************************************************************
C        CALCULA O PARAMETRO DE VAN DAM PARA SERIES INICIALMENTE DIVERGENTES
C     ******************************************************************************

        MQM=1.0D0-K1-K2+K1*K2
        NQN=1.0D0
      IF (MQM.LT.2.0D0) THEN
      LA=1.0D0
      RETURN
      ENDIF

      MER=1
      IE=0.0D0
      ID=.25D0
      MAIS=-500.0D0
      MEN=500.0D0

 6010 PE=IE
      PID=ID

 6020 IN=(PID-PE)/3.0D0
      ME=PE+IN
      MD=PID-IN
      FE=MER*(1.0D0-K1*ME**H1-K2*ME**H2+K1*K2*ME**(H2-H1))
      FD=MER*(1.0D0-K1*MD**H1-K2*MD**H2+K1*K2*MD**(H2-H1))
      IF (FE.GT.FD) THEN
      PID=MD
      ELSE
      PE=ME
      ENDIF
      IF(DABS((FE-FD)*2.0D0/(FE+FD)).GT..01D0.OR.IN.GT..1D0)GOTO 6020

      IF (MER.EQ.-1) GO TO 6030

      QMA=(FD+FE)/2.0D0
      MER=-1
      IF (QMA.GT.MAIS) MAIS=QMA
      GO TO 6010

 6030 QMI=-(FD+FE)/2.0D0
      IF (QMI.LT.MEN) MEN=QMI
      IF (ID.EQ.1.0D0) GO TO 6040
      IE=IE+.25D0
      ID=ID+.25D0
      MER=1
      GO TO 6010

 6040 IF (MAIS.GT.MQM) MAIS=MQM
      IF (MEN.LT.NQN) MEN=NQN

      IF (MAIS.LT.2.0D0) THEN
      LA=1.0D0
      ELSE
      LA=2.0D0/(MAIS+MEN)
      PRINT*,'ALFA =',LA
      ENDIF
```

```
     64                    RETURN
     65                    END
```

--VARIABLE MAP--(LO=M/A/R)

A=ARGLIST, C=CTRL OF DO, I=DATA INIT, R=READ, S=STORE, U=I/O UNIT, W=WRITE

-NAME-	--ADDRESS--	-BLOCK-	-PROPERTIES-	-TYPE-	-SIZE-	-REFERENCES-						
FD	6048			DOUBLE	31/S	32	37	37	41	41	46	46
FE	6028			DOUBLE	30/S	32	37/A	37	37/A	37	41	46
H1	48	/A/		DOUBLE	5	30	30	31	31			
H2	68	/A/		DOUBLE	5	30	30	30	31	31	31	
ID	5618			DOUBLE	4	20/S	25	48	50	50/S		
IE	5578			DOUBLE	4	19/S	24	49	49/S			
IN	5638			DOUBLE	4	27/S	28	29	37			
K1	08	/A/		DOUBLE	4	5	11	11	30	30	31	31
K2	28	/A/		DOUBLE	4	5	11	11	30	30	31	31
LA	103	/A/		DOUBLE	4	5	14/S	58/S	60/S	61/W		
MAIS	5658			DOUBLE	4	21/S	43	43/S	54	54/S	57	60 60
MD	5738			DOUBLE	4	29/S	31	31	31	33		
ME	5718			DOUBLE	4	28/S	30	30	30	35		
MEN	5678			DOUBLE	4	22/S	47	47/S	55	55/S	60	
MER	5758			INTEGER	18/S	30	31	39	42/S	51/S		
MOM	5558			DOUBLE	4	11/S	13	54	54			
NON	5538			DOUBLE	4	12/S	55	55				
PE	5768			DOUBLE	24/S	27	28	35/S				
PID	5008			DOUBLE	25/S	27	27	29	33/S			
QMA	6068			DOUBLE	41/S	43	43					
QMI	6108			DOUBLE	46/S	47	47					

--PROCEDURES--(LO=M/A/R)

D=DEF LINE OF STMT FUNC
A=ACTUAL ARGUMENT

-NAME-	-TYPE-	-ARGS-	-CLASS-	-REFERENCES-
DABS	DOUBLE	1	INTRINSIC	37

--STATEMENT LABELS--(LO=M/A/R)

A=ASSIGN STMT, D=DO STMT, R=READ, W=WRITE

-LABEL-	--ADDRESS--	-PROPERTIES-	-DEF-	-REFERENCES-	
6010	668		24	44	52
6020	768		27	37	
6030	3648		46	39	
6040	4308		54	48	

--ENTRY POINTS--(LO=M/A/R)

D=DEFINITION, R=RETURN

-NAME-	--ADDRESS--	-ARGS-	-REFERENCES-		
ALFA	48	0	2/D	15/R	64/R

--COMMON+EQUIVALENCE--(LO=M/A/R)

/A/ LEVEL = 1, SIZE = 10 WORDS CM

<1<1-2> K2<3-4> H1<5-6> H2<7-8> LA<9-10>

--STATISTICS--

PROGRAM-UNIT LENGTH	6128 *	394
CM LABELLED COMMON LENGTH	128 *	10
CM STORAGE USED	614008 *	25344
COMPILE TIME	0.830 SECONDS	

```
      SUBROUTINE INVERTE (N,A,Y,C,U,V,IARQ)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
      DIMENSION A(5,5),U(5,5),V(5,5),SIGMA(5),WORK(5),
     +     Y(5),C(5),D(5),TIGMA(5)
      COMMON/Q/LCON,SIGMA,ICAL,ARMI,ARMA,ARQ,CASA
      NM=M*N

C  ***************************************************************************
C       RESOLVE O SISTEMA DE EQUACOES POR RECURSO A SUBROTINA SVD DE
C       DECOMPOSICAO EM VALORES SINGULARES E CONTROLA O PARAMETRO DE
C       MARQUARDT,ARQ.
C  ***************************************************************************

      IF(ICAL.EQ.0)GOTO 28

      QRA=ARQ
      ARQ=0.0D0

      CALL SVD(NM,M,N,A,SIGMA,.TRUE.,U,.TRUE.,V,IERR,WORK)

 28   SMAX=0.0D0
      SMIN=10.0D10
      DO 29 I=1,N
      TIGMA(I)=SIGMA(I)+ARQ/SIGMA(I)
      IF(TIGMA(I).GT.SMAX)SMAX=TIGMA(I)
      IF(TIGMA(I).LT.SMIN)SMIN=TIGMA(I)
      C(I)=0.0D0
 29   CONTINUE
      ACA=SMAX/SMIN

      IF(ICAL.EQ.1)THEN
          ICAL=0
           CASA=ACA

      PRINT*,'COND. JACOBIANO=',ACA
      WRITE(13,*)'COND. JACOBIANO=',ACA

      ARMI=SMIN*SMIN/10.0D0
      ARMA=SMAX*SMAX*100.0D0
      ARQ=QRA
      IF(ARQ.LT.ARMI)ARQ=ARMI
         IF(IARQ.EQ.1)THEN
         IARQ=0

         PRINT*,'VALOR PROPRIO MINIMO DA HESSEANA / 10 =',ARMI
         WRITE(13,*)'VALOR PROPRIO MINIMO DA HESSEANA / 10 =',ARMI
         PRINT*,'VALOR PROPRIO MAXIMO DA HESSEANA * 100 =',ARMA
         WRITE(13,*)'VALOR PROPRIO MAXIMO DA HESSEANA * 100 =',ARMA

         PRINT*,'VALOR PARTICULAR PARA O PARAMETRO DE MARQUARDT 4'
         READ*,I
         IF(I.EQ.1)THEN
         PRINT*,'QUAL4'
         READ*,ARQ
         ENDIF

         WRITE(13,*)' '
         WRITE(13,*)'VALOR INICIAL DO PARAMETRO DE MARQUARDT =',ARQ

         ENDIF
        GOTO 28
        ENDIF
```

```
 64
 65                IF(ARQ.GE.ARMA)THEN
 66                    IF(LCON.EQ.0)THEN
 67                    ARQ=ARMA
 68                    LCON=LCON+1
 69                    GOTO 28
 70                    ENDIF
 71                    IF(ARQ.GE.ARMA**5)THEN
 72                    IF(LCON.EQ.1)THEN
 73                    ARQ=ARMA**5
 74                    LCON=LCON+1
 75                    GOTO 28
 76                    ELSE
 77                    LCON=LCON+1
 78                    ENDIF
 79                    ENDIF
 80                DO 33 I=1,N
 81                TIGMA(I)=TIGMA(I)/ARMA
 82             33 CONTINUE
 83                ENDIF
 84
 85                IF(IERR.NE.0)PRINT*,'ERRO NA SUBROTINA SVD',IERR
 86
 87                DO 60 J=1,N
 88                D(J)=0.0D0
 89                DO 40 I=1,M
 90                D(J)=D(J)+U(I,J)*Y(I)
 91             40 CONTINUE
 92                D(J)=D(J)/TIGMA(J)
 93                DO 50 I=1,N
 94                C(I)=C(I)+D(J)*V(I,J)
 95             50 CONTINUE
 96             60 CONTINUE
 97
 98                RETURN
 99
100                END
```

--VARIABLE MAP--(LO=M/A/R) A=ARGLIST, C=CTRL OF DO, I=DATA INIT, R=READ, S=STORE, U=I/O UNIT, W=WRITE

-NAME-	-ADDRESS-	-BLOCK-	----PROPERTIES----	----TYPE----	SIZE	---REFERENCES-								
A	2	DUMMY-ARG		DOUBLE	25	2	4	20/A						
ACA	7488			DOUBLE		30/S	34	36/W	37/W					
ARMA	168	/Q/		DOUBLE		6	40/S	48/W	49/W	65	67	71	73	81
ARMI	148	/Q/		DOUBLE		6	39/S	42	42	46/W	47/W			
ARQ	208	/Q/		DOUBLE		6	17	18/S	25	41/S	42	42/S	56/R	59/W
						67/S	71	73/S						
C	4	DUMMY-ARG		DOUBLE	5	2	4	28/S	94	94/S				
CASA	228	/Q/		DOUBLE		6	34/S							
D	7048			DOUBLE	5	4	86/S	90	90/S	92	92/S	94		
I	7418			INTEGER		24/C	25	25	25	26	26	27	27	28
						53	80/C	81	81	89/C	90	90	93/C	94
						94								
IARQ	7	DUMMY-ARG		INTEGER		2	43	44/S						
ICAL	138	/Q/		INTEGER		6	19	32	33/S					
IERR	7348			INTEGER		20/A	85	85/W						
J	7468			INTEGER		87/C	88	90	90	90	92	92	92	94
LCON	88	/Q/		INTEGER		6	66	68	68/S	72	74	74/S	77	77/S
M	7308			INTEGER		7/S	20/A	89/C						
N	1	DUMMY-ARG		INTEGER		2	7	20/A	24/C	80/C	87/C	93/C		
NM	7318			INTEGER		7/S	20/A							
QRA	7328			DOUBLE		17/S	41							

```
 -NAME---ADDRESS--BLOCK-----PROPERTIES-------TYPE---------SIZE---REFERENCES-

  SIGMA       18  /Q/                        DOUBLE          5       4      6     20/A   25      25
  SMAX      7358                             DOUBLE                 22/S   26     26/S   30      40      40
  SMIN      7378                             DOUBLE                 23/S   27     27/S   30      39      39
  TIGMA     7168                             DOUBLE          5       4     25/S   26     26      27      27      81      81/S    92
  U            5   DUMMY-ARG                 DOUBLE         25       2      4     20/A   90
  V            6   DUMMY-ARG                 DOUBLE         25       2      4     20/A   94
  WORK      6728                             DOUBLE          5       4     20/A
  Y            3   DUMMY-ARG                 DOUBLE          5       2      4     90

--PROCEDURES--(LO=M/A/R)                                                    D=DEF LINE OF STMT FUNC
 -NAME----TYPE------ARGS----CLASS-----REFERENCES-                           A=ACTUAL ARGUMENT

  SVD                 11    SUBROUTINE   20

--STATEMENT LABELS--(LO=M/A/R)                                              A=ASSIGN STMT, D=DO STMT,
 -LABEL--ADDRESS---PROPERTIES-----DEF--REFERENCES-                          R=READ, W=WRITE

     28      418                     22      15      62      69      75
     29    INACTIVE  DO-TERM         29      24/D
     33    INACTIVE  DO-TERM         82      80/D
     40    INACTIVE  DO-TERM         91      89/D
     50    INACTIVE  DO-TERM         95      93/D
     60    INACTIVE  DO-TERM         96      87/D

--ENTRY POINTS--(LO=M/A/R)                                                  D=DEFINITION, R=RETURN
 -NAME---ADDRESS--ARGS------REFERENCES-

  INVERTE     58      7          2/D   98/R

--DO LOOPS--(LO=M/A/R)
 -LABEL--ADDRESS----PROPERTIES--------------INDEX---FROM-----TO

     29   *NO REFS*                         I          24      29
     33   *NO REFS*                         I          80      82
     60   *NO REFS*  OUTER                  J          87      96
     40   *NO REFS*                         I          89      91
     50   *NO REFS*                         I          93      95

--COMMON+EQUIVALENCE--(LO=M/A/R)


  /Q/       LEVEL = 1, SIZE = 20 WORDS CM
     LCON<1>                SIGMA<2-11>            ICAL<12>              ARMI<13-14>           ARMA<15-16>           ARG<17-18>
     CASA<19-20>

--I/O UNITS--(LO=M/A/R)                                                     R=READ, W=WRITE
 -NAME---  PROPERTIES-------------REFERENCES-

  TAPE13  FMT/SEQ                  37/W   47/W   49/W   58/W   59/W
```

--STATISTICS--

```
PROGRAM-UNIT LENGTH            7548 =  492
CM LABELLED COMMON LENGTH       248 =   20
CM STORAGE USED              614008 = 25344
COMPILE TIME                 1.058 SECONDS
```

```
      SUBROUTINE SVD(NM,M,N,A,W,MATU,U,MATV,V,IERR,RVI)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
      INTEGER I,J,K,L,M,N,II,I1,KK,K1,LL,L1,MN,NM,ITS,IERR
      DOUBLE PRECISION A(5,5),W(5),U(5,5),V(5,5),RVI(5)
      DOUBLE PRECISION C,F,G,H,S,X,Y,Z,SCALE,ANORM
      LOGICAL MATU,MATV
      IERR=0
      DO 100 I=1,M
      DO 100 J=1,N
      U(I,J)=A(I,J)
  100 CONTINUE
      G=0.000
      SCALE=ANORM=0.000
      DO 300 I=1,N
      L=I+1
      RVI(I)=SCALE*G
      G=S=SCALE=0.000
      IF(I.GT.M)GOTO 210
      DO 120 K=I,M
  120 SCALE=SCALE+DABS(U(K,I))
      IF(SCALE.EQ.0.0)GOTO 210
      DO 130 K=I,M
      U(K,I)=U(K,I)/SCALE
      S=S+U(K,I)**2
  130 CONTINUE
      F=U(I,I)
      G=-DSIGN(DSQRT(S),F)
      H=F*G-S
      U(I,I)=F-G
      IF(I.EQ.N)GOTO 190
      DO 150 J=L,N
      S=0.000
      DO 140 K=I,M
  140 S=S+U(K,I)*U(K,J)
      F=S/H
      DO 150 K=I,M
      U(K,J)=U(K,J)+F*U(K,I)
  150 CONTINUE
  190 DO 200 K=I,M
  200 U(K,I)=SCALE*U(K,I)
  210 W(I)=SCALE*G
      G=S=SCALE=0.000
      IF(I.GT.M.OR.I.EQ.N)GOTO 290
      DO 220 K=L,N
  220 SCALE=SCALE+DABS(U(I,K))
      IF(SCALE.EQ.0.0)GOTO 290
      DO 230 K=L,N
      U(I,K)=U(I,K)/SCALE
      S=S+U(I,K)**2
  230 CONTINUE
      F=U(I,L)
      G=-DSIGN(DSQRT(S),F)
      H=F*G-S
      U(I,L)=F-G
      DO 240 K=L,N
  240 RVI(K)=U(I,K)/H
      IF(I.EQ.M)GOTO 270
      DO 260 J=L,M
      S=0.000
      DO 250 K=L,N
  250 S=S+U(J,K)*U(I,K)
      DO 260 K=L,N
```

```
64                U(J,K)=U(J,K)+S*RVI(K)
65          260   CONTINUE
66          270   DO 280 K=L,N
67          280   U(I,K)=SCALE*U(I,K)
68          290   ANORM=DMAX1(ANORM,DABS(W(I))+DABS(RVI(I)))
69          300   CONTINUE
70                IF(.NOT.MATV)GOTO 410
71                DO 400 II=1,N
72                I=N+1-II
73                IF(I.EQ.N)GOTO 390
74                IF(G.EQ.0.0D0)GOTO 360
75                DO 320 J=L,N
76          320   V(J,I)=(U(I,J)/U(I,L))/G
77                DO 350 J=L,N
78                S=0.0D0
79                DO 340 K=L,N
80          340   S=S+U(I,K)*V(K,J)
81                DO 350 K=L,N
82                V(K,J)=V(K,J)+S*V(K,I)
83          350   CONTINUE
84          360   DO 380 J=L,N
85                V(I,J)=V(J,I)=0.0D0
86          380   CONTINUE
87          390   V(I,I)=1.0D0
88                G=RVI(I)
89                L=I
90          400   CONTINUE
91          410   IF(.NOT.MATU)GOTO 510
92                MN=N
93                IF(M.LT.N)MN=M
94                DO 500 II=1,MN
95                I=MN+1-II
96                L=I+1
97                G=W(I)
98                IF(I.EQ.N)GOTO 430
99                DO 420 J=L,N
100         420   U(I,J)=0.0D0
101         430   IF(G.EQ.0.0D0)GOTO 475
102               IF(I.EQ.MN)GOTO 460
103               DO 450 J=L,N
104               S=0.0D0
105               DO 440 K=L,M
106         440   S=S+U(K,I)*U(K,J)
107               F=(S/U(I,I))/G
108               DO 450 K=I,M
109               U(K,J)=U(K,J)+F*U(K,I)
110         450   CONTINUE
111         460   DO 470 J=I,M
112         470   U(J,I)=U(J,I)/G
113               GOTO 490
114         475   DO 480 J=I,M
115         480   U(J,I)=0.0D0
116         490   U(I,I)=U(I,I)+1.0D0
117         500   CONTINUE
118         510   DO 700 KK=1,N
119               K1=N-KK
120               K=K1+1
121               ITS=0
122         520   DO 530 LL=1,K
123               L1=K-LL
124               L=L1+1
125               IF(DABS(RVI(L))+ANORM.EQ.ANORM)GOTO 565
126               IF(DABS(W(L1))+ANORM.EQ.ANORM)GOTO 540
```

```
127           530  CONTINUE
128           540  C=0.000
129                S=1.000
130                DO 560 I=L,K
131                F=S*RV1(I)
132                RV1(I)=C*RV1(I)
133                IF(DABS(F)+ANORM.EQ.ANORM)GOTO 565
134                G=W(I)
135                H=DSQRT(F*F+G*G)
136                W(I)=H
137                C=G/H
138                S=-F/H
139                IF(.NOT.MATU)GOTO 560
140                DO 550 J=1,M
141                Y=U(J,L1)
142                Z=U(J,I)
143                U(J,L1)=Y*C+Z*S
144                U(J,I)=-Y*S+Z*C
145           550  CONTINUE
146           560  CONTINUE
147           565  Z=W(K)
148                IF(L.EQ.K)GOTO 650
149                IF(ITS.EQ.30)GOTO 1000
150                ITS=ITS+1
151                X=W(L)
152                Y=W(K1)
153                G=RV1(K1)
154                H=RV1(K)
155                F=((Y-Z)*(Y+Z)+(G-H)*(G+H))/(2.000*H*Y)
156                G=DSQRT(F*F+1.000)
157                F=((X-Z)*(X+Z)+H*(Y/(F+DSIGN(G,F))-H))/X
158                C=1.000
159                S=1.000
160                DO 600 I1=L,K1
161                I=I1+1
162                G=RV1(I)
163                Y=W(I)
164                H=S*G
165                G=C*G
166                Z=DSQRT(F*F+H*H)
167                RV1(I1)=Z
168                C=F/Z
169                S=H/Z
170                F=X*C+G*S
171                G=-X*S+G*C
172                H=Y*S
173                Y=Y*C
174                IF(.NOT.MATV)GOTO 575
175                DO 570 J=1,N
176                X=V(J,I1)
177                Z=V(J,I)
178                V(J,I1)=X*C+Z*S
179                V(J,I)=-X*S+Z*C
180           570  CONTINUE
181           575  Z=DSQRT(F*F+H*H)
182                W(I1)=Z
183                IF(Z.EQ.0.0)GOTO 580
184                C=F/Z
185                S=H/Z
186           580  F=C*G+S*Y
187                X=-S*G+C*Y
188                IF(.NOT.MATU)GOTO 600
189                DO 590 J=1,M
```

```
190                 Y=U(J,II)
191                 Z=U(J,I)
192                 U(J,II)=Y*C+Z*S
193                 U(J,I)=-Y*S+Z*C
194           590   CONTINUE
195           600   CONTINUE
196                 RV1(L)=0.000
197                 RV1(K)=F
198                 W(K)=X
199                 GOTO 520
200           650   IF(Z.GE.0.000) GOTO 700
201                 W(K)=-Z
202                 IF(.NOT.MATV)GOTO 700
203                 DO 690 J=1,N
204           690   V(J,K)=-V(J,K)
205           700   CONTINUE
206                 GOTO 1001
207          1000 IERR=K
208          1001 RETURN
209                 END
```

--VARIABLE MAP--(LO=M/A/R)

A=ARGLIST, C=CTRL OF DO, I=DATA INIT, R=READ, S=STORE, U=I/O UNIT, W=WRITE

-NAME---	ADDRESS--	BLOCK-----	PROPERTIES-------	TYPE---------	SIZE---	REFERENCES-
A	4	DUMMY-ARG		DOUBLE	25	2 5 11
ANORM	33428			DOUBLE		6 14/S 68/A 68/S 125 125 26 126 133 134
C	33208			DOUBLE		6 128/S 132 137/S 143 144 158/S 165 168/S 170
						171 173 178 179 184/S 186 187 192 193
F	33228			DOUBLE		6 27/S 28/A 29 30 36/S 38 52/S 53/A 54
						55 107/S 109 131/S 133/A 135/A 135/A 138 155/S 156/A
						156/A 157 157 157/A 157/S 166/A 166/A 168 170/S 181/A
						181/A 184 186/S 197
G	33248			DOUBLE		6 13/S 17 18/S 28/S 29 30 42 43/S 53/S
						54 55 74 76 88/S 97/S 101 107 112 134/S
						135/A 135/A 137 153/S 155 155 155 155 156/S 157/A
						162/S 164 165 165/S 170 171 171/S 186 187
H	33268			DOUBLE		6 29/S 36 54/S 57 135/S 136 137 138 154/S
						155 155 155 157 157 164/S 166/A 166/A 169 171/S
						181/A 181/A 185
I	33048			INTEGER		4 9/C 11 11 15/C 16 17 19 20/C 21
						23/C 24 24 25 27 27 30 30 31 34/C
						35 37/C 38 40/C 41 41 42 44 44 45
						49 49 50 52 55 57 58 62 67 67
						68 68 72/S 73 76 76 76 80 82 83
						85 87 87 88 89 95/S 96 97 98 103
						102 106 107 107 108/C 109 111/C 112 112 114/C
						115 116 116 116 116 130/C 131 132 132 134
						136 142 144 161/S 162 163 177 179 191 193
IERR	10	DUMMY-ARG		INTEGER		2 4 8/S 207/S
II	33108			INTEGER		4 71/C 72 94/C 95
ITS	33178			INTEGER		4 121/S 149 150 150/S
I1	33118			INTEGER		4 160/C 161 167 176 178 182 190 192
J	33058			INTEGER		4 10/C 11 11 32/C 35 38 38 59/C 62
						64 64 75/C 76 76 77/C 80 82 82 84/C
						85 85 99/C 100 103/C 106 109 109 111/C 112
						112 114/C 115 140/C 141 142 143 144 175/C 176
						177 178 179 189/C 190 191 192 193 203/C 204
						204
K	33068			INTEGER		4 20/C 21 23/C 24 24 25 34/C 35 36
						37/C 38 38 38 40/C 41 41 45/C 46 48/C
						49 49 50 56/C 57 57 61/C 62 62 63/C
						64 64 64 66/C 67 67 79/C 80 80 81/C

-NAME-	ADDRESS	BLOCK	PROPERTIES	TYPE	SIZE	REFERENCES
						82 82 82 105/C 106 106 108/C 109 109 109
						120/S 122/C 123 130/C 147 148 154 197 198 201
						204 204 207
KK	33128			INTEGER		4 118/C 119
K1	33138			INTEGER		4 119/S 120 152 153 160/C
L	33078			INTEGER		4 16/S 32/C 45/C 48/C 52 55 56/C 59/C 61/C
						63/C 66/C 75/C 76 77/C 79/C 81/C 84/C 89/S 93/S
						99/C 103/C 105/C 124/S 125 130/C 148 151 160/C 193
LL	33148			INTEGER		4 122/C 123
L1	33158			INTEGER		4 123/S 124 126 141 143
M	2	DUMMY-ARG		INTEGER		2 4 9/C 19 20/C 23/C 34/C 37/C 40/C 44
						58 59/C 93 93 105/C 108/C 111/C 114/C 140/C 189/C
MATU	6	DUMMY-ARG		LOGICAL		2 7 91 139 188
MATV	8	DUMMY-ARG		LOGICAL		2 7 70 174 202
MN	33168			INTEGER		4 92/S 93/S 94/C 95 102
N	3	DUMMY-ARG		INTEGER		2 4 10/C 15/C 31 32/C 44 45/C 48/C 55/C
						61/C 63/C 66/C 71/C 72 73 75/C 77/C 79/C 81/C
						84/C 92 93 98 99/C 103/C 118/C 119 175/C 203/C
NM	1	DUMMY-ARG	UNUSED	INTEGER		2 4
RVI	11	DUMMY-ARG		DOUBLE	5	2 5 17/S 57/S 64 68/A 88 125/A 131 132
						132/S 153 154 162 167/S 196/S 197/S
S	33308			DOUBLE		6 16/S 25 25/S 28/A 29 33/S 35 35/S 39
						43/S 50 50/S 53/A 54 60/S 62 62/S 64 73/S
						80 80/S 82 104/S 106 106/S 107 107 129/S 131
						138/S 143 144 159/S 164 169/S 170 171 172 173
						179 185/S 186 187 192 193
SCALE	33408			DOUBLE		6 14/S 17 18/S 21 21/S 22 24 41 42
						43/S 46 46/S 47 49 67
U	7	DUMMY-ARG		DOUBLE	25	2 5 11/S 21/A 24 24/S 25 27 30/S 35
						35 38 38 38/S 41 41/S 46/A 49 49/S 50
						52 55/S 57 62 62 64 64/S 67 67/S 73
						76 76 80 100/S 106 106 107 109 109 109/S
						112 112/S 115/S 116 116/S 141 142 143/S 144/S 193
						191 192/S 193/S
V	9	DUMMY-ARG		DOUBLE	25	2 5 76/S 80 82 82 82/S 85/S 85/S 87/S
						176 177 178/S 179/S 204 204/S
W	5	DUMMY-ARG		DOUBLE	5	2 5 42/S 68/A 97 126/A 134 136/S 147 151
						152 163 182/S 198/S 201/S
X	33328			DOUBLE		6 151/S 157 157 157 157 170 171 175/S
						178 179 187/S 198
Y	33348			DOUBLE		6 141/S 143 144 152/S 155 155 155 155 159
						157 157 163/S 172 173 173/S 186 187 190/S 192
						193
Z	33368			DOUBLE		6 142/S 143 144 147/S 155 155 157 157 163/S
						167 168 169 177/S 178 179 181/S 182 183 184
						185 191/S 192 193 200 201

--PROCEDURES--(LO=M/A/R)

-NAME-	TYPE	ARGS	CLASS	REFERENCES
DABS	DOUBLE	1	INTRINSIC	21 46 68/A 68/A 125 126 133
DMAX1	DOUBLE	7	INTRINSIC	68
DSIGN	DOUBLE	2	INTRINSIC	28 53 157
DSQRT	DOUBLE	1	INTRINSIC	28/A 53/A 135 156 166 181

D=DEF LINE OF STMT FUNC
A=ACTUAL ARGUMENT

--STATEMENT LABELS--(LO=M/A/R)
-LABEL--ADDRESS---PROPERTIES-----DEF--REFERENCES-

A=ASSIGN STMT, D=DO STMT,
R=READ, W=WRITE

100	INACTIVE DO-TERM	12	9/D	10/D	
120	INACTIVE DO-TERM	21	20/D		
130	INACTIVE DO-TERM	26	23/D		
140	INACTIVE DO-TERM	35	34/D		
150	INACTIVE DO-TERM	39	32/D	37/D	
190	4208	40	31		
200	INACTIVE DO-TERM	41	40/D		
210	4538	42	19	22	
220	INACTIVE DO-TERM	46	45/D		
230	INACTIVE DO-TERM	51	48/D		
240	INACTIVE DO-TERM	57	56/D		
250	INACTIVE DO-TERM	62	61/D		
260	INACTIVE DO-TERM	65	59/D	63/D	
270	10358	66	58		
280	INACTIVE DO-TERM	67	66/D		
290	10708	68	44	47	
300	INACTIVE DO-TERM	69	15/D		
320	INACTIVE DO-TERM	76	75/D		
340	INACTIVE DO-TERM	80	79/D		
350	INACTIVE DO-TERM	83	77/D	81/D	
360	13418	84	74		
380	INACTIVE DO-TERM	86	84/D		
390	13728	87	73		
400	INACTIVE DO-TERM	90	71/D		
410	14168	91	70		
420	INACTIVE DO-TERM	100	99/D		
430	14728	101	98		
440	INACTIVE DO-TERM	106	105/D		
450	INACTIVE DO-TERM	110	103/D	108/D	
460	16528	111	102		
470	INACTIVE DO-TERM	112	111/D		
475	17128	114	101		
480	INACTIVE DO-TERM	115	114/D		
490	17338	116	113		
500	INACTIVE DO-TERM	117	94/D		
510	17608	118	91		
520	17758	122	199		
530	INACTIVE DO-TERM	127	122/D		
540	20468	128	126		
550	INACTIVE DO-TERM	145	140/D		
560	22748 DO-TERM	146	130/D	139	
565	23018	147	125	133	
570	INACTIVE DO-TERM	180	175/D		
575	27608	181	174		
580	30258	186	183		
590	INACTIVE DO-TERM	194	189/D		
600	31548 DO-TERM	195	160/D	188	
650	32048	200	148		
690	INACTIVE DO-TERM	204	203/D		
700	32458 DO-TERM	205	118/D	200	202
1000	32538	207	149		
1001	32558	208	206		

--ENTRY POINTS--(LO=M/A/R)
-NAME---ADDRESS--ARGS------REFERENCES-

D=DEFINITION, R=RETURN

SVD 58 11 2/0 208/R

--DO LOOPS--(LO=M/A/R)

-LABEL	--ADDRESS	----PROPERTIES----------	INDEX	---FROM	-----TO
100	*NO REFS*	OUTER	I	9	12
100	*NO REFS*		J	10	12
300	*NO REFS*	XREF/OUTER	I	15	69
120	*NO REFS*		K	20	21
130	*NO REFS*		K	23	26
150	*NO REFS*	OUTER	J	32	39
140	*NO REFS*		K	34	35
150	*NO REFS*		K	37	39
200	*NO REFS*		K	40	41
220	*NO REFS*		K	45	46
230	*NO REFS*		K	48	51
240	*NO REFS*		K	56	57
260	*NO REFS*	OUTER	J	59	65
250	*NO REFS*		K	61	62
260	*NO REFS*		K	63	65
280	*NO REFS*		K	66	67
400	*NO REFS*	OUTER	II	71	90
320	*NO REFS*		J	75	76
350	*NO REFS*	OUTER	J	77	83
340	*NO REFS*		K	79	80
350	*NO REFS*		K	81	83
380	*NO REFS*		J	84	86
500	*NO REFS*	OUTER	II	94	117
420	*NO REFS*		J	99	100
450	*NO REFS*	OUTER	J	103	110
440	*NO REFS*		K	105	106
450	*NO REFS*		K	108	110
470	*NO REFS*		J	111	112
480	*NO REFS*		J	114	115
700	*NO REFS*	XREF/OUTER/EXIT	KK	118	205
530	*NO REFS*	EXIT	LL	122	127
560	*NO REFS*	XREF/OUTER/EXIT	I	130	146
550	*NO REFS*		J	140	145
600	*NO REFS*	XREF/OUTER	II	160	195
570	*NO REFS*		J	175	180
590	*NO REFS*		J	189	194
690	*NO REFS*		J	203	204

--STATISTICS--

PROGRAM-UNIT LENGTH 34138 = 1803
CM STORAGE USED 654008 = 27392
COMPILE TIME 4.091 SECONDS

5.2.8 Programa CACILDA

O programa gera os dados simulados de que JOANA se serve, em binário, no ficheiro TAPE 12. Tem também um ficheiro próprio de saída, TAPE 13, a partir do qual o utilizador pode controlar a saída que obteve em TAPE 12. Fundamentalmente, o programa calcula, recorrendo a ALFA e utilizando um algoritmo de cálculo idêntico ao de JOANA, potências em 9 lotes ou séries e simula um erro aleatório que acrescenta às medidas, calculadas com uma precisão tal, em relação ao erro posteriormente somado, que se podem considerar exactas. Não nos deteremos no corpo de cálculo das potências, já abordado a propósito de JOANA, mas no controlo do cálculo e do erro.

A configuração electródica suposta é, nesta versão, a de Schlumberger. Adoptou-se como quociente entre cada distância interelectródica e a respectiva dimensão horizontal de eléctrodo aparente BE = .4, o que dá uma distância entre eléctrodos de tensão de 1/5 da distância interelectródica (distância entre eléctrodos de corrente), aceitável e normal numa configugação deste tipo (Orellana, 1972, p. 111). Naturalmente que no campo o conveniente é manter sempre fixos os eléctrodos de tensão, de modo a que para a menor distância entre eléctrodos de corrente a relação BE não ultrapasse valores daquela ordem de grandeza. Como, à medida que a distância entre eléctrodos de corrente aumenta, a leitura feita com os de tensão (aqui de potência, para todos os efeitos) vai ficando mais difícil, por exigir ou grandes correntes ou instrumentos precisos para valores a ler muito pequenos, é preciso a um certo ponto, mas só então, aumentar a distância entre estes. No entanto, como não há nisso perda de generalidade, é-nos útil e prático simular medições com aquele quociente constante.

As sucessivas distâncias interelectródicas constituem uma progressão geométrica (ver secção 4.10), o que é também característico da configuração. O que é, todavia, objecto de alguma controvérsia, é o valor da razão dessa progressão que se deve adoptar. Orellana (1972, p. 246), depois de referir que a escola francesa utiliza uma razão $\sqrt{2}$ e a soviética, 1.5, propõe 1.25. Oldenburg (1978) advoga, fundamentadamente, $\sqrt{2}$. No nosso trabalho seguimos a sugestão de Orellana, FE = 1.25.

Por diversas vezes foi já afirmada a utilidade de obter potências todas da mesma ordem de grandeza. Isso corresponde a uma técnica de medições bem definida. De facto, o operador deve então injectar, para cada distância interelectródica, a corrente necessária para que a potência medida venha a mesma para todo o lote. Naturalmente que pode também aqui, e por razões de precisão dos instrumentos de medida, ser obrigado a redefinir ocasionalmente BE. A nossa experiência, nos exemplos que veremos em próximas secções, permite-nos concluir que as alterações não são, nem em maior número, nem mais passíveis de obrigar BE a ultrapassar valores típicos da configuração de Schlumberger, do que nas técnicas normais de medição de resistividades aparentes (homogéneas). Mas mesmo que ultrapassem esses limites, o único óbice do desvio da configuração seria o perderem-se as suas características de penetração e leitura, porque, a nível de cálculo, nenhuma das simplificações a que a configuração dá azo, se respeitados esses limites, é utilizada aqui. O programa trata a configuração, em termos de cálculo, exactamente como outra qualquer e os valores que obtém não reflectem o erro que essas simplificações acarretam (Orellana, 1972, p.111).

Esta técnica de medição é aqui simulada. A potência, para cada distância interelectródica, é calculada com uma corrente inicial IP que o utilizador deve fornecer, o erro é somado, e depois a corrente a injectar é redefinida de forma a que as potências de todos os lotes venham iguais à primeira calculada.

A distribuição normal dos erros foi aproximada a partir de uma rotina intrínseca do sistema, comum aliás a vários outros, RANF( ), geradora de números aleatórios uniformemente distribuídos de 0 a 1. A média da distribuição é 1/2 e a variância 1/12. Sabe-se que a soma de NRA números aleatórios uniformemente distribuidos (o utilizador é solicitado a definir NRA) se distribui de forma pseudo normal de média NRA/2 e variância NRA/12. Essa soma é armazenada no programa em RUNF. Compete ao utilizador definir ainda o desvio médio quadrático relativo dos erros, DPE. Aceitando generalizar a distribuições pseudo-normais ou quase normais as regras operativas válidas para distribuições realmente normais, é imediato constatar que os erros relativos, a acrescentar às potências, e definidos por

$$(2\ \mathrm{RUNF} - \mathrm{NRA})\ \frac{\sqrt{3}\ \mathrm{DPE}}{\sqrt{\mathrm{NRA}}}\ ,$$

se distribuem de forma pseudo normal com média nula e desvio médio quadrático DPE, como se pretendia. PREPOM, no contexto definido no capítulo anterior, obtém-se como 2 DPE. O valor a atribuir a NRA controla a aproximação

da distribuição à distribuição realmente normal. A experiência mostrou-nos que fazer NRA = 100 não exige esforço computacional exagerado relativamente ao resto da rotina e dá distribuições muito próximas da normal. Repare-se que o erro relativo varia entre $-\sqrt{NRA}\ \sqrt{3}\ DPE$ e $\sqrt{NRA}\ \sqrt{3}\ DPE$, ou $-10\sqrt{3}\ DPE$ e $10\sqrt{3}\ DPE$ para NRA = 100.

Box e Muller (1958) e Marsaglia e Bray (1964) desenvolveram métodos mais elaborados de obter distribuições normais a partir de distribuições uniformes.

O programa está preparado para, em opção, trabalhar com uma distribuição uniforme de erros (IDE = 1), para o que o utilizador deverá especificar o erro relativo máximo que pretende impor, PREPOM.

O utilizador deve ainda especificar a menor distância interelectródica a que pretende simular uma medida e o número de medidas de cada lote, ou número de grupos de medidas, NM, e ainda uma "semente" ANPN que controla, através de RANSET (ANPN), a série de números aleatórios a obter com sucessivas chamadas de RANF ( ).

5.2.9 Listagem de CACILDA

Optou-se por listar, conjuntamente, e de novo, ALFA, na perspectiva de tornar os dois programas, o gerador de medições simuladas e o interpretativo, perfeitamente autónomos.

O leitor estranhará talvez os nomes dos dois programas, CACILDA e JOANA. Representam, porém, uma homenagem do autor a sua mãe, Cacilda Chaves, e filha, Joana Cacilda Rodrigues Espain O.

```
      PROGRAM CACILDA(TAPE12,TAPE13,INPUT,OUTPUT)
C  ***************************************************
C    COPYRIGHT CARLOS MANUEL CHAVES ESPAIN DE OLIVEIRA
C    1984
C  ***************************************************
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
       DIMENSION D(30),CS(30),N2(30),BA(30),P(30),TP(270)
      DIMENSION A(100,100),B(100,100),RAR(270),CIP(270)
      DIMENSION T(30,2),V(5),H(2),C(30),N1(30),CP(30)
      DIMENSION EM(30),EP(30,100),ED(30,100),EPR(30)
      DIMENSION DF(30),ICM(30),DCU(30),CIPU(9,30),PU(9,30)
      DOUBLE PRECISION K1,K2,KP,LA,N3,M1,M7,MALO,IP,N2,N1,JP
      INTEGER VA,VC,SBA,BA,EM,EMA,EMM,EL
       COMMON/A/K1,K2,H1,H2,LA
      DATA B/10000(0.0D0)/
            DATA EP/3000(0.0D0)/
            DATA ED/3000(0.0D0)/
      DATA T/60(0.0D0)/
      DATA BA/30(0)/

      PRINT*,'*********************************************************'
      PRINT*,'INTENSIDADE INICIAL'
      READ*,IP
      WRITE(13,7)
    7 FORMAT(1H1,50X,27HCARACTERISTICAS DAS MEDIDAS)
      WRITE(13,*)'INTENSIDADE INICIAL =',IP

      BE=.4D0
        NPS=0
         VTE=10.0E-10

      PRINT*,'MENOR DISTANCIA INTERELECTRODICA'
      READ*,D(1)
      WRITE(13,*)'MENOR DISTANCIA INTERELECTRODICA =',D(1)
      FE=1.25D0
      PRINT*,'NUMERO DE GRUPOS DE MEDIDAS'
      READ*,NM

      KP=1.0D0/3.14159265358979313846264300
       JP=IP*IP
       DO 11 I=1,NM
         EF=FE**(I-1)
          D(I)=D(1)*EF
          C(I)=D(I)*BE
          CS(I)=D(I)-C(I)
          N1(I)=C(I)*C(I)
          N2(I)=CS(I)*CS(I)
          DCU(I)=N2(I)-N1(I)
11     CONTINUE
        ICMI=20
              IF(2*(ICMI/2).NE.ICMI)ICMI=ICMI-1
        EZE=1E-60
        EMM=100
      DO 12 I=1,NM
        EM(I)=1
        EPR(I)=1.0/EZE
        ICM(I)=ICMI
  12 CONTINUE

      WRITE(13,*)'MAIOR DISTANCIA INTERELECTRODICA =',D(NM)
      WRITE(13,*)'NUMERO DE GRUPOS DE MEDIDAS =',NM

         PRINT*,'DISTR. UNIFORME (1) OU PSEUDO-NORMAL (2) DOS ERROS '
```

```
64                  READ*,IDE
65                  IF(IDE.EQ.2)THEN
66                   PRINT*,'NUMERO DE ALEATORIOS A SOMAR'
67                   READ*,NRA
68                   PRINT*,'DESVIO MEDIO QUADRATICO RELATIVO DOS ERROS'
69                   READ*,DPE
70                   PREPOM=2.0D0*DPE
71                  DPNRA=NRA
72                   PUF=DSQRT(3.0D0)*PREPOM/2.0D0/DSQRT(DPNRA)
73                   WRITE(13,*)'DISTRIBUICAO PSEUDO NORMAL DOS ERROS'
74                   WRITE(13,*)'DESV. MEDIO QUADR. DOS ERROS =',DPE
75                   WRITE(13,*)'NUMERO DE ALEATORIOS SOMADOS =',NRA
76                  ELSE
77                   PRINT*,'ERRO RELATIVO MAXIMO'
78                   READ*,PREPOM
79                  WRITE(13,*)'DISTRIBUICAO UNIFORME DOS ERROS'
80                  WRITE(13,*)'ERRO RELATIVO MAXIMO (PREC. DAS MED.) =',PREPOM
81                  ENDIF
82                PREP=PREPOM/100.0D0
83                  PRINT*,'SEMENTE '
84                  READ*,ANPN
85                 CALL RANSET(ANPN)
86                    MEDIA=DESVIO=0.0D0
87                 IF(IDE.EQ.1)THEN
88                    DO 13 I=1,NM*9
89                     RAR(I)=(2.0D0*RANF()-1.0D0)*PREPOM+1.0D0
90                    AAA=RAR(I)-1.0D0
91                      MEDIA=MEDIA+AAA
92                      DESVIO=DESVIO+AAA**2
93              13    CONTINUE
94                      ELSE
95                        WRITE(13,*)' '
96                        WRITE(13,*)'ERROS RELATIVOS'
97                        PRINT*,'ERROS RELATIVOS'
98                        DO 15 I=1,NM*9
99                          RUNF=0.0D0
100                         DO 14 J=1,NRA
101                          RUNF=RUNF+RANF()
102             14          CONTINUE
103                       RAR(I)=(2.0D0*RUNF-NRA)*PUF+1.0D0
104                     AAA=RAR(I)-1.0D0
105                          MEDIA=MEDIA+AAA
106                          DESVIO=DESVIO+AAA**2
107                           WRITE(13,*)AAA
108                           PRINT*,AAA,'  ',
109             15          CONTINUE
110                      ENDIF
111                           PRINT*,' '
112
113                       NOM=9.0D0*NM
114                         MEDIA=MEDIA/NOM
115                    DESVIO=DSQRT((NOM*DESVIO-MEDIA**2)/NOM/(NOM-1.0D0))
116                        PRINT*,'MEDIA =',MEDIA,'  DESVIO =',DESVIO
117                 WRITE(12)D(1),BE,FE,NM,PREPOM,IDE
118
119                 PRINT*,'NUMERO DE ESTRATOS'
120                 READ*,VA
121
122                 PRINT*,'RESISTIVIDADE R1'
123                 READ*,R1
124                 V(1)=R1
125                 PARF=KP*R1
126                 CF=2.0D0*PARF
```

```
127                DO 20 I=1,NM
128                   P(I)=(PARF/C(I)-PARF/CS(I))*JP
129                    DF(I)=P(I)
130                          CP(I)=0.000
131             20 CONTINUE
132                IF(VA.EQ.0)THEN
133                 DO 30 II=1,NM
134                 IJ=9*II-8
135                 DO 25 JI=0,8
136                 L=IJ+JI
137                 TP(L)=P(II)*RAR(L)
138                 IF(L.EQ.1)THEN
139                 PAPA=TP(1)
140                 CIP(1)=JP
141                 ELSE
142                 CIP(L)=JP*PAPA/TP(L)
143                 TP(L)=PAPA
144                 ENDIF
145          25     CONTINUE
146          30     CONTINUE
147                 GOTO 1000
148                 ENDIF
149
150                 PRINT*,'ESPESSURA T1'
151                 READ*,H1
152                 V(2)=H1
153                 PRINT*,'RESISTIVIDADE R2'
154                 READ*,R2
155                 V(3)=R2
156                 K1=(R2-R1)/(R2+R1)
157                 IF(VA.EQ.1) GO TO 200
158
159                 PRINT*,'ESPESSURA T2'
160                 READ*,H2
161                  H2=H2+H1
162                 V(4)=H2
163                 PRINT*,'RESISTIVIDADE R3'
164                 READ*,R3
165                 V(5)=R3
166                 K2=(R3-R2)/(R3+R2)
167
168          C    ************************************************************
169          C    CALCULO DAS POTENCIAS NO CASO DE 2 ESTRATOS
170          C     ***********************************************************
171                 H(1)=H1
172                 H(2)=H2
173
174                  IF(K1.LE.0.000.AND.K2.LE.0.000)THEN
175                   CALL ALFA
176                  ELSE
177                   LA=1.000
178                  ENDIF
179                 IF(LA.EQ.1.000)THEN
180                 MLA=1
181                 ELSE
182                 MLA=0
183                 ENDIF
184
185                 CF=CF*LA
186                 V1=1.000-LA
187                 V2=K1*LA
188                 V3=K2*LA
189                 V4=K1*K2*LA
```

```
190
191                 PRINT*,LA
192
193               N=0
194               B(I,1)=1.0D0
195
196           120         NS=N+1
197                       DO 150 J=1,N
198                       J1=J+1
199                       IF(MLA.EQ.1)THEN
200                       NII=2*N-2*J+1
201                       ELSE
202                       NII=N-J+1
203                       ENDIF
204                       DO 145 I=NII,2*N-J
205                       X=A(I,J)
206                       B(I+2,J)=B(I+2,J)+V2*X
207                       B(I,J1)=B(I,J1)-V4*X
208                       B(I+1,J1)=B(I+1,J1)+V3*X
209                       IF(MLA.EQ.0)B(I+1,J)=B(I+1,J)+V1*X
210           145         CONTINUE
211           150         CONTINUE
212
213                       DO 190 J=1,NS
214                       IF(MLA.EQ.1)THEN
215                       NII=2*NS-2*J+1
216                       ELSE
217                       NII=NS-J+1
218                       ENDIF
219                       DO 180 I=NII,2*NS-J
220                       X=A(I,J)*B(I,J)
221                       B(I,J)=0.0D0
222                       N3=(I-NS)*H1+(J-1)*H2
223
224                       DO 170 VC=1,2
225                         ZVC=H(VC)+N3
226                         QVC=4.0D0*ZVC*ZVC
227
228                         DO 160 II=1,NM
229                           IF (BA(II).EQ.1) GO TO 160
230                     RHH=DSQRT(QVC+N2(II))
231                     RYY=DSQRT(QVC+N1(II))
232                   T(II,VC)=T(II,VC)+DCU(II)*X/RHH/RYY/(RHH+RYY)
233            160          CONTINUE
234
235            170        CONTINUE
236
237            180      CONTINUE
238
239            190 CONTINUE
240
241                 SBA=0
242
243                    GOTO 191
244
245           C     ********************************************************
246           C        CALCULO DAS POTENCIAS NO CASO DE 1 ESTRATO
247           C     ********************************************************
248
249            200         M1=4.0D0*H1*H1
250
251                        N=1
252
```

```
253          210        MALO=CP**(1**N
254                     M7=M1*V*N
255
256                      SBA=0
257
258          191  DO 199 II=1,NM
259                   IF (BA(II).EQ.1) GO TO 199
260                     IF(VA.EQ.2)THEN
261                   PN=CP*(K1*T(II,1)+K2*T(II,2))*JP
262                   T(II,1)=0.000
263                   T(II,2)=0.000
264                    ELSE
265                    PN=(MALO/DSQRT(M7+N1(II))-MALO/DSQRT(M7+N2(II)))*JP
266                    ENDIF
267                            CP(II)=CP(II)+PN
268                    IF(ICM(II).EQ.0)GOTO 664
269               IF(VA.EQ.1.AND.N.EQ.1.OR.VA.EQ.2.AND.N.EQ.0)THEN
270                  ER=CP(II)
271               EP(II,1)=CP(II)
272               GOTO 222
273               ENDIF
274               EM(II)=EM(II)+1
275               IF(EM(II).GT.(ICM(II)+1))EM(II)=ICM(II)+1
276               EMA=EM(II)
277               IF(EMA.GT.EMM)THEN
278               PRINT*,'DIMENSOES INSUFICIENTES'
279               STOP
280               ENDIF
281               ED(II,1)=CP(II)
282               DO 192 J=2,EMA
283               EB=0.000
284               IF(J.NE.2)EB=EP(II,J-2)
285               ES=ED(II,J-1)-EP(II,J-1)
286                 IF(DABS(ES/EP(II,J-1)).LT.VTE)THEN
287                     PRINT*,'EPSILON NAO PODE CONTINUAR',II
288                    ICM(II)=0
289                    GOTO 664
290                    ENDIF
291               IF(DABS(ES).LT.EZE)ES=EZE
292               ED(II,J)=EB+1.000/ES
293           192 CONTINUE
294               EL=EMA
295               IF(2*(EMA/2).EQ.EMA)EL=EMA-1
296               ER=ED(II,EL)
297               IF(EMA.EQ.2)GOTO 196
298               EPR(II)=EP(II,EL-2)
299               IF(DABS(EPR(II)).LT.EZE)GOTO 194
300               EPR(II)=DABS((EPR(II)-ER)/(EPR(II)+DF(II)))
301               GOTO 195
302           194 EPR(II)=DABS(ER+DF(II))
303           196 DO 198 J=1,EMA
304               EP(II,J)=ED(II,J)
305           198 CONTINUE
306               P(II)=ER+DF(II)
307           222 IF(EPR(II).LT.PREP/10.000)THEN
308                     TT=1
309                     GOTO 670
310                      ELSE
311                      GOTO 668
312                      ENDIF
313           664 IF(DABS(PN/(CP(II)+DF(II))).GE.PREP/100.000)GOTO 668
314                        TT=2
315          670          BA(II)=1
```

```
315                     IJ=9*II-8
317                     DO 666 JI=0,8
318                       L=IJ+JI
319                        IF(TT.EQ.2)THEN
320                     TP(L)=(CP(II)+DF(II))*RAR(L)
321                        ELSE
322                        TP(L)=P(II)*RAR(L)
323                        ENDIF
324                     IF(NPS.EQ.0)THEN
325                        NPS=1
326                        PAPA=TP(L)
327                  CIP(L)=JP
328                       ELSE
329                        CIP(L)=PAPA*JP/TP(L)
330                        TP(L)=PAPA
331                       ENDIF
332              666   CONTINUE
333                     GOTO 199
334              668    SBA=1
335              199 CONTINUE
336
337                   IF (SBA.EQ.1) THEN
338                      N=N+1
339                      IF(VA.EQ.2)THEN
340                      GO TO 120
341                       ELSE
342                       GOTO 210
343                       ENDIF
344                   ENDIF
345
346                   GO TO 1000
347
348              1000 IVA=2*VA+1
349                    II=1
350                    DO 1020 I=1,9*NM,9
351                       DO 1010 J=0,8
352                        CIPU(J+1,II)=CIP(J+I)
353                        PU(J+1,II)=TP(J+I)
354              1010      CONTINUE
355                       II=II+1
356              1020   CONTINUE
357                     WRITE(12)((CIPU(J,I),J=1,9),I=1,NM)
358
359                   WRITE(12)((PU(J,I),J=1,9),I=1,NM)
360                      IF(VA.EQ.2)V(4)=V(4)-V(2)
361                   WRITE(12)VA,(V(I),I=1,IVA)
362
363                   WRITE(13,2333)
364              2333 FORMAT(1HO,50X,22HDISTANCIAS E CORRENTES)
365                   WRITE(13,2335)
366              2335 FORMAT(1X)
367                   WRITE(13,2001)((D(I),DSQRT(CIP(9*I-8+J)),I=1,NM),J=0,8)
368                   WRITE(13,2352)
369              2352 FORMAT(1HO,50X,12HCONFIGURACAO)
370                   WRITE(13,2354)
371              2354 FORMAT(1X)
372                   WRITE(13,2003)(I,V(I),I=1,IVA)
373
374                   PRINT*,'PRIMEIRA E ULTIMA POTENCIA',TP(1),',',TP(NM*9)
375                   PRINT*,'CONFIGURACAO'
376                   PRINT*,(V(I),I=1,IVA)
377
378              2001 FORMAT(5(F7.1,1X,F14.5,3X))
```

```
  379            2003 FORMAT(1X,2HV(,I1,2H)=,F14.9,2X)
  380
  381                 PRINT*,'**********************************************************'
  382                 STOP
  383                 END
```

--VARIABLE MAP--(LO=M/A/R)
-NAME---ADDRESS--BLOCK-----PROPERTIES-------TYPE---------SIZE---REFERENCES-

A=ARGLIST, C=CTRL OF DO, I=DATA INIT,
R=READ, S=STORE, U=I/O UNIT, W=WRITE

```
A         54768                          DOUBLE      10000       8    205    220/S
AAA     1604568                          DOUBLE                 90/S   91     92    104/S  105    106    107/W  108/W
ANPN    1604508                          DOUBLE                 84/R   85/A
B        549368                          DOUBLE      10000       8    15/I   194/S  206    206/S  207    207/S  208    208/S  209
                                                                209/S  220    221/S
BA        43108                          INTEGER        30       7    13     19/I   229    259    315/S
BE      1604148                          DOUBLE                 28/S   44     117/W
C       1260748                          DOUBLE         30       9    44/S   45     46     46     128
CF      1604728                          DOUBLE                126/S  185    185/S  253    261
CIP     1246328                          DOUBLE        270       8    140/S  142/S  327/S  329/S  352    367/A
CIPU    1563008                          DOUBLE        270      11    352/S  357/W
CP      1262648                          DOUBLE         30       9    130/S  267    267/S  270    271    281    313/A  313    323
                                                               320
CS        41208                          DOUBLE         30       7    45/S   47     47     128
D         43248                          DOUBLE         30       7    33/R   34/W   43     43/S   44     45     60/W   117/W  367/W
DCU     1562048                          DOUBLE         30      11    46/S   232
DESVIO  1604528                          DOUBLE                 86/S   92     92/S   106    106/S  115    115/S  116/W
DF      1560528                          DOUBLE         30      11    129/S  300    302/A  306    313    320
DPE     1604368                          DOUBLE                 69/R   70     74/W
DPNRA   1604428                          DOUBLE                 71/S   72/A
EB      1605548                          DOUBLE                283/S  284/S  292
ED      1421768                          DOUBLE        3000      10    17/I   281/S  285    292/S  296    304
EF      1604268                          DOUBLE                 42/S   43
EL      1604138                          INTEGER                13    294/S  295/S  296    298
EM      1263608                          INTEGER        30      10    13     55/S   274    274/S  275    275/S  276
EMA     1604118                          INTEGER                13    276/S  277    282/C  294    295    295    295    295    297
                                                               303/C
EMM     1604128                          INTEGER                13    53/S   277
EP      1264168                          DOUBLE        3000      10    16/I   271/S  284    285    286/A  298    304/S
EPR     1557568                          DOUBLE         30      10    56/S   298/S  299/A  300/A  300    300/A  300    300/S  302/S
                                                               307
ER      1605518                          DOUBLE                270/S  296/S  300    302/A  306
ES      1605568                          DOUBLE                285/S  286/A  291/A  291/S  292
EZE     1604318                          DOUBLE                 52/S   56     291    291    299
FE      1604218                          DOUBLE                 35/S   42     117/W
H       1260708                          DOUBLE         2       9    171/S  172/S  225
H1           48  /A/                     DOUBLE                14    151/R  152    161    171    222    249    249
H2           68  /A/                     DOUBLE                14    160/R  161    161/S  162    172    222
I       1604248                          INTEGER                41/C  42     42     43     44     44     45     45     45     45
                                                                46    46     47     47     47     48     48     48     54/C   55
                                                                56    57     88/C   89     90     98/C   103    104    127/C  128
                                                               128   128    129    129    130    204/C  205    206    206    207
                                                               207   208    208    209    209    219/C  220    220    221    222
                                                               222   350/C  352    353    357    359    361    367/C  367    367
                                                               372/C 372/W  372    376
ICM     1561468                          INTEGER        30      11    57/S   268    275    275    275    288/S
ICMI    1604308                          INTEGER                50/S   51     51     51     51     51/S   57
IDE     1604348                          INTEGER                64/R   65     87     117/W
II      1604758                          INTEGER               133/C  134    137    228/C  229    230    231    232    232    233
                                                               258/C  259    261    261    262    263    265    265    267    267
                                                               268    270    271    271    274    274    275    275    275    275
                                                               276    281    281    284    285    285    286    287/W  288    292
                                                               296    298    298    299    300    300    300    300    302    302
```

-NAME-	--ADDRESS--	-BLOCK-	-PROPERTIES-	-TYPE-	-SIZE-	-REFERENCES-									
						304	304	306	306	307	313	313	315	316	320
						320	322	349/S	352	353	355	355/S			
IJ	1604779			INTEGER		134/S	136	316/S	318						
IP	1604023			DOUBLE		12	23/R	26/W	40	40					
IVA	1605649			INTEGER		348/S	351	372/C	376						
J	1604638			INTEGER		100/C	197/C	198	200	202	204/C	205	206	206	209
						209	213/C	215	217	219/C	220	220	221	222	223
						282/C	284	284	285	285	286	292	303/C	304	304
						351/C	352	352	353	353	357	359	367/C	367	
JI	1605008			INTEGER		135/C	136	317/C	318						
JP	1604043			DOUBLE		12	40/S	128	140	142	261	265	327	329	
J1	1605258			INTEGER		198/S	207	207	208	208					
KP	1603708			DOUBLE		12	39/S	125							
K1	08	/A/		DOUBLE		12	14	156/S	174	187	189	253	261	261	
K2	28	/A/		DOUBLE		12	14	166/S	174	188	189	261			
L	1605008			INTEGER		136/S	137	137	138	142	142	143	318/S	320	320
						322	322	326	327	329	329	330			
LA	108	/A/		DOUBLE		12	14	177/S	179	185	186	187	188	189	191/W
MALO	1604008			DOUBLE		12	253/S	265	265	265					
MEDIA	1604548			INTEGER		86/S	91	91/S	105	105/S	114	114/S	115	116/W	
MLA	1605118			INTEGER		180/S	182/S	199	209	214					
M1	1603748			DOUBLE		12	249/S	254							
M7	1603768			DOUBLE		12	254/S	255/A	265/A						
N	1605228			INTEGER		193/S	196	197/C	200	202	204/C	251/S	253	254	254
						269	269	338	338/S						
NII	1605268			INTEGER		200/S	202/S	204/C	215/S	217/S	219/C				
NM	1604238			INTEGER		37/R	41/C	54/C	60	61/W	88/C	99/C	113	117/W	127/C
						133/C	228/C	258/C	350/C	357	359	367/C	374		
NOM	1604658			INTEGER		113/S	114	115/A	115	115/A	115/A	115			
NPS	1604168			INTEGER		29/S	324	325/S							
NRA	1604358			INTEGER		67/R	71	75/W	100/C	103					
NS	1605238			INTEGER		196/S	213/C	215	217	219/C	222				
N1	1261708			DOUBLE	30	9	12	46/S	48	231/A	265/A				
N2	42148			DOUBLE	30	7	12	47/S	48	230/A	265/A				
N3	1603728			DOUBLE		12	222/S	225							
P	43468			DOUBLE	30	7	128/S	129	137	306/S	322				
PAPA	1605038			DOUBLE		139/S	142	143	326/S	329	330				
PARF	1604708			DOUBLE		125/S	126	128	128	128					
PN	1605478			DOUBLE		261/S	265/S	267	313/A						
PREP	1604468			DOUBLE		82/S	307	313							
PREPOM	1604408			DOUBLE		70/S	72	78/R	80/W	82	89	117/W			
PU	1573348			DOUBLE	270	11	353/S	359/W							
PUF	1604448			DOUBLE		72/S	103								
QVC	1605378			DOUBLE		226/S	230/A	231/A							
RAR	1235768			DOUBLE	270	8	89/S	90	103/S	104	137	320	322		
RHH	1605428			DOUBLE		230/S	232	232	232						
RUNF	1604618			DOUBLE		99/S	101	101/S	103						
RYY	1605448			DOUBLE		231/S	232	232							
R1	1604668			DOUBLE		123/R	124	125	156	156					
R2	1605088			DOUBLE		154/R	155	156	156	156	156	166	166		
R3	1605078			DOUBLE		164/R	165	166	166	166	166				
SBA	1604108			INTEGER		13	241/S	256/S	334/S	337					
T	1256668			DOUBLE	60	9	18/I	232	232/S	2 1	261	262/S	263/S		
TP	44428			DOUBLE	270	7	137/S	139	142	143/S	320/S	322/S	326	329	330/S
						353	374/W	374/W							
TT	1605618			DOUBLE		308/S	314/S	319							
V	1260568			DOUBLE	5	9	124/S	152/S	155/S	1 2/S	165/S	360	360	360/S	361/W
						372/W	376/W								
VA	1604068			INTEGER		13	120/R	132	157	2.0	269	269	339	348	363
						361/W									
VC	1604078			INTEGER		13	224/C	225	232	2 2					
VTE	1604178			DOUBLE		30/S	286								
V1	1605128			DOUBLE		186/S	209								

```
-NAME---ADDRESS--BLOCK-----PROPERTIES-------TYPE---------SIZE---REFERENCES-

 V2      1605148                            DOUBLE              187/S  206
 V3      1605168                            DOUBLE              188/S  208
 V4      1605208                            DOUBLE              189/S  207
 X       1605308                            DOUBLE              205/S  206    207    208    2 ,    220/S  232
 ZVC     1605358                            DOUBLE              225/S  226    226


--PROCEDURES--(LO=M/A/R)                                                    D=DEF LINE OF STMT FUNC
 -NAME----TYPE------ARGS----CLASS-----REFERENCES-                           A=ACTUAL ARGUMENT

 ALFA                  0    SUBROUTINE  175
 DABS    DOUBLE        1    INTRINSIC   286    291    299    300    302    313
 DSQRT   DOUBLE        1    INTRINSIC    72     72    115    230    231    265    265    367/R
 RANF    REAL          0    INTRINSIC    89    101
 RANSET                1    SUBROUTINE   85


--STATEMENT LABELS--(LO=M/A/R)                                              A=ASSIG STMT, D=DO STMT,
 -LABEL--ADDRESS---PROPERTIES-----DEF--REFERENCES-                          R=READ, W=WRITE

     7    34078   FORMAT          25     24/W
    11   INACTIVE DO-TERM         49     41/D
    12   INACTIVE DO-TERM         58     54/D
    13   INACTIVE DO-TERM         93     88/D
    14   INACTIVE DO-TERM        102    100/D
    15   INACTIVE DO-TERM        109     98/D
    20   INACTIVE DO-TERM        131    127/D
    25   INACTIVE DO-TERM        145    135/D
    30   INACTIVE DO-TERM        146    133/D
   120    13238                  196    340
   145   INACTIVE DO-TERM        210    204/D
   150   INACTIVE DO-TERM        211    197/D
   160    17148   DO-TERM         233    228/D  229
   170   INACTIVE DO-TERM        235    224/D
   180   INACTIVE DO-TERM        237    219/D
   190   INACTIVE DO-TERM        239    213/D
   191    20008                  258    243
   192   INACTIVE DO-TERM        293    282/D
   194    24308                  302    299
   196    24428                  303    297    301
   198   INACTIVE DO-TERM        305    303/D
   199    27038   DO-TERM         335    258/D  259    333
   200    17438                  249    157
   210    17558                  253    342
   222    24738                  307    272
   664    25178                  313    268    289
   666   INACTIVE DO-TERM        332    317/D
   668    27018                  334    311    313
   670    25548                  315    309
  1000    27268                  348    147    346
  1010   INACTIVE DO-TERM        354    351/D
  1020   INACTIVE DO-TERM        356    350/D
  2001    34318   FORMAT          378    367/W
  2003    34358   FORMAT          379    372/W
  2333    34148   FORMAT          364    363/W
  2335    34218   FORMAT          366    365/W
  2352    34238   FORMAT          369    368/W
  2354    34278   FORMAT          371    370/W
```

--ENTRY POINTS--(LO=M/A/R) D=DEFINITION, R=RETURN

-NAME---	ADDRESS	ARGS	REFERENCES-
CACILDA	208	0	1/D

--DO LOOPS--(LO=M/A/R)

-LABEL-	ADDRESS	PROPERTIES	INDEX	FROM	TO
11	*NO REFS*	XREF	I	41	49
12	*NO REFS*		I	54	58
13	*NO REFS*	XREF	I	88	93
15	*NO REFS*	XREF/OUTER	I	98	109
14	*NO REFS*	XREF	J	100	102
20	*NO REFS*		I	127	131
30	*NO REFS*	OUTER	II	133	146
25	*NO REFS*		JI	135	145
150	*NO REFS*	OUTER	J	197	211
145	*NO REFS*		I	204	210
190	*NO REFS*	XREF/OUTER	J	213	239
180	*NO REFS*	XREF/OUTER	I	219	237
170	*NO REFS*	XREF/OUTER	VC	224	235
160	*NO REFS*	XREF	II	228	233
199	*NO REFS*	XREF/OUTER	II	258	335
192	*NO REFS*	XREF/EXIT	J	282	293
198	*NO REFS*		J	303	305
666	*NO REFS*		JI	317	332
1020	*NO REFS*	OUTER	I	350	356
1010	*NO REFS*		J	351	354
I/O	*NO REFS*	XREF/OUTER	J	367	367
I/O	*NO REFS*	XREF	I	367	367
I/O	*NO REFS*	XREF	I	372	372

--COMMON+EQUIVALENCE--(LO=M/A/R)

/A/ LEVEL = 1, SIZE = 10 WORDS CM

K1<1-2>	K2<3-4>	H1<5-6>	H2<7-8>	LA<9-10>

--I/O UNITS--(LO=M/A/R) R=READ, W=WRITE

-NAME---	PROPERTIES	REFERENCES-
TAPE12	BIN/SEQ	117/W 357/W 359/W 361/W
TAPE13	FMT/SEQ	24/W 26/W 34/W 60/W 61/W 73/W 74/W 75/W 79/W 80/W 95/W 96/W 107/W 363/W 365/W 367/W 368/W 370/W 372/W

--STATISTICS--

PROGRAM-UNIT LENGTH	1605728	= 57722
CM LABELLED COMMON LENGTH	128	= 10
CM STORAGE USED	714008	= 29440
COMPILE TIME	4.852 SECONDS	

```
      SUBROUTINE ALFA
        IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
        DOUBLE PRECISION K1,K2,NON,MOM,LA,IE,ID,IN,MAIS,MEN,ME,MD
        COMMON/A/K1,K2,H1,H2,LA

      MOM=1.0D0-K1-K2+K1*K2
      NON=1.0D0

      IF (MOM.LT.2.0D0) THEN
         LA=1.0D0
         RETURN
      ENDIF

      MER=1
      IE=0.0D0
      ID=.25D0
      MAIS=-500.0D0
      MEN=500.0D0

 6010 PE=IE
      PID=ID

 6020 IN=(PID-PE)/3.0D0
      ME=PE+IN
      MD=PID-IN
      FE=MER*(1.0D0-K1*ME**H1-K2*ME**H2+K1*K2*ME**(H2-H1))
      FD=MER*(1.0D0-K1*MD**H1-K2*MD**H2+K1*K2*MD**(H2-H1))
      IF (FE.GT.FD) THEN
         PID=MD
      ELSE
         PE=ME
      ENDIF
      IF(DABS((FE-FD)*2.0D0/(FE+FD)).GT..01D0.OR.IN.GT..1D0)GOTO 6020

      IF (MER.EQ.-1) GO TO 6030

      QMA=(FD+FE)/2.0D0
      MER=-1
      IF (QMA.GT.MAIS) MAIS=QMA
      GO TO 6010

 6030 QMI=-(FD+FE)/2.0D0
      IF (QMI.LT.MEN) MEN=QMI
      IF (ID.EQ.1.0D0) GO TO 6040
      IE=IE+.25D0
      ID=ID+.25D0
      MER=1
      GO TO 6010

 6040 IF (MAIS.GT.MOM) MAIS=MOM
      IF (MEN.LT.NON) MEN=NON

      IF (MAIS.LT.2.0D0) THEN
         LA=1.0D0
      ELSE
         LA=2.0D0/(MAIS+MEN)
         PRINT*,'ALFA =',LA
      ENDIF

      RETURN
      END
```

--VARIABLE MAP--(LO=M/A/R)
A=ARGLIST, C=CTRL OF DO, I=DATA INIT,
R=READ, S=STORE, U=I/O UNIT, W=WRITE

-NAME-	--ADDRESS--	-BLOCK-	----PROPERTIES----	-TYPE-	-SIZE-	--REFERENCES-							
FD	6048			DOUBLE	28/S	29	34	34	38	38	43	43	
FE	6028			DOUBLE	27/S	29	34/A	34	34/A	34	38	43	
H1	48	/A/		DOUBLE	5	27	27	28	28				
H2	68	/A/		DOUBLE	5	27	27	27	28	28	28		
ID	5618			DOUBLE	4	17/S	22	45	47	47/S			
IE	5578			DOUBLE	4	16/S	21	46	46/S				
IN	5638			DOUBLE	4	24/S	25	26	34				
KI	08	/A/		DOUBLE	4	5	7	7	27	27	28	28	
K2	28	/A/		DOUBLE	4	5	7	7	27	27	28	28	
LA	108	/A/		DOUBLE	4	5	11/S	55/S	57/S	58/W			
MAIS	5658			DOUBLE	4	18/S	40	40/S	51	51/S	54	57	57
MD	5738			DOUBLE	4	26/S	28	28	28	30			
ME	5718			DOUBLE	4	25/S	27	27	27	32			
MEN	5678			DOUBLE	4	19/S	44	44/S	52	52/S	57		
MER	5758			INTEGER	15/S	27	28	36	39/S	48/S			
MQM	5558			DOUBLE	4	7/S	10	51	51				
NQN	5538			DOUBLE	4	8/S	52	52					
PE	5768			DOUBLE	21/S	24	25	32/S					
PID	6008			DOUBLE	22/S	24	24	26	30/S				
QMA	6068			DOUBLE	38/S	40	40						
QMI	6108			DOUBLE	43/S	44	44						

--PROCEDURES--(LO=M/A/R)
D=DEF LINE OF STMT FUNC
A=ACTUAL ARGUMENT

-NAME-	-TYPE-	---ARGS---	-CLASS-	--REFERENCES-
DABS	DOUBLE	1	INTRINSIC	34

--STATEMENT LABELS--(LO=M/A/R)
A=ASSIGN STMT, D=DO STMT,
R=READ, W=WRITE

-LABEL-	--ADDRESS--	---PROPERTIES---	-DEF-	--REFERENCES-		
6010	668		21	41	49	
6020	768		24	34		
6030	3648		43	36		
6040	4308		51	45		

--ENTRY POINTS--(LO=M/A/R)
D=DEFINITION, R=RETURN

-NAME-	---ADDRESS--	--ARGS--	--REFERENCES-		
ALFA	48	0	2/D	12/R	61/R

--COMMON+EQUIVALENCE--(LO=M/A/R)

/A/ LEVEL = 1, SIZE = 10 WORDS CM
K1<1-2> K2<3-4> H1<5-6> H2<7-8> LA<9-10>

--STATISTICS--

PROGRAM-UNIT LENGTH	6128	= 394
CM LABELLED COMMON LENGTH	128	= 10
CM STORAGE USED	614008	= 25344
COMPILE TIME	0.862 SECONDS	

5.3 Exemplo de Inman

5.3.1 Escolha de medidas, construção das curvas e sua análise

Inman (1975) apresentou o caso dum terreno que foi posteriormente tomado como exemplo para o estudo comparativo de vários métodos de inversão por mínimos quadrados (Hoversten, Dey e Morrison, 1982). O terreno foi já apresentado na Figura IV-2A. É constituído por uma resistividade superficial de 10 Ωm até à profundidade de 10 m, seguida dum 2º. estrato de resistividade 390 Ωm e de 250 m de espessura e, finalmente, dum substrato de resistividade igual à superficial, 10 Ωm.

Nas Figuras IV-2, de B a N, foram já apresentadas curvas de parâmetros aparentes e dos respectivos desvios padrões aproximados, acompanhadas de curvas da condição do jacobiano, na solução, das diferentes optimizações. As medidas, 29 ao todo, tinham erro relativo aleatório inferior a .02 e a configuração simulada era a de Schlumberger, como será aliás em toda esta secção. As medidas foram obtidas com CACILDA e a primeira distância interelectródica considerada 10 m, de modo que é fácil ao leitor, conhecida a razão, 1.25, da progressão geométrica formada pelas sucessivas distâncias interelectródicas, reconstituir as distâncias de todas as medidas do lote. No entanto, sempre que o texto não fique com isso demasiado pesado, quando referirmos uma medida, indicaremos a distância interelectródica correspondente. Todos os lotes obtidos ou a obter nesta secção foram determinados correndo os programas com 1 para semente da função RANSET. Há uma diferença entre as curvas apresentadas na Figura IV-2 e as que o serão aqui. É que enquanto naquelas se tomaram como parâmetros as profundidades de separação entre resistividades, aqui tomam-se espessuras de estratos. A conversão não

oferece, porém, qualquer dificuldade.

Antes de mais, impõem-se alguns comentários sobre a escolha das medidas fixas utilizadas na definição das curvas da Figura IV-2, à luz do que ficou dito no capítulo anterior.

Assim, no que respeita às medidas fixas para o estudo do modelo de um estrato, foram escolhidas a 1.ª, de distância interelectródica 10 m, e a 5.ª, de cerca de 24.4 m. De facto, a observação da Figura IV-2C mostra que essa 5.ª medida define uma resistividade aparente homogénea que, marcadamente, já difere da obtida com a 1.ª medida. O acerto da escolha constata-se no bom condicionamento da maior parte do domínio das curvas de um estrato (Figura IV-2G).

Da análise das curvas de um estrato conclui-se imediatamente que o terreno não é satisfeito por esse modelo, como já, aliás, se concluía da curva homogénea. As curvas de 1 estrato eram, sob esse ponto de vista, desnecessárias. Mas mais conclusões podem ser logo retiradas. Assim, da Figura IV-2F pode-se afirmar que a resistividade do substrato (ou do estrato mais profundo abrangido pelo lote de medidas) tende para valores próximos dos da resistividade superficial, *10 Ωm*, como aliás a Figura IV-2B já permitia supor, e que a resistividade do 2º estrato andará *perto dos 400 Ωm*. Entretanto, da Figura IV-2E pode-se concluir que a espessura do 1º estrato será de *cerca de 10 m*.

O problema que se punha a seguir era o da escolha das medidas fixas para traçado das curvas de 2 estratos. Optou-se por conservar as duas primeiras iguais às utilizadas nas curvas de um estrato, isto é, as correspondentes a 10 m e a cerca de 24.4 m, a 1.ª e a 5.ª do lote.

A 4ª medida a utilizar deve, de forma geral, acusar nas curvas de um estrato a presença dos novos parâmetros, permitir a maior extensão de recuo possível e corresponder a um condicionamento razoável na optimização de um estrato (deve portanto, não apenas "ver" os novos parâmetros, mas, de certa maneira, ser já capaz de os "observar"). Escolheu-se utilizar a medida correspondente a cerca de 1355 m de distância interelectródica, a medida 23ª do lote, embora asmedidasde ordem 22 e até 21 pudessem também servir, conduzindo embora a optimizações mais penosas.

Finalmente, há que escolher a 3ª medida, que deve satisfazer alguns requisitos. Em particular, convém que já seja influenciada pelos novos parâmetros, para não agravar o problema do enviesamento, mas de forma a que não cause maus condicionamentos nas optimizações a fazer. Uma inspecção das curvas de um estrato, particularmente da Figura IV-2F, aponta, como medidas possíveis, as correspondentes às distâncias aproximadas de 1084 m, 867 m, 693 m, 555 m e 444 m, medidas de ordem, respectivamente, 22, 21, 20 , 19 e 18 do lote. Neste exemplo é possível confirmar a escolha dessas medidas na curva de resistividade aparente homogénea da Figura IV-2B. De facto, as medidas de ordem 18, 19, 20, 21 e 22 correspondem a uma zona de transição da curva, em que se "adivinha" a presença de novos parâmetros. A curva apresenta um comportamento rectilíneo crescente até à medida de ordem 17 e decrescente, rectilíneo e depois aproximadamente exponencial, a partir da medida de ordem 23. Optou-se por tomar para terceira medida, a medida nº 22, distância interelectródica 1084 m, que dá bom condicionamento e relativamente fraco enviesamento.

Resta-nos analisar as curvas de dois estratos. Em primeiro lugar, refira-se que a olho nu, isto é, sem instrumentação estatística, parece po-

der concluir-se que o terreno é de facto de 2 estratos. Eis mais um exemplo, que não é aliás de fácil inversão, onde a análise estatística rigorosa se revela desnecessária. A única curva que apresenta alguma variabilidade é a curva de resistividade aparente r_3, o parâmetro aliás mais mal definido quando se recua, pois o desvio padrão aproximado aumenta rapidamente (desde valores aceitáveis para as últimas medidas, a 5169 m e 4135 m, até valores intratáveis para distâncias menores). Por aqui se vê a dificuldade de interpretação destas estruturas de estratos intermédios muito resistivos. Entretanto a fraca variabilidade da curva é, de facto, um pouco acidental, o conjunto de medidas utilizadas foi particularmente feliz. A principal garantia de que o terreno é de dois estratos reside, mais do que na fraca variabilidade de r_3, na constância (ainda que também aí o conjunto das medidas tenha sido generoso) do conjunto dos outros parâmetros "profundos", r_2 e h_2.

De notar também a presença de erros de enviesamento, sobretudo nos parâmetros r_1 e h_1. No entanto, como se vê, o erro não perturba a análise das curvas, apenas fica indetectado e invalida concluir pela concordância do modelo com o terreno a partir, apenas, das curvas dos primeiros parâmetros, os mais influenciados por esse erro. A análise espectral (o leitor encontrará,, em apêndice, o resultado, "output", duma corrida de JOANA numa situação paralela deste exemplo) mostra, de facto, que os dois parâmetros mais "superficiais", em particular r_1, são maioritariamente determinados pelas medidas fixas.

5.3.2 Enviesamento e sua eliminação

No entanto, como referimos no capítulo anterior, pode esse enviesamento induzir em erro a análise das curvas. Na Figura V-2 apresentam-se cur-

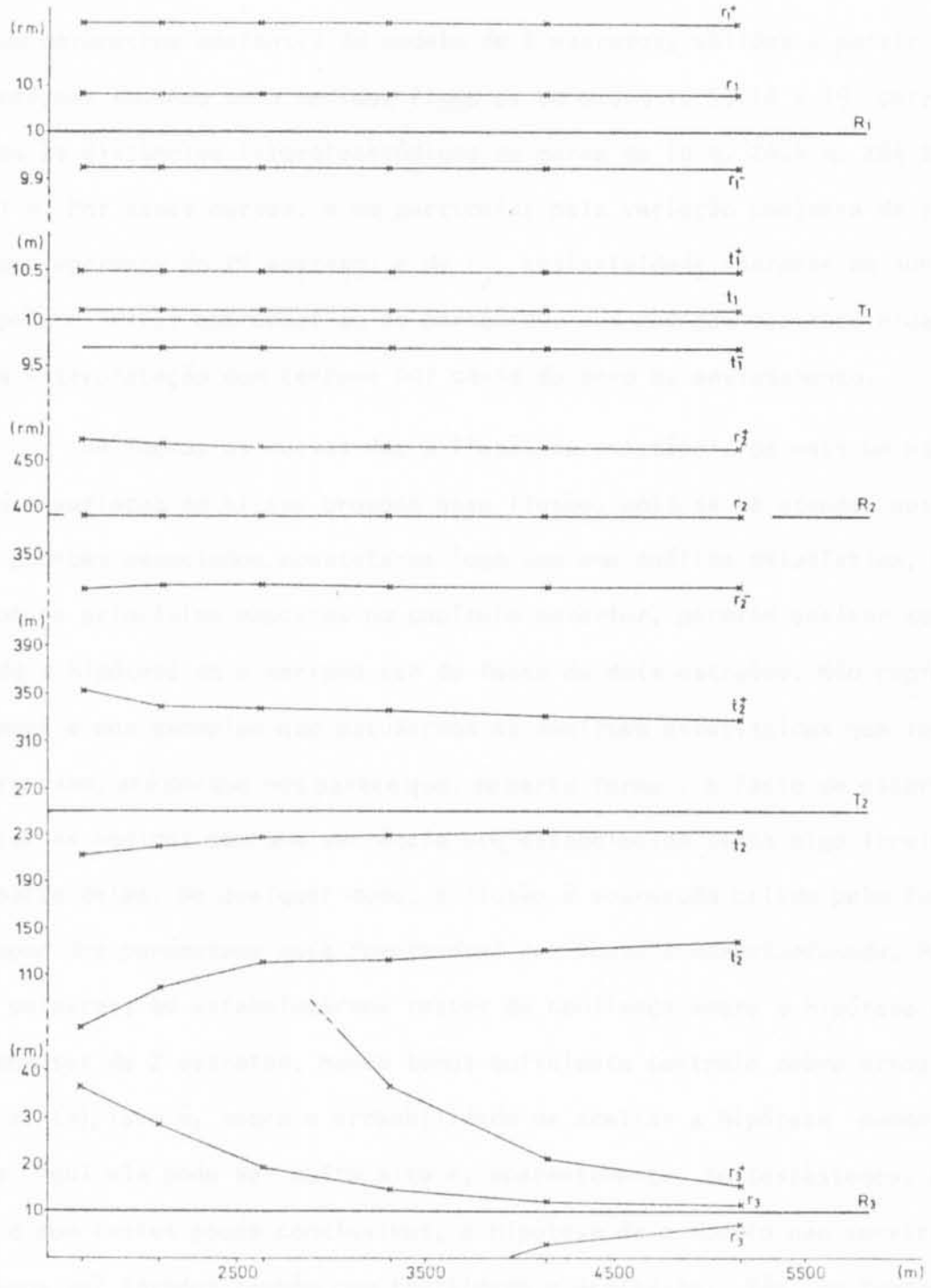


Figura V-2 - Curvas de dois estratos do exemplo de Inman com medidas fixas de ordem 1, 5, 16, 19

vas de parâmetros aparentes do modelo de 2 estratos, obtidas a partir do mesmo lote, mas tomando como medidas fixas as de ordem 1, 5, 16 e 19, correspondentes às distâncias interelectródicas de cerca de 10 m, 24.4 m, 284.2 m e 555.1 m. Por essas curvas, e em particular pela variação conjunta de t_2, espessura aparente do 2º estrato, e de r_3, resistividade aparente do substrato, pode o leitor aperceber-se do perigo de, com medidas mal escolhidas, errar a interpretação dum terreno por causa do erro de enviesamento.

De facto, as curvas dão a ilusão da existência de mais um estrato. Não é a variação em si que provoca essa ilusão, pois, se se atender aos desvios padrões associados, constata-se logo que uma análise estatística, de acordo com os princípios expostos no capítulo anterior, permite aceitar com facilidade a hipótese de o terreno ser de facto de dois estratos. Não reproduzimos aqui e nos exemplos que estudarmos as análises estatísticas que interessa levar a cabo, até porque nos parece que, de certa forma , o facto de estarmos a simular as medidas com uma variância pré-estabelecida torna algo irrelevante boa parte delas. De qualquer modo, a ilusão é sobretudo criada pelo facto da *variação dos parâmetros mais "profundos" ser 'suave" e correlacionada*. Por outras palavras, ao estabelecermos testes de confiança sobre a hipótese do terreno ser de 2 estratos, nunca temos suficiente controlo sobre erros de tipo II (β), isto é, sobre a probabilidade de aceitar a hipótese sendo ela falsa. Aqui ela pode ser muito alta e, aparentemente, se testássemos, ao invés, e com testes pouco conclusivos, a hipótese de o modelo não servir, poderíamos ser levados também com facilidade a aceitá-la. São, no fundo, os valores muito altos dos desvios padrões que diminuem as potências dos testes e refreiam assim a utilidade da análise estatística. Para cada curva de cada parâmetro, acrescentam-se, na figura, as curvas (índice + e -), obtidas somando ao parâmetro o desvio padrão aproximado segundo 4.8. Voltaremos ao

assunto.

A melhor forma de combater o enviesamento é, como vimos no capítulo anterior, alterar as medidas fixas ao longo do recuo. As curvas da Figura V-3 são obtidas a partir do mesmo lote de medidas, com medidas fixas diferentes para cada medida móvel. Para primeira medida fixa, tomou-se uma de entre as medidas de ordem 1, 2, 3, 4 e 5, com distâncias interelectródicas aproximadas 10 m, 12.5 m, 15.6 m, 19.5 m e 24.4 m. Para escolha da segunda medida, considerou-se o conjunto formado pelas medidas 5, 6, 7, 8, 9, a distâncias 24.4 m, 30.5 m, 38.1 m, 47.7 m e 59.6 m. A terceira medida definiu-se como uma de entre as medidas de ordem 18, 19 e 20, de distâncias 444 m, 555 m e 694 m. Finalmente, a última medida fixa retirou-se do grupo de medidas de ordem 21, 22 e 23, a distâncias 867.5 m, 1084 m e 1355 m. Especificamente, o recuo foi efectuado utilizando os conjuntos de medidas

2, 6, 18, 22, 29

4, 8, 19, 21, 28

5, 9, 18, 21, 27

3, 7, 20, 23, 26

1, 5, 20, 23, 25

2, 7, 20, 22, 24

As curvas mostram um elevado grau de correlação entre parâmetros, em especial entre r_2 e t_2. O coeficiente de correlação entre estes dois parâmetros, estimado a partir de 4.8 , oscila entre -.9797, para a medida móvel de ordem 29, e -.9587, para a medida 24. A análise espectral confirma também que, de facto, é o produto destes dois parâmetros que é determinado

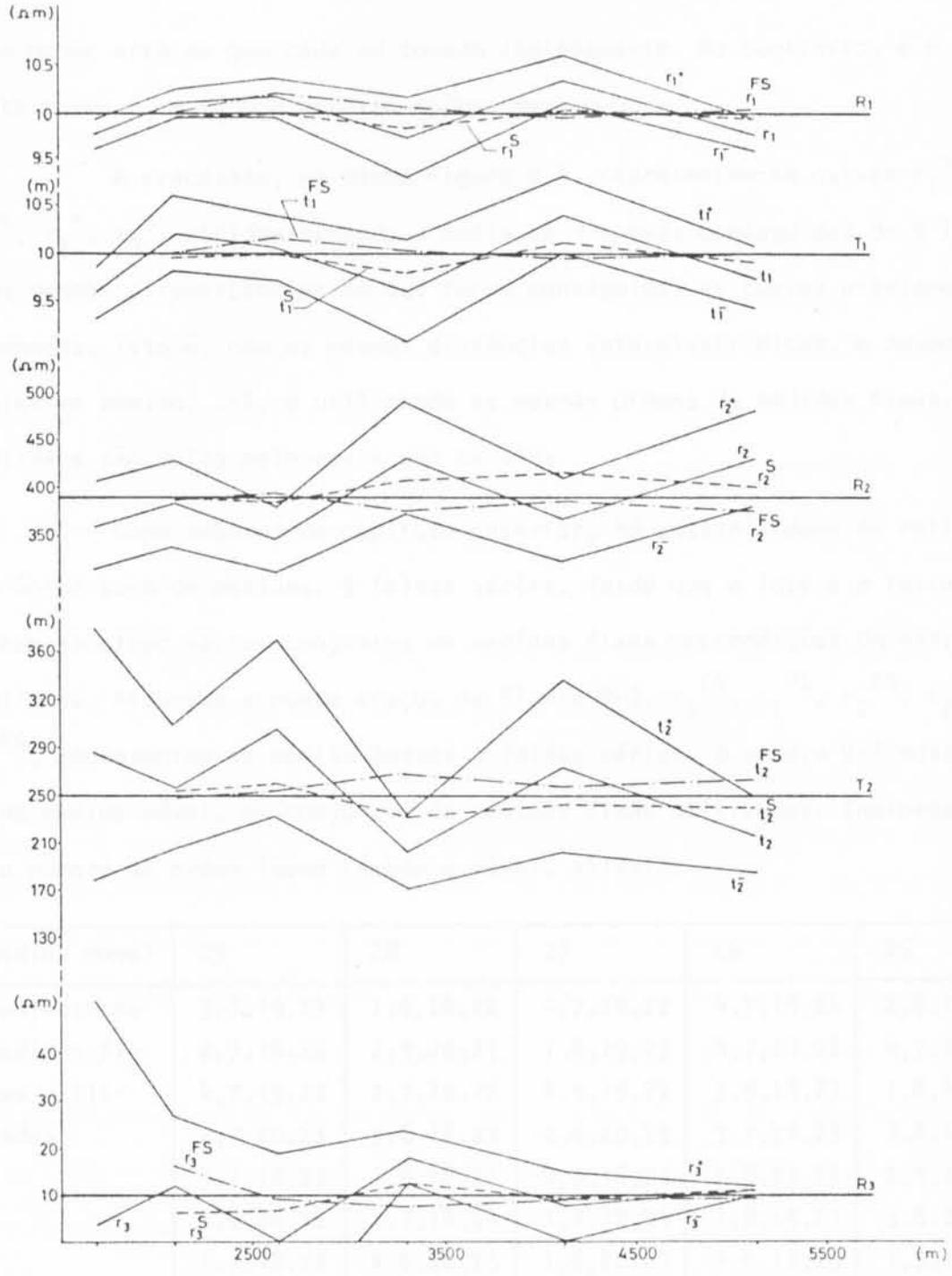


Figura V-3 - Curvas de dois estratos do exemplo de Inman, com eliminação do enviesamento, e desvios padrões

com menor erro do que cada um tomado isoladamente. Ao contrário, é o quociente entre r_1 e t_1 que resulta melhor determinado.

A tracejado, na mesma Figura V-3, representam-se curvas r_1^s, t_1^s, r_2^s, t_2^s, r_3^s, obtidas tirando a média de 9 curvas conseguidas de 9 lotes, nas mesmas circunstâncias em que foram conseguidas as curvas previamente desenhadas, isto é, com as mesmas distâncias interelectródicas, o mesmo erro relativo máximo, .02, e utilizando as mesmas ordens de medidas fixas. Os resultados são muito melhores e não há viés.

Como sabemos do capítulo anterior, há possibilidade de retirar, de um único lote de medidas, 9 falsas séries, desde que o lote e o terreno permitam escolher vários conjuntos de medidas fixas nas condições da estratégia definida. Ascurvas a ponto traço, na Figura V-3, r_1^{FS}, t_1^{FS}, r_2^{FS}, t_2^{FS}, r_3^{FS}, representam as médias dessas 9 falsas séries. O quadro V-1 mostra, para cada medida móvel, os conjuntos de medidas fixas utilizadas, indicadas pelo seu número de ordem (como também a móvel, aliás).

Medida móvel	29	28	27	26	25
Conjuntosde	3,8,19,23	1,6,18,22	4,7,20,22	4,7,18,24	2,8,19,24
medidas fi-	2,7,18,23	2,9,20,23	1,8,19,23	4,7,18,22	4,7,18,22
xas utili-	4,7,19,22	2,7,20,22	4,9,19,23	3,9,18,23	1,8,18,23
zadas	2,7,20,23	3,8,18,23	2,6,20,23	3,7,20,23	3,8,19,24
	3,7,18,23	1,8,18,22	2,9,18,23	1,8,20,22	2,9,19,23
	1,6,20,22	2,7,18,24	1,7,19,24	1,8,19,23	3,8,20,22
	1,7,18,23	4,6,20,23	1,6,20,23	1,6,18,23	1,9,19,24
	1,8,19,22	1,9,20,22	3,7,20,22	4,6,18,23	1,7,18,22
	1,9,20,23	1,9,19,22	4,6,18,22	4,9,19,23	2,8,18,24

Quadro V-1 - Conjuntos de medidas fixas para traçado de curvas de falsas séries no exemplo de Inman.

Os conjuntos são retirados do produto cartesiano:

$$(1,2,3,4) \times (6,7,8,9) \times (18,19,20) \times (22,23,24)$$

5.3.3 Distribuição pseudo normal e séries de medidas

As medidas utilizadas até aqui foram simuladas por CACILDA com distribuição uniforme e erro relativo inferior a .02. A análise estatística desenvolvida no capítulo anterior, centrada à volta da distribuição normal, de que se aproxima a distribuição dos erros de medidas realmente efectuadas no campo, é, no entanto, relativamente *robusta quanto ao desvio para uma distribuição uniforme*.

As simulações de que temos conhecimento noutros trabalhos são feitas, aliás, todas com distribuição uniforme de erros.

Entretanto as Figuras V-4 e V-5 referem-se a curvas de parâmetros aparentes obtidas a partir de medidas simuladas com distribuição pseudo-normal (100 números aleatórios somados) de desvio padrão .01. As distâncias interelectródicas consideradas foram as mesmas e as curvas foram traçadas com as medidas fixas de ordem 1,5,22 e 23, utilizadas já para gerar as curvas da Figura IV-2. Dispôs-se de 9 lotes de medidas a que corresponderiam, em princípio, outras tantas curvas na Figura V-4. Na verdade verificou-se que a série nº 6 conduziu, sistematicamente, ou a valores despropositados dos parâmetros ou a fracasso do algoritmo de optimização. A distribuição pseudo-normal permite de facto valores muito grandes do erro, pontualmente, e consequentemente combinações desastrosas de medidas. Recordemos que fracas-

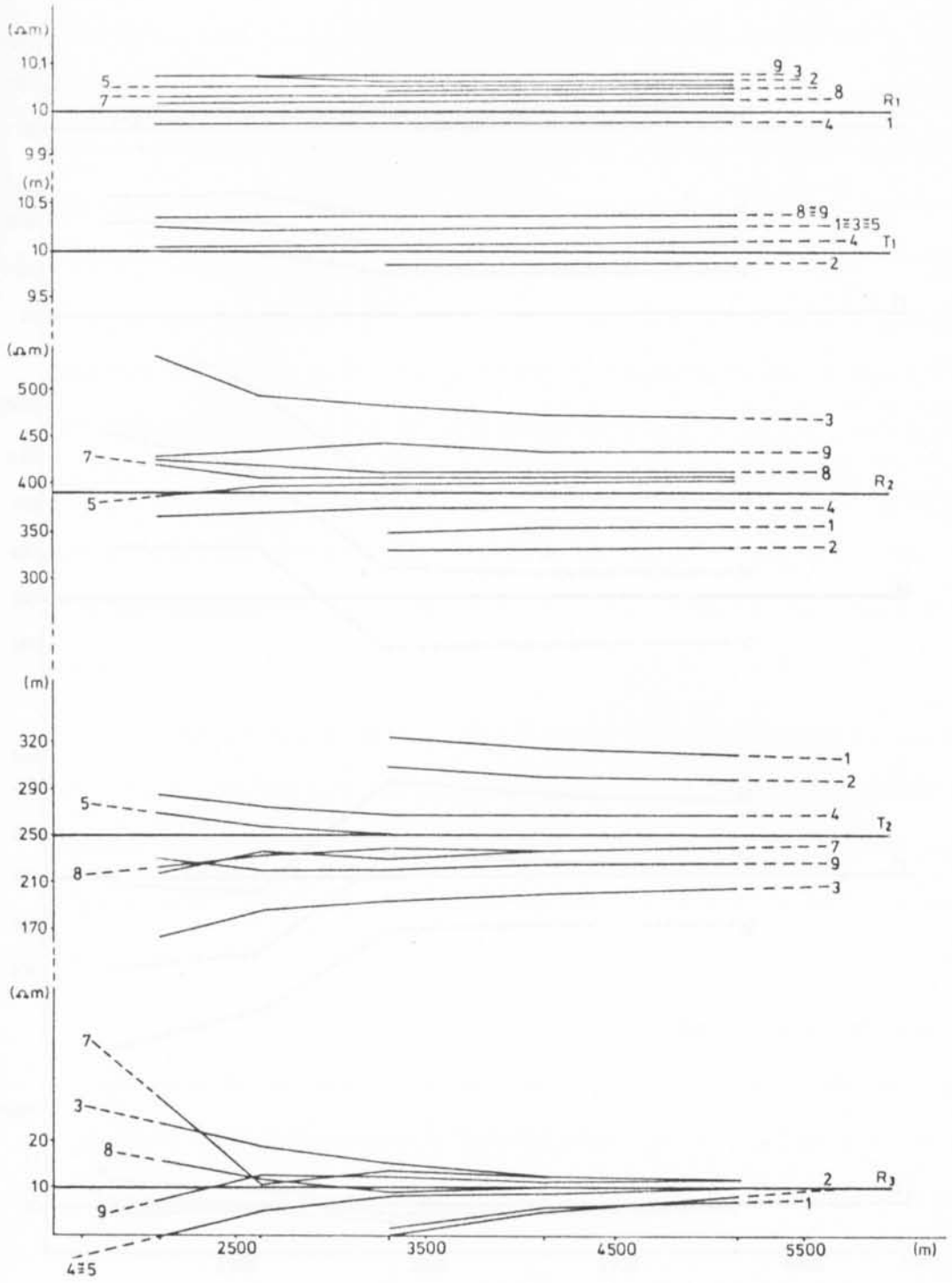


Figura V-4 - Curvas de dois estratos do exemplo de Inman a partir de 9 séries com distribuição pseudo normal dos erros de medida

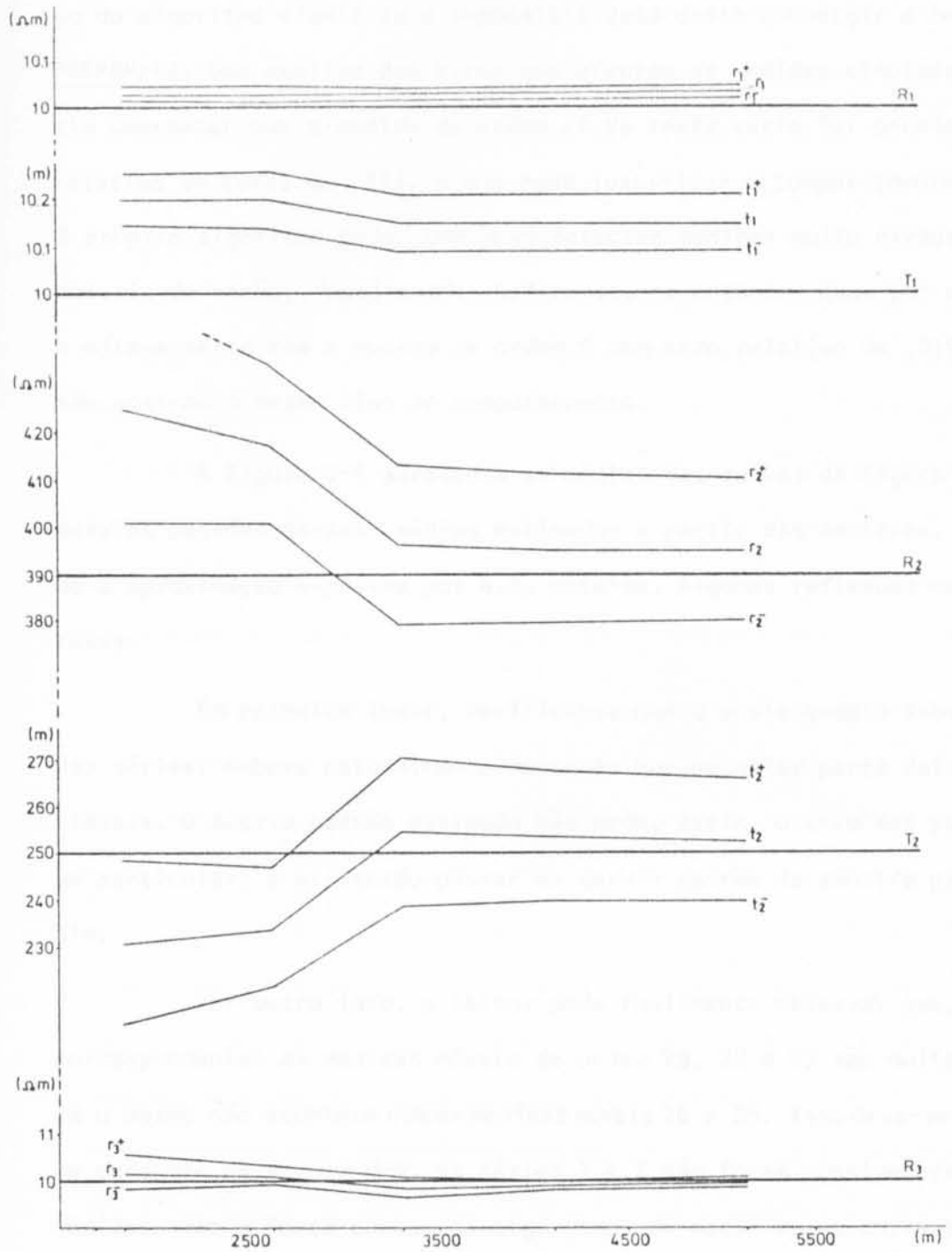


Figura V-5 - Média, e desvio padrão da média, das curvas da Figura V-4

so do algoritmo significa a impossibilidade deste convergir a menos de PREPOM/10. Uma análise dos erros que afectam as medidas simuladas permitiu constatar que a medida de ordem 22 da sexta série foi gerada com erro relativo de cerca de .013, o que pode justificar o comportamento da série. O próprio algoritmo pode, como se vê, detectar medidas muito erradas e, por maioria de razão, "outliers". Refira-se, no entanto, que, por exemplo, a oitava série tem a medida de ordem 5 com erro relativo de .015 e todavia não mostrou o mesmo tipo de comportamento.

A Figura V-5 apresenta as médias das curvas da Figura V-4 e os desvios padrões dessas médias estimados a partir das amostras, e não segundo a aproximação expressa por 4.8, note-se. Algumas reflexões merecem interesse.

Em primeiro lugar, verifica-se que o enviesamento subsiste na média das séries, embora naturalmente menor do que na maior parte das séries individuais. O desvio padrão estimado não mede, assim, o erro dos parâmetros e, em particular, é arriscado passar do desvio padrão da amostra para o da média.

Por outro lado, o leitor pode facilmente observar que, se as médias correspondentes às medidas móveis de ordem 29, 28 e 27 são muito razoáveis, já o mesmo não acontece com as medidas móveis 26 e 25. Isso deve-se a que, como se pode ver na Figura V-4, as séries 1 e 2 não foram consideradas para essas medidas. Não o foram porque os algoritmos de optimização correspondentes abortaram e a razão é compreensível olhando para as curvas 1 e 2 de r_3, tiradas dessas 2 séries. De facto, é a *exigência de todos os parâmetros serem positivos que acaba por introduzir um certo viés nas médias, quando o recuo obriga a desvios padrões muito altos. Se se permitem estimativas dos parâmetros muito*

elevadas mas não se toleram estimativas negativas, as médias sobem.

As curvas deviam ser completadas com medidas a maiores distâncias interelectródicas. Como já ficou dito, Inman (1975) recorreu, para o estudo deste terreno, a medidas da ordem dos 10000 m. A estrutura do terreno exige medidas a grandes distâncias. Já aliás Orellana (1972, p. 224), tão avesso à aplicação de regras empíricas na interpretação geoeléctrica, diz que, no caso de terrenos com um estrato intermédio espesso e muito resistivo, para se conseguir uma interpretação é preciso utilizar distâncias interelectródicas 10 vezes, ou mais, superiores à profundidade a que termina o estrato, ao seu muro.

5.3.4 Modelos com mais estratos do que o terreno real.

O que acontece quando se conclui, erradamente, que um determinado modelo, de n estratos, não representa o terreno, que é de facto de n estratos, e se tenta aplicar um modelo de n + 1 estratos? Na maior parte dos casos, o algoritmo dá sinal de que o modelo é complexo demais, ou reduzindo a zero a espessura de um estrato ou igualando as resistividades de dois estratos adjacentes. No entanto, o comportamento não é sistemático. Noutros casos, simplesmente aumenta a espessura do último estrato e simultaneamente a resistividade do substrato, acabando por abortar. É assim um pouco imprevisível, dependendo das medidas utilizadas, dos erros das medidas e da "guess" de partida. No entanto, duma maneira ou doutra, se o lote de medidas for suficiente para definir o terreno e se houver cuidado na inversão, *acaba por rejeitar o modelo*. Nalgumas situações aceita-o, nos casos em que as dúvidas levantadas no modelo anterior são grandes. *Mas essa ambiguidade não é culpa do método, mas do lote de que se dispõe*. Ao contrá-

rio, o método tende a detectar, ao exigir um critério de convergência a menos de um certo valor relativo (PREPOM/10), os casos ambíguos, como detecta os "outliers", e isso constitui uma sua vantagem.

5.3.5 Medidas com erro muito grande

Esta última característica permite, inclusive, abordar lotes de medidas com erro muito grande. As Figuras V-6, 7, 8 apresentam curvas de parâmetros aparentes obtidas a partir dum lote de medidas, às distâncias interelectródicas que têm vindo a ser consideradas, mas com erro relativo uniformemente distribuído inferior ou igual a .2, isto é, com um erro relativo que pode chegar a 20%. A curva de resistividade aparente homogénea apresenta em abcissas o logaritmo das distâncias interelectródicas. Ao longo das curvas vão indicados os números de ordem das medidas móveis utilizadas. Para traçar as curvas de um estrato tomaram-se como medidas fixas as medidas de ordem 1 e 8, a distâncias interelectródicas de 10 m e cerca de 47.7 m. Para as curvas de 2 estratos consideraram-se os seguintes conjuntos de medidas:

1, 8, 22, 24, 30

2, 9, 23, 26, 29

1, 8, 22, 24, 28

5, 13, 22, 23, 27

As médias dos parâmetros obtidas com estes conjuntos são:

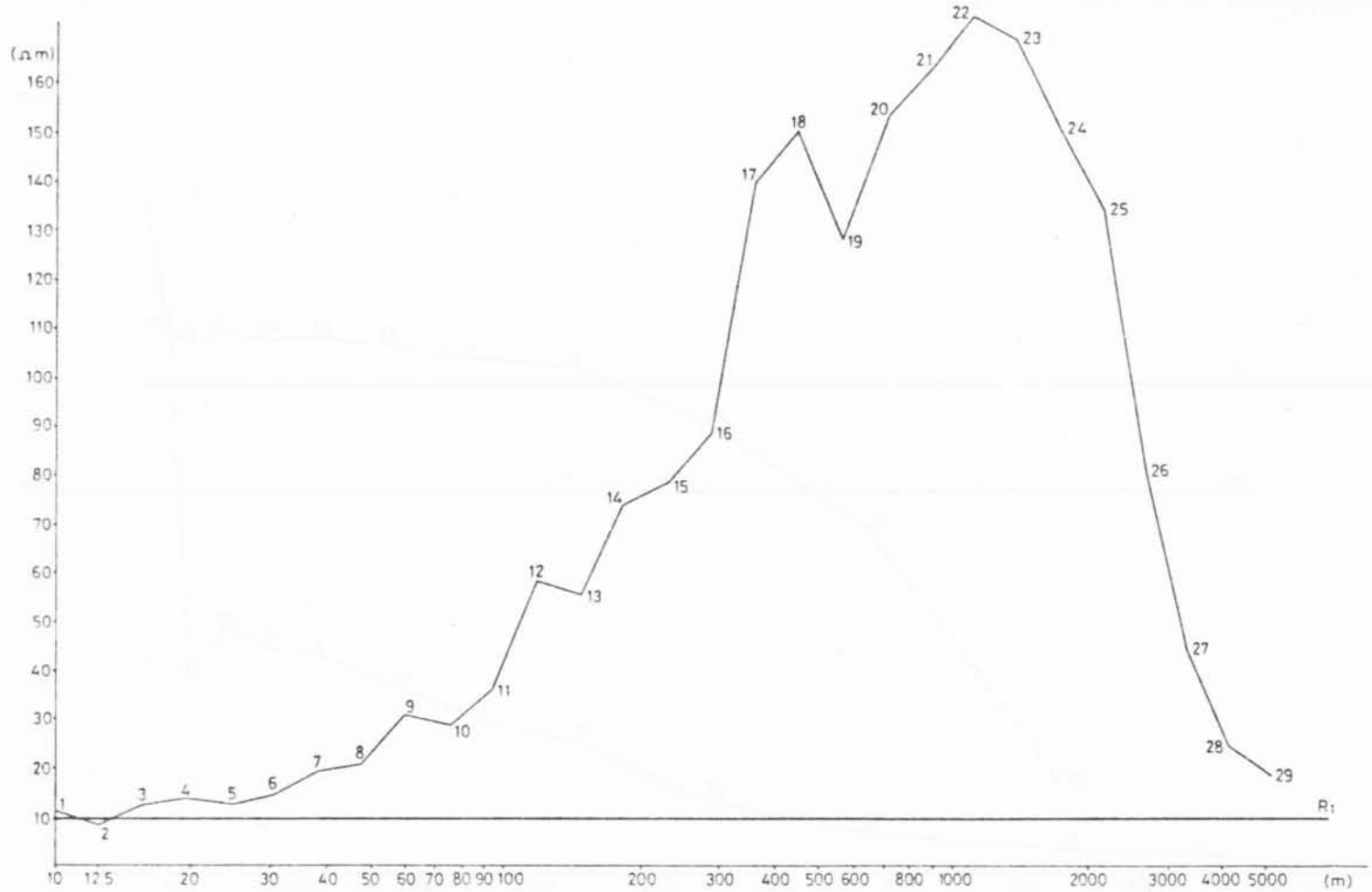


Figura V-6 - Curva de resistividade aparente homogênea do exemplo de Inman, medidas com erro inferior a .2

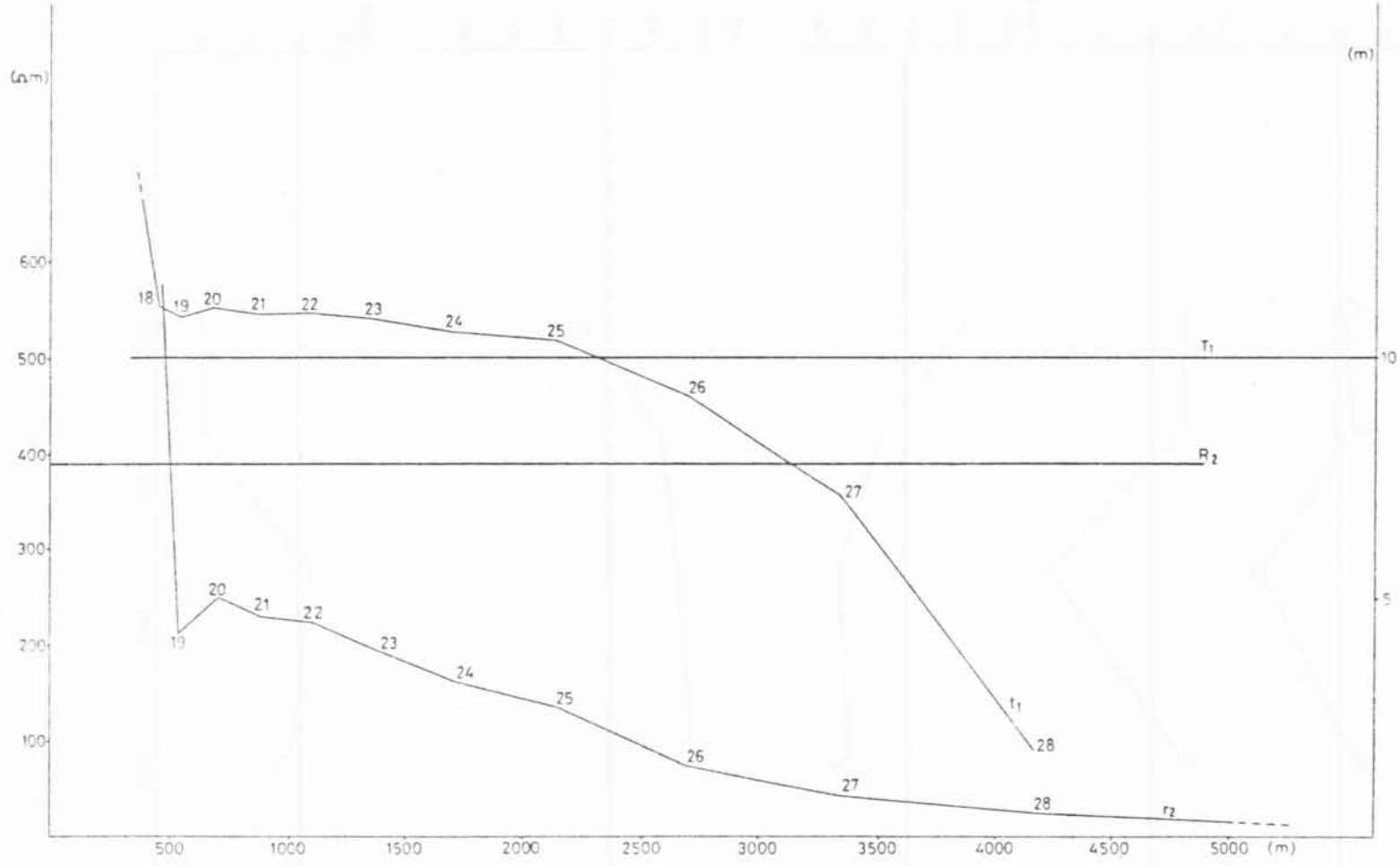


Figura V-7 - Curvas de h_1 e r_2 do modelo de um estrato para o exemplo de Inman, medidas com erro inferior a .2

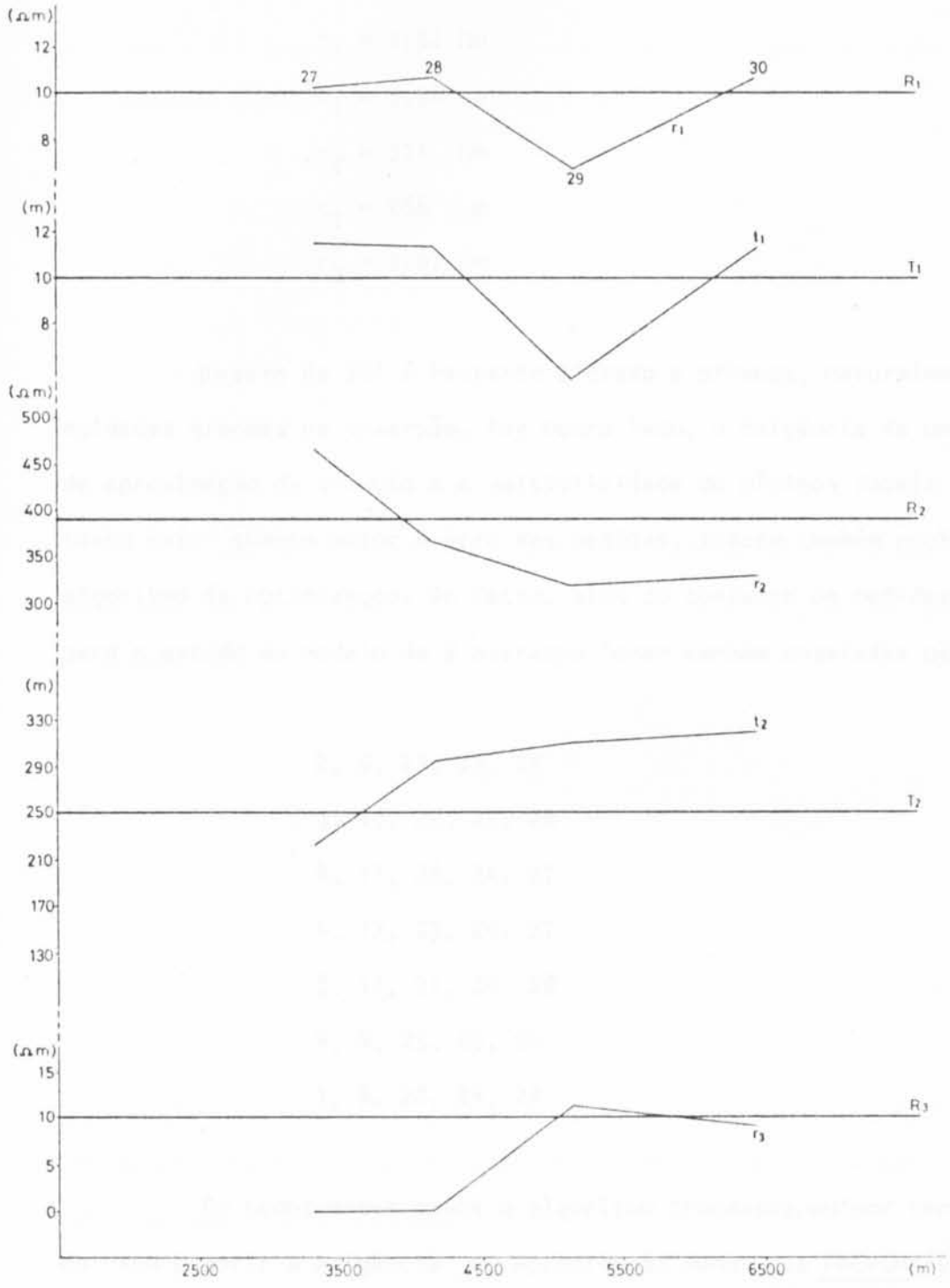


Figura V-8 - Curvas de parâmetros do modelo de dois estratos para o exemplo de Inman, medidas com erro inferior a .2

$r_1 = 9.62\ \Omega m$

$t_1 = 9.94\ m$

$r_2 = 371\ \Omega m$

$t_2 = 286\ m$

$r_3 = 5.07\ \Omega m$

Umerro de 20% é bastante elevado e provoca, naturalmente, dificuldades grandes na inversão. Por outro lado, a exigência de um certo grau de aproximação da solução e a multiplicidade de mínimos locais possíveis, tanto maior quanto maior o erro das medidas, trazem também problemas ao algoritmo de optimização. De facto, além do conjunto de medidas referidas, para o estudo do modelo de 2 estratos foram também ensaiados os conjuntos:

2, 9, 21, 23, 29

3, 10, 22, 25, 28

4, 11, 22, 24, 27

4, 12, 23, 24, 27

3, 11, 21, 24, 28

3, 8, 23, 25, 28

1, 8, 22, 24, 27

Em todos estes casos o algoritmo fracassou, ou por ter convergido sem cumprir a exigência de aproximação menor que PREPOM/10, ou por não ter conseguido progredir na suposta direcção de máximo decrescimento da função objectivo. No entanto, embora alguns dos valores obtidos, quando da paragem do algoritmo, fossem de facto muito afastados dos reais e aí *o algoritmo actuou como filtro*, o certo é que as médias de todos os conjun-

tos, bem e mal sucedidos, não são, apesar de tudo e considerando que r_3 é forçosamente difícil de definir, muito más:

$$r_1 = 10.7 \quad \Omega m$$
$$t_1 = 11.1 \quad m$$
$$r_2 = 377 \quad \Omega m$$
$$t_2 = 304 \quad m$$
$$r_3 = 2.45 \quad \Omega m$$

O que importa referir é o desvio padrão, obtido a partir da amostragem constituida pelas quatro optimizações com sucesso, para os cinco parâmetros,

$$\sigma_{r_1} = 1.9 \quad \Omega m$$
$$\sigma_{t_1} = 2.8 \quad m$$
$$\sigma_{r_2} = 65 \quad \Omega m$$
$$\sigma_{t_2} = 44 \quad m$$
$$\sigma_{r_3} = 6 \quad \Omega m$$

e, sobretudo, compará-lo com a média dos desvios padrões aproximados através da matriz de covariâncias aproximadas definida pelo estimador suposto linear (segundo 4.8):

$$\sigma_{r_1} = 3.1 \quad \Omega m$$
$$\sigma_{t_1} = 28 \quad m$$
$$\sigma_{r_2} = 1470 \quad \Omega m$$
$$\sigma_{t_2} = 1108 \quad m$$

$$\sigma_{r_3} = 11 \Omega m$$

o que mostra que *não é possível, aqui, admitir a hipótese de linearização das potências em torno da solução e numa região da ordem de grandeza do desvio padrão real das estimativas, e portanto 4.8 não tem validade.* Um método que não admite uma qualquer forma de amostragem não pode dar uma indicação, ainda que mínima, sobre o grau de erro com que se obtêm os parâmetros, quando o erro das medidas se torna grande.

É também interessante referir, até porque a amostragem de quatro casos de sucesso é pequena, os desvios padrões obtidos com a amostra dos sete casos de insucesso referidos:

$$\sigma_{r_1} = 2.6 \quad \Omega m$$
$$\sigma_{t_1} = 3.5 \quad m$$
$$\sigma_{r_2} = 92 \quad \Omega m$$
$$\sigma_{t_2} = 101 \quad m$$

(σ_{r_3} não tem significado, porque quase todos os insucessos foram obtidos com $r_3 \simeq 0$).

5.3.6 Hipóteses iniciais e avaliações da função objectivo

Uma outra característica de interesse do algoritmo será a sua maior ou menor robustez perante hipóteses iniciais, as "guesses" dos parâmetros, muito rudimentares, isto é, muito afastadasdos seus valores reais (e que nunca poderiam ocorrer a quem tivesse ensaiado o modelo de um estrato, note-se). Na Figura V-9 apresenta-se o número de avaliações da função

objectivo precisas para atingir, a partir de diferentes hipóteses iniciais, a solução (r_1 = 10.14, t_1 = 10.00, r_2 = 400.05, t_2 = 245.07, r_3 = = 9.78) da optimização efectuada sobre as medidas de ordem 3, 9, 17, 24 e 27 do lote de erro relativo uniformemente distribuído inferior a .02. Nenhum valor do parâmetro de Marquardt foi imposto exteriormente ao algoritmo.

Hipóteses iniciais	r_1	t_1	r_2	t_2	r_3	Número de avaliações de função objectivo
	5	20	50	75	5	31
	100	10	30	200	100	39
	5	10	250	250	2500	90
	8	15	500	150	5	18

Figura V-9 - Número de avaliações da função objectivo e hipóteses iniciais de partida no exemplo de Inman

O número de avaliações da função objectivo apresentado, e calculado em JOANA, merece alguns comentários. O algoritmo, como vimos, começa por, a partir da hipótese inicial e avaliando aí a função objectivo (soma dos quadrados dos resíduos), bem como as derivadas das potências, sugerir um passo para a iteração. Depois ensaia esse passo e verifica se a função objectivo diminui. Se isso não acontecer, vai reduzindo o passo e avaliando sempre a função objectivo até obter essa diminuição. Nesse momento, dá por encerrada a iteração. As sucessivas avaliações não implicam cálculo de derivadas, pois o passo é sempre o passo inicial, só que reduzido. Quando inicia nova iteração, o algoritmo vai calcular no mesmo ponto, para os mesmos valores dos parâmetros, a função objectivo que já tinha calculado, mas

agora acompanha esse cálculo com o das derivadas.

Ora, para não falar da possibilidade de utilizar, em certas circunstâncias, *as derivadas da iteração anterior*, há uma alternativa a este procedimento. Seria a de, sempre que se calcula a função objectivo, calcular também as derivadas, de forma a que, quando se fosse começar uma nova iteração, não se necessitasse repetir a avaliação. Convém, aliás, referir que o cálculo das derivadas não é, pelo menos até terrenos de dois estratos, um peso suplementar muito grande, quando se calculam as potências (a muito maior precisão) para a função objectivo. Mas tem o seu peso, apesar de tudo. Uma terceira hipótese existe: a de reformular o algoritmo de modo a que quando se iniciasse a iteração ele só precisasse de calcular as derivadas. No entanto, no esquema de cálculo utilizado, essa hipótese não é fácil de implementar sem gastos excessivos em memória para armazenamento de matrizes. Restam-nos as duas primeiras alternativas. A opção entre uma e outra depende, como é fácil de compreender, do número de reduções que o algoritmo necessita efectuar sobre o passo, durante cada iteração. Se for muito alto, então a primeira alternativa, a implementada efectivamente, é mais económica; se, ao contrário, as hipóteses iniciais forem garantidamente suaves, o condicionamento ao longo da optimização razoável, a função objectivo quase quadrática, por outras palavras, se não fosse, quase, necessário recorrer ao método de Marquardt, bastando adoptar mais simplesmente a direcção e o passo de Newton - Gauss, então a 2.ª alternativa seria a mais interessante. É possível, também, dar "inteligência" ao algoritmo para optar, ele próprio, entre uma e outra alternativa, conforme o curso corrente ou previsível dos acontecimentos.

5.3.7 Comparação com outros métodos de mínimos quadrados

O método de inversão de um terreno estratificado defendido neste trabalho não pode facilmente, em termos de "performance", ser comparado com outros métodos de mínimos quadrados existentes, em particular com aqueles que trabalham com a função Kernel (ou característica ou nuclear, consoante os autores) da resistividade homogénea. Como sabemos, Hoversten, Dey e Morrison (1982) publicaram um trabalho em que se comparam as características de alguns métodos, todos primos do método de Inman (1975). No geral, como vimos (Capítulo II), são métodos que utilizam globalmente o lote de medidas para efectuar a inversão e testes de bondade de ajuste para decidir de qual o modelo que melhor se adapta ao terreno. As comparações publicadas não versam o problema de decisão sobre a validade do modelo; partem sempre da hipótese de que o terreno é de dois estratos.

No entanto, justamente aí, há que referir que o nosso método permite alguns progressos. De facto, para decidir da validade do modelo de dois estratos e da não validade do modelo de um, os métodos de inversão global têm que se aplicar integralmente com um modelo e depois com outro, e só a diferença na qualidade de ajuste dita, depois, a decisão. Naturalmente que neste caso do exemplo de Inman basta olhar para a curva de resistividade aparente homogénea para verificar que o modelo de um estrato de facto não serve, mas nem sempre é esse o caso. E a exigência de utilizar o método integralmente, com todas as medidas do lote, torna-se mais grave se o terreno for não de 2 mas de mais estratos. É certo que há uma forma de controlo para se saber se a melhor qualidade de ajuste possível foi ou não atingida com um determinado modelo, baseada na comparação entre o desvio padrão dos erros das medidas suposto e o mesmo desvio padrão estimado a partir dos

resíduos (4.6). No entanto, sem um bom palpite, mesmo essa forma de controlo não minora o esforço necessário.

Ao contrário, a nós, para decidir rejeitar um modelo, *pode-nos bastar encontrar duas optimizações que justifiquem essa rejeição*, optimizações que utilizam apenas tantas medidas quantos os parâmetros do modelo. Assim, no caso presente, que sabemos ser, todavia, particularmente favorável nesse aspecto, basta-nos olhar para a Figura IV-2F para constatarmos que praticamente quaisquer dois pontos da curva aí representada indicam claramente a rejeição do modelo. Aliás, a curva, e outrasdo mesmo modelo, quase garantem já que o terreno é de 2 e não de 3 estratos, facto que as curvas de resistividade homogénea não permitem tão claramente supor.

Mas procuremos comparar o nosso método com os apresentados em Hoversten et al. (1982), na hipótese, como dissemos, de se saber que o terreno é de facto de 2 estratos. Assim, *no quadro dessa hipótese, não nos preocuparemos com formas de recuo necessário a essa conclusão , no nosso método*. Então, do lote de medidas, já mencionado no capítulo anterior e ao longo deste, de erro relativo uniformemente distribuído (tal como no trabalho daqueles autores) inferior a .02 (lá, .01), foram utilizados os seguintes conjuntos de medidas, 9 ao todo:

3, 9, 17, 24, 27

2, 12, 19, 25, 30

4, 11, 18, 23, 29

5, 10, 21, 26, 30

1, 13, 20, 26, 27

2, 11, 17, 25, 29

5, 10, 20, 23, 28

3, 13, 21, 24, 28

1, 12, 18, 24, 30

A não obrigatoriedade de recuo permitiu utilizar, para 5ª. medida, apenas as medidas de ordem 27, 28, 29, 30 e, por outro lado, utilizar para 4ª. medida, medidas de ordem elevada, por exemplo 26. *O conjunto é apenas aparentemente aleatório*. Na verdade houve a preocupação de não repetir combinações de medidas. Interessa sobretudo não repetir combinações de medidas quando decisivas para a definição de um particular parâmetro. Por outras palavras, para evitar o enviesamento no parâmetro r_1, por exemplo, não importa fixar a última medida, a 5ª., mas é forçoso variar as duas primeiras, pelo menos. A análise espectral permite, em caso de dúvida, confirmar a escolha das medidas e o acerto das combinações escolhidas de forma a impedir o enviesamento de qualquer parâmetro. Em anexo, o leitor encontrará a saída, "output", do programa JOANA correspondente a estes conjuntos de medidas, saída escrita no ficheiro TAPE 5.

As optimizações, com aqueles 9 jogos de medidas, demoraram em conjunto e no Cyber 170-720, 1369 s C.P.U. e a memória ocupada foi inferior em pouco a 75.5 K words de 60 bits. Deve notar-se que as séries envolvidas no cálculo de potências e derivadas *são de convergência particularmente lenta* porque quer K_1 quer K_2 são, em valor absoluto, muito próximos de 1. De facto, a média das optimizações de 2 estratos que fizemos (não contando com os ensaios feitos para determinar o número de avaliações necessárias para convergência a partir de hipóteses iniciais grosseiras, ensaios que atrás relatámos), para todos os terrenos que tratámos, foi de

cerca de 40 s C.P.U. (ou 360 s para 9 optimizações). Curiosamente, a média é, sensivelmente, a mesma quando o erro é .02 ou .04, os dois níveis de erro com que maioritariamente trabalhámos. Isso deve-se a que, se, por um lado, as séries a .04 são mais rapidamente calculadas, por outro, cada optimização dá solução mais afastada da anterior. Saliente-se que a grande maioria das optimizações efectuadas utilizou como hipótese inicial a solução da optimização imediatamente acabada de fazer. A diminuição da média só se faz sentir quando o erro permitido é grande. As optimizações de 1 estrato são, como seria de esperar, muitíssimo mais rápidas, a média de cada uma rondando os 700 ms CPU. O traçado das curvas de um estrato do exemplo de Inman, reproduzidas na Figura IV-2, demorou pouco mais de 29 s CPU.

Quanto à memória ocupada pela corrida de JOANA, recorde-se que o programa não pretende estar optimizado sob esse aspecto, nem aliás quanto à velocidade de execução. No entanto, mesmo assim, pode já, segundo cremos, correr em certos minicomputadores pessoais expandidos, sobretudo se for reescrito limitando os segmentos em dupla precisão que, embora de relativamente pouca influência em sistemas como este com que trabalhámos, se revela muito onerosa naquele tipo de máquinas. Todavia, o programa exige um trabalho de condensação para ser corrido nos sistemas pessoais normais e comercializados.

Convirá ainda referir, mais uma vez, que certas simplificações, e grandes, que o facto da configuração ser de Schlumberger permitiria efectuar no cálculo das séries envolvidas (particularmente por apresentarem apenas, em geral, uma única função de Bessel), não foram efectuadas,

para, como se disse, não retirar generalidade ao programa.

Como o leitor poderá constatar analisando o "output" em anexo, neste exemplo e com estas medidas, os valores finais dos parâmetros de cada optimização são razoavelmente aproximados a menos iterações do que as utilizadas. Parando a optimização logo que as aproximações relativas entre potências medidas e calculadas baixem de PREPOM/10, independentemente do preenchimento das condições de mínimo, o tempo de execução do programa reduz-se a 723 s C.P.U. e o número de avaliações da função objectivo a 43, sem que, em nenhuma optimização, o valor de qualquer parâmetro difira do valor final correspondente, assinalado no "output", mais do que 1.5%, e a maior parte das vezes difere muito menos. Falámos, no entanto, já mais do que uma vez, dos perigos que esta tentadora simplificação levanta.

Não é possível comparar, nos aspectos de velocidade de execução e de dispêndio de memória, o nosso programa com os desenvolvidos para implementação de métodos globais como o de Inman, por não dispormos, até ao momento, nem desses programas, nem de dados sobre as suas características.

As médias das 9 optimizações foram:

$$r_1 = 10.07\ \Omega m, \quad t_1 = 10.08\ m, \quad r_2 = 396.3\ \Omega m, \quad t_2 = 250.8\ m$$

$$r_3 = 9.45\ \Omega m$$

Os desvios médios quadráticos estimados a partir das 9 amostras das estimativas são:

$$\sigma_{r_1} = .22\ \Omega m, \quad \sigma_{t_1} = .38\ m, \quad \sigma_{r_2} = 41\ \Omega m, \quad \sigma_{t_2} = 27\ m$$

$$\sigma_{r_3} = 1.0\ \Omega m$$

Entretanto, as médias dos 9 desvios padrões aproximados obtidos segundo 4.8 são

$$\sigma_{r_1} = .22\ \Omega m, \quad \sigma_{t_1} = .37\ m, \quad \sigma_{r_2} = 43\ \Omega m, \quad \sigma_{t_2} = 30\ m$$

$$\sigma_{r_3} = 2.0\ \Omega m,$$

portanto muito próximas dos estimados.

Dos desvios padrões estimados das amostras obtêm-se os desvios padrões estimados das médias

$$\sigma_{r_{1m}} = .07\ \Omega m, \quad \sigma_{t_{1m}} = .12\ m, \quad \sigma_{r_{2m}} = 14\ \Omega m, \quad \sigma_{t_{2m}} = 9.1\ m$$

$$\sigma_{r_{3m}} = .34\ \Omega m$$

Repare-se que os desvios de r_2 e t_2 são exagerados, *o que se justifica pela forte correlação entre eles*, enquanto que o de r_3 é inadequado, porque r_3 é tão mal definido que a amostra resulta pouco conclusiva. Curiosamente, o desvio padrão da média de 9 amostras obtido a partir da média dos desvios padrões aproximados segundo 4.8, 2 Ωm, é .67 Ωm, mais realista.

As medidas simuladas que constituem o lote foram geradas por CACILDA em 25 s, com cerca de 66.4 K words de memória ocupada na corrida

do programa.

A hipótese inicial utilizada foi a que Inman (1975) propôs. Sabemos, no entanto, que, traçadas as curvas de parâmetros aparentes de um estrato, era fácil, o que, como dissemos já, é uma vantagem quando não se dispõe dum bom palpite, escolher uma hipótese inicial mais próxima dos parâmetros reais, pelo menos para alguns deles.

No conjunto das 9 optimizações, o algoritmo foi obrigado a calcular 153 vezes a função objectivo. Se se utilizasse a alternativa de calcular sempre as derivadas de modo a poder, em qualquer momento, começar uma iteração sem recalcular a função objectivo, então contar-se-iam 85 avaliações dessa função objectivo. Hoversten et al. (1982) relatam 29 avaliações no método de Inman, 43 na variante que utiliza o método da espiral e 100 na variante de Peckham. Abordam também outras variantes, manifestamente menos interessantes para o problema em causa. Convém, no entanto, referir que não são avaliações nas mesmas condições das feitas aqui. Na verdade (Inman (1975), a *inversão global que forneceu aqueles resultados assenta num total de 22 medidas e de cada vez que se avalia a função objectivo calculam-se 22 potências, acompanhadas das derivadas. No nosso método, cada avaliação pressupõe o cálculo de 5 potências.* A mesma diferença surge nas dimensões de muitas matrizes que os algoritmos necessariamente utilizam na inversão.

Quanto aos valores dos parâmetros atingidos no método de Inman,

$$r_1 = 9.99\ \Omega m,\quad t_1 = 9.96\ m,\quad r_2 = 382.8\ \Omega m,\quad t_2 = 254.7\ m,$$

$$r_3 = 9.99\ \Omega m,$$

na variante de Peckham,

$$r_1 = 9.99\ \Omega m,\quad t_1 = 9.98\ m,\quad r_2 = 385.2\ \Omega m,\quad t_2 = 252.3\ m,$$

$$r_3 = 10.0\ \Omega m,$$

e na variante de espiral de Jones,

$$r_1 = 10.00\ \Omega m,\quad t_1 = 9.89\ m,\quad r_2 = 380.3\ \Omega m,\quad t_2 = 256.4\ m,$$

$$r_3 = 10.0\ \Omega m$$

verifica-se que não se afastam muito, em termos de precisão relativa, dos por nós obtidos, exceptuando r_3 que vem melhor determinado nos métodos de inversão global.

Note-se, entretanto, que o próprio Inman (1975) apresentou resultados do seu método global diferentes dos obtidos por Hoversten et al. (1982),

$$r_1 = 10\ \Omega m,\quad t_1 = 10.1\ m,\quad r_2 = 398\ \Omega m,\quad t_2 = 245\ m,$$

$$r_3 = 10\ \Omega m,$$

com desvios padrões

$$\sigma_{r_1} = .06\ \Omega m,\quad \sigma_{t_1} = .09\ m,\quad \sigma_{r_2} = 8.2\ \Omega m,\quad \sigma_{t_2} = 4.9\ m$$

$$\sigma_{r_3} = .05\ \Omega m$$

A principal razão da fraca definição que obtivemos de r_3 reside em nos termos cingido à máxima distância interelectródica de 6460 m. Como já dissemos, Inman no seu trabalho (1975) utilizou uma medida a cerca de 10000 m e outra a cerca de 8000 m. E Hoversten et al. (1982), além dessas, consideraram mais 6 medidas, a última das quais a quase 200 km. Preferimos nãoutilizar medidas de tão grande distância interelectródica, pelas dificuldades praticamente insuperáveis que levantam, se realmente efectuadas no campo, e que não justificam o acréscimo de precisão, numa sondagem a tão baixa profundidade.

Repita-se, por outro lado, e uma vez mais, que não constitui vocação exclusiva do método aqui defendido a comparação com os métodos a que temos vindo a chamar globais. Trata-se muito mais de, a partir da introdução duma conceptologia nova, abrir espaço para o desenvolvimento de outros novos métodos que, inclusivamente, possam abordar modelos mais complexos a partir de resultados obtidos com modelos mais simples, *mesmo em terrenos não estratificados, a duas ou três dimensões*. Trata-se também de controlar muito mais de perto a inversão, quer na forma como as "guesses" vão sendo apresentadas ao algoritmo, analisados os resultados que vão sendo obtidos com modelos cada vez mais complexos, quer nos processos de decisão sobre qual o modelo a aceitar como válido, quer na rejeição de medidas anormalmente erradas, quer até na possibilidade de requisitar, ou não, mais medidas úteis, a determinada distância interelectródica.

5.4 Outros exemplos

5.4.1 Introdução

Escolhemos, para demonstração suplementar do método, quatro exemplos recolhidos na literatura existente. Todos os exemplos são de terrenos de dois estratos, de interpretação mais difícil que os de um estrato e, por isso, suficientemente ilustrativos do método. Procurámos seleccionar os exemplos de modo a que, contando com o exemplo de Inman já estudado, ficassem representados todos os quatro grandes tipos de terrenos de dois estratos, segundo a classificação soviética (Orellana, 1972 , p. 144), o tipo H ($R_1 > R_2 < R_3$), o tipo K ($R_1 < R_2 > R_3$), o tipo Q ($R_1 > R_2 > R_3$) e o tipo A ($R_1 < R_2 < R_3$). Como veremos a propósito de cada exemplo, todos os terrenos apresentam, por uma razão ou outra, dificuldades de interpretação; pretende-se assim, ainda que não exaustivamente, testar o método em situações reconhecidamente difíceis. O erro simulado para as medidas foi de .04, considerado realista em face dos valores normalmente aceites (ver secção 4.3), como valor máximo duma distribuição uniforme, também usualmente empregue neste género de testes. Foi também decidido supor recolhido, sobre todos os terrenos, o mesmo lote de medidas, 30 ao todo, menor distância interelectródica 10 m, razão da progressão geométrica das distâncias 1.25. Como se verá, se nalguns casos o lote é excessivo ou mal dimensionado, noutros revela-se insuficiente. Pareceu-nos, no entanto, ser um lote constituído por medidas aceitáveis e pareceu-nos também útil abordar o problema do terreno, qualquer deles, *da posição de quem não dispõe de informação prévia suficiente sobre a sua estrutura para decidir melhor das medidas a tomar.*

Em alguns dos exemplos vimo-nos obrigados a recorrer a séries ou lotes de medidas para melhor precisar a interpretação. Naturalmente, poderíamos recorrer a falsas séries, como preconizámos no capítulo anterior, ainda que a utilização de verdadeiras séries torne cada optimização independente do erro particular de cada medida móvel (no fundo, apenas o reduz), ao contrário das falsas séries. No entanto, as falsas séries, como vimos, resolviam o problema, mesmo que com menor precisão na determinação dos parâmetros mais "profundos". Utilizamos lotes diferentes porque, sem esforço (as medidas são simuladas e não recolhidas no campo), podemos comparar os resultados de cada lote individualmente, embora não os tenhamos reproduzido, e porque o próprio programa JOANA está especificamente adaptado a essa utilização.

Nas curvas que serão traçadas reservamos, como temos feito até aqui, em caso de dúvida, letras pequenas para parâmetros aparentes e letras grandes para parâmetros reais. As letras que referem parâmetros aparentes terão, pelo menos, dois índices: o inferior, que identifica o estrato ou substrato a que o parâmetro se refere; e o superior, em caracteres romanos, que indica o modelo através do qual o parâmetro foi calculado. Assim, por exemplo, r_2^{II} refere-se à resistividade aparente do 2º estrato obtida com o modelo de 2 estratos, enquanto que r_2^{I} se refere à resistividade aparente do mesmo estrato, agora substrato, calculada por aplicação às medidas do modelo de um estrato. As médias dos parâmetros obtidas dum conjunto de lotes, quando for esse o caso, são referenciadas pela letra do respectivo parâmetro acrescida do índice superior m. Os desvios padrões aproximados, segundo a expressão 4.8 , são indicados pelas letras σA tendo por índice inferior a letra respeitante ao parâmetro, e os desvios

padrões estimados segundo a amostra, desvios das médias, por σM. De forma geral, evitamos, no entanto, sempre que possível, representar os desvios, de forma a não tornar as figuras demasiado pesadas. As distâncias interelectródicas, em abcissas, são marcadas em escala logarítmica. A cada ponto de cada curva, além da medida móvel, indicada no eixo das abcissas, associam-se as medidas fixas utilizadas, referidas também nas próprias curvas.

A escala logarítmica nas distâncias interelectródicas perturba um pouco a aplicação imediata, a olho nu, da estratégia de escolha das medidas fixas a partir do andamento das curvas de modelos anteriores. No entanto, é usual e simplifica a apresentação. Em caso de dúvida, o leitor pode sempre, rapidamente, esboçar as curvas usando escalas naturais, enquanto, pelo menos, não ganhar a necessária sensibilidade.

As curvas de um estrato são integralmente reproduzidas ainda que, nalguns casos, bastassem dois ou três dos seus pontos para concluir que a hipótese de um estrato era inaceitável.

5.4.2 Terreno do tipo Q

O terreno, sugerido por um exemplo de Orellana (1972, p. 273), tem os parâmetros reais

$$R_1 = 10\ \Omega m;\quad T_1 = 10\ m;\quad R_2 = 6.5\ \Omega m;\quad T_2 = 10\ m;\quad R_3 = 2\ \Omega m$$

e é de facto de difícil interpretação, com resistividades bastante próximas e espessuras de estratos iguais, a pouca profundidade.

Manifestamente, como aliás se depreende das curvas de parâmetros aparentes das Figuras V-10, A, B, C e D, o lote é demasiado extenso para interpretar o terreno. De facto, só utilizamos medidas até à de ordem 20, a distância interelectródica de cerca de 700 m. *Haveria, até, todo o interesse em ter recolhido um lote diferente, com mais medidas a menor distância interelectródica*. Para todas as curvas, reproduzimos também o valor do parâmetro para a medida de ordem 29, a cerca de 5170 m.

Para a obtenção das curvas de um estrato, as hipóteses de partida foram r_1 = 10 Ωm, t_1 = 50 m, r_2 = 2 Ωm. As curvas quase sustentam a hipótese de o terreno ser de facto de um estrato com $r_1 \simeq 10$ Ωm, $t_1 \simeq 15$ m, $r_2 \simeq 2$ Ωm. E, de facto, *estamos muito perto dos limites e capacidades do método*. Se eventualmente T_2 fosse um pouco menor, ou R_2, seríamos, com certeza, levados a concluir que o terreno era de um estrato. Essa situação, vulgar nas curvas de tipo Q e A, é conhecida na literatura como *princípio de supressão* (Orellana, 1972, p. 162).

No entanto, se atendermos às curvas de um estrato de t_1 e de r_2 (a curva de r_1 não foi reproduzida, é praticamente constante a 10 Ωm), verificamos que os valores para a medida móvel de ordem 9, a cerca de 60 m de distância interelectródica, nos põem de sobreaviso. Surgem aí valores muito diferentes dos parâmetros, o que merece atenção, até porque os dois parâmetros não são muito correlacionados. Mas o que é determinante na recusa da hipótese de um estrato é que o desvio médio quadrático aproximado, como se vê na Figura V-10C (curva de r_2' e curvas a tracejado de $r_2' \pm \sigma A_{r_2'}$), embora não seja desprezável para cá da medida de ordem 14, *não se agrava particularmente para a medida de ordem 9*. Testes estatísticos comprovam o que se compreende imediatamente; o desvio da curva de r_2', por exemplo,

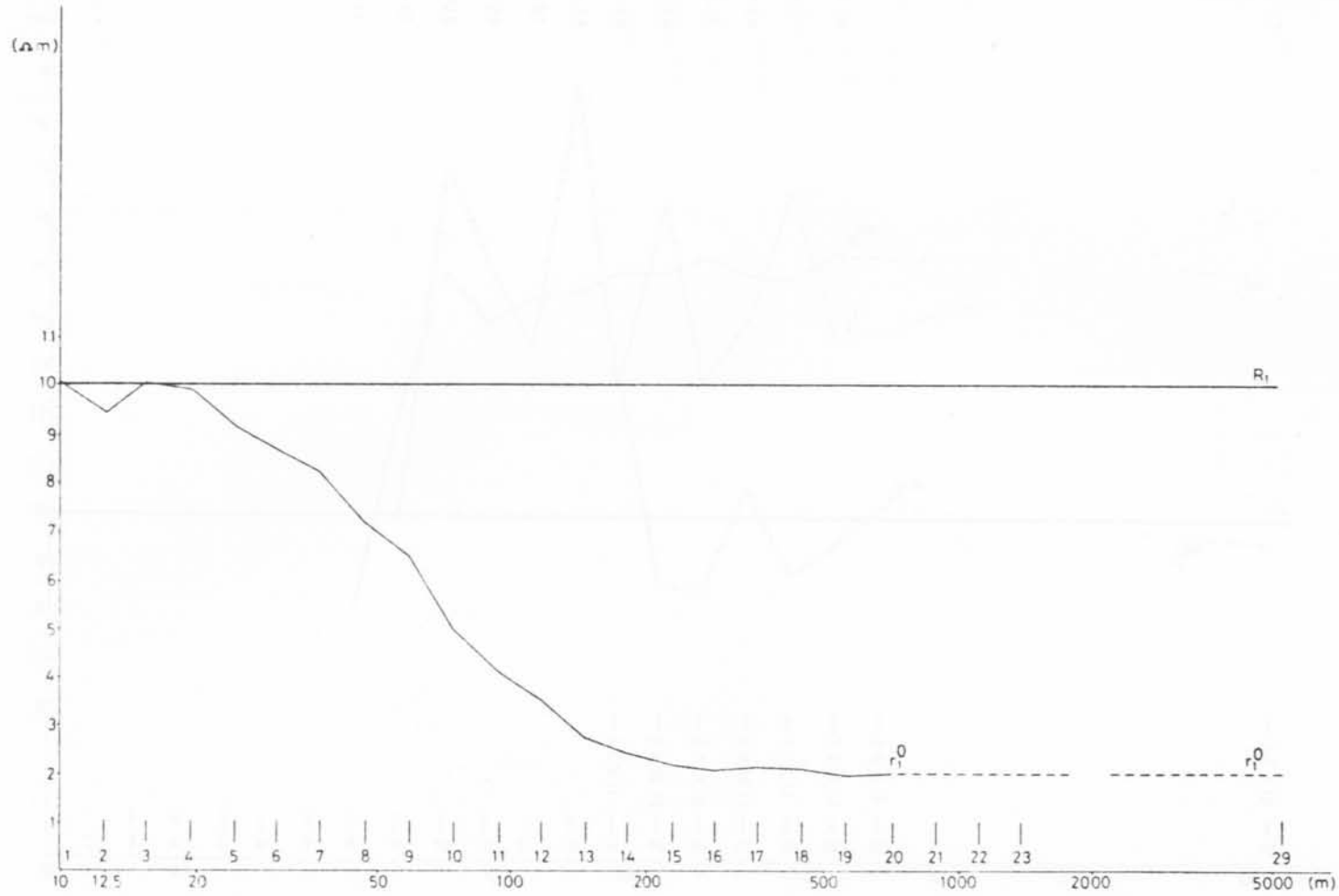


Figura V-10A - Curvas de parâmetros aparentes do terreno de estrutura:
R_1 = 10 Ωm, T_1 = 10 m, R_2 = 6.5 Ωm, T_2 = 10 m, R_3 = 2 Ωm.
Erro relativo das medidas inferior a .04

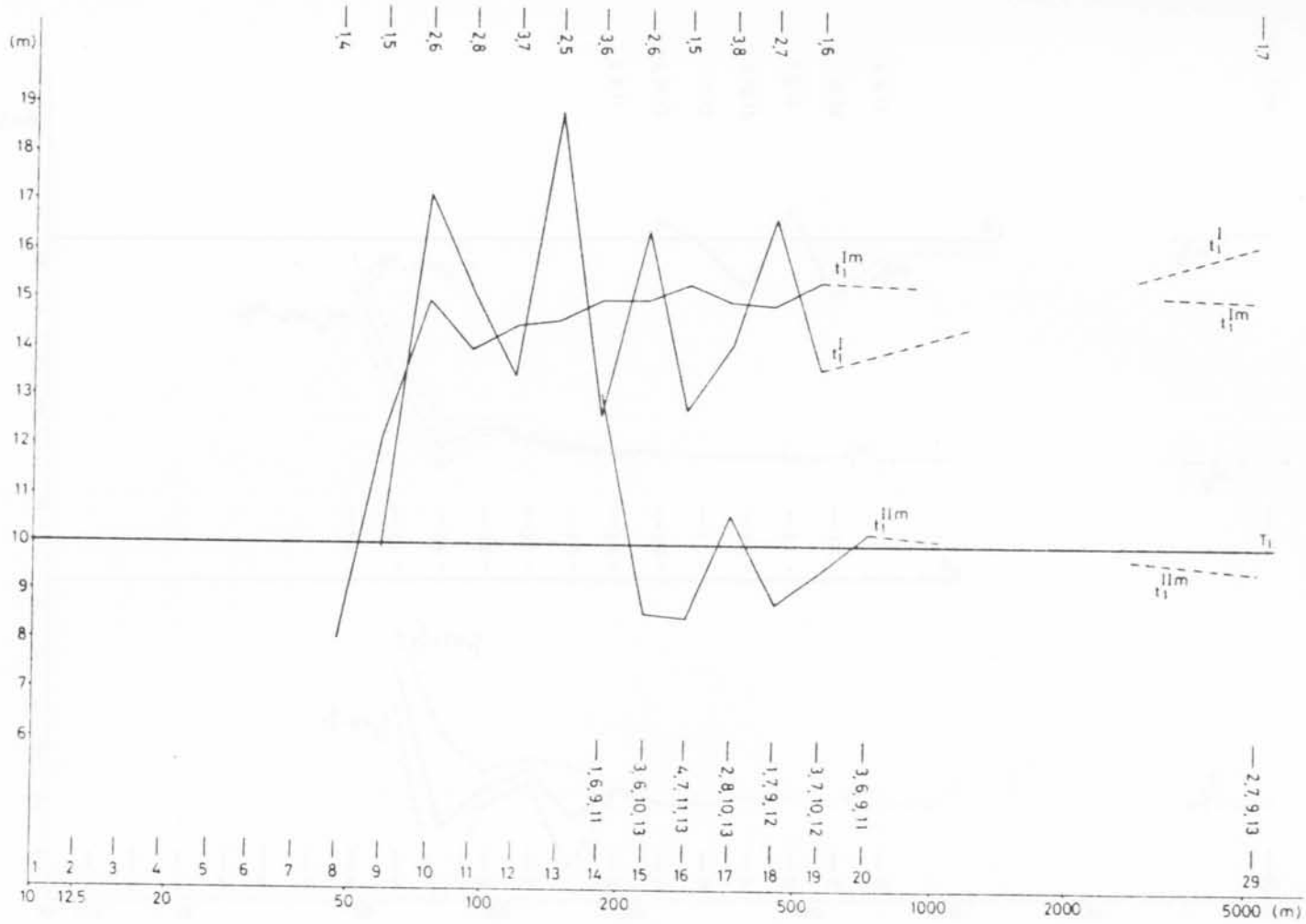


Figura V-10B - Curvas de parâmetros aparentes do terreno de estrutura:
R_1 = 10 Ωm, T_1 = 10 m, R_2 = 6.5 Ωm, T_2 = 10 m, R_3 = 2 Ωm.
Erro relativo das medidas inferior a .04

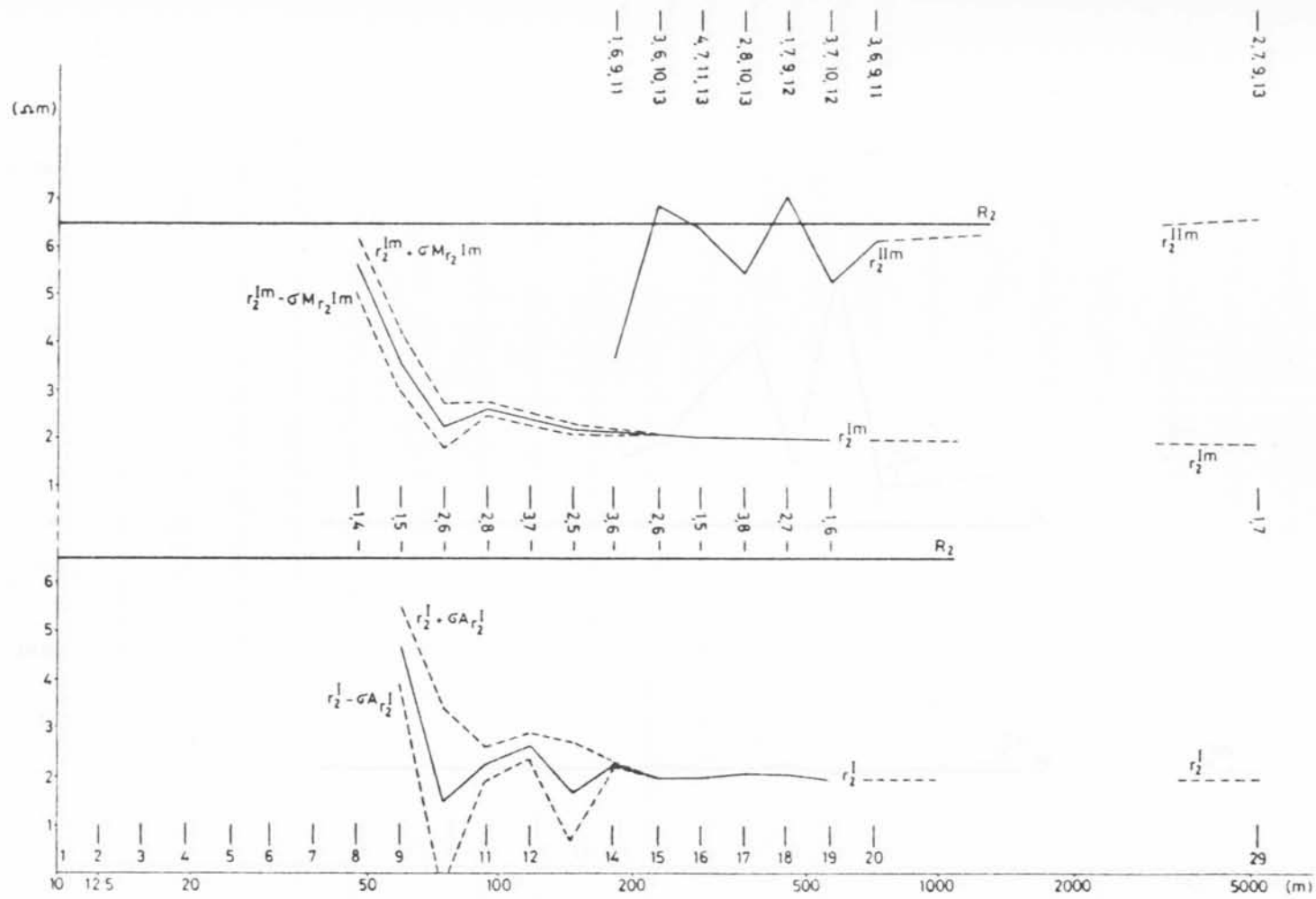


Figura V-10C - Curvas de parâmetros aparentes do terreno de estrutura:
R_1 = 10 Ωm, T_1 = 10 m, R_2 = 6.5 Ωm, T_2 = 10 m, R_3 = 2 Ωm.
Erro relativo das medidas inferior a .04

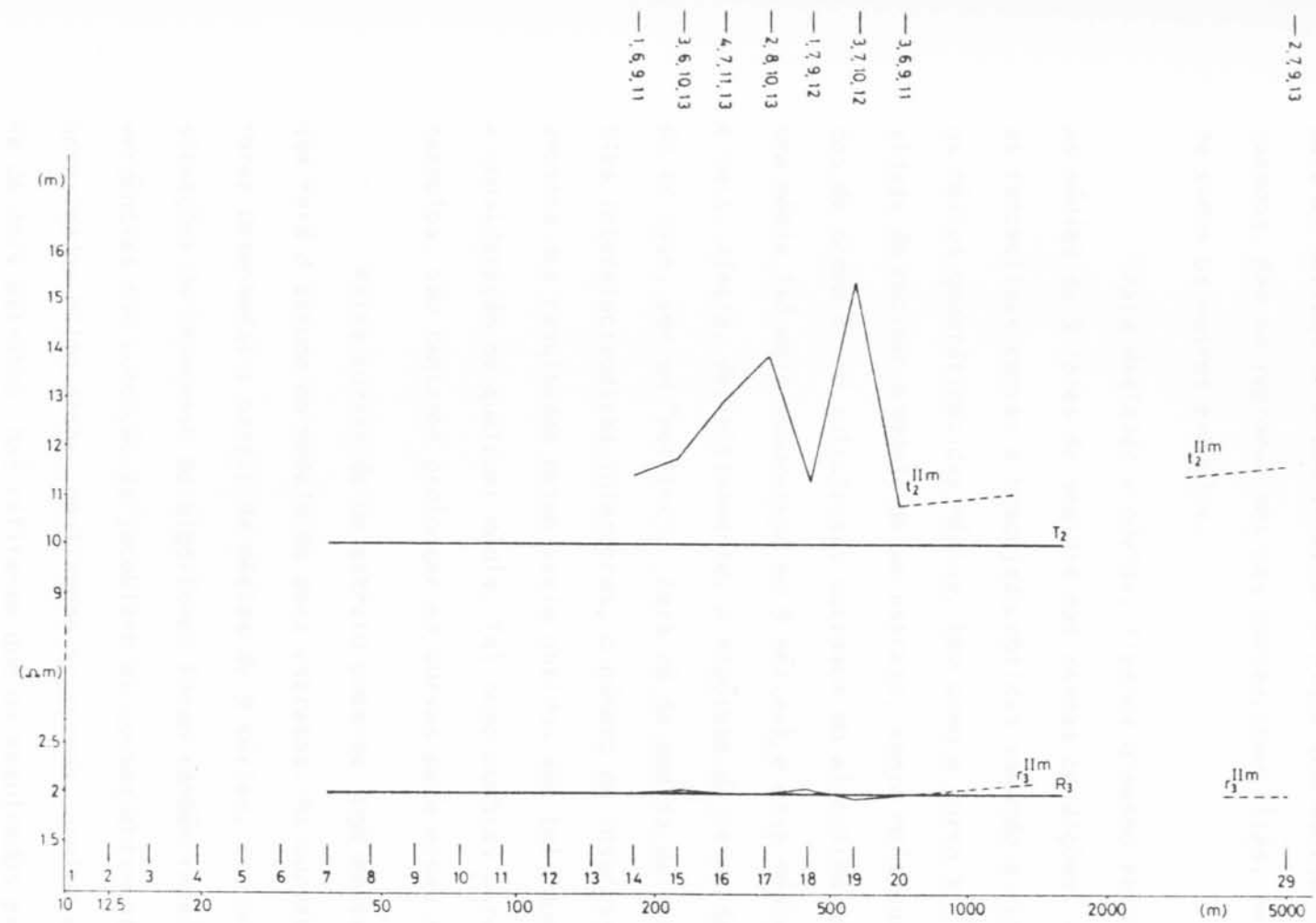


Figura V-10D - Curvas de parâmetros aparentes do terreno de estrutura:
R_1 = 10 Ωm, T_1 = 10 m, R_2 = 6.5 Ωm, T_2 = 10 m, R_3 = 2 Ωm
Erro relativo das medidas inferior a .04

para valores da ordem de 5 Ωm é, de facto, significativo. Mas, com esta particular série de medidas, só esta medida 9 nos dá essa informação; para as medidas de ordem inferior o algoritmo aborta com valores disparatados. Não os reproduzimos nas curvas, como, aliás, em todas as curvas de todos os outros exemplos.

Para desfazer a dúvida, fizemos o mesmo recuo mas construindo as médias de 9 lotes de medidas nas mesmas condições. A curva r_2^{Im}, com as respectivas curvas a tracejado, obtidas somando e subtraindo os desvios médios quadráticos das médias, bem como a curva t_1^{Im}, confirmam a necessidade de recusar o modelo de um estrato, tanto mais quanto para as medidas de ordem 8 há suficientes sucessos do algoritmo para poder recolher uma média (só dois insucessos em 9 séries), e essa média confirma o desvio e mais, afasta, definitivamente, a hipótese da referida medida de ordem 9, do 1º lote, ser um "outlier". Para cá da medida de ordem 8, para distâncias interelectródicas inferiores, o número de insucessos e o desvio da amostra dos resultados mesmo assim obtidos são tais que não se justifica a consideração de qualquer média. Tal como noutras curvas, deste e doutros exemplos, não tentamos prolongar as curvas para essas zonas.

Pelas curvas de um estrato pode-se logo antever a dificuldade que terá o estudo do modelo de dois estratos. As curvas de dois estratos foram desenhadas a partir de médias de 9 séries, descontadas bastantes situações de insucesso do algoritmo. Foram também rejeitadas algumas convergências com condição de jacobiano e, consequentemente, desvios padrões aproximados muito altos. Analisando as curvas, aceita-se todavia a hipótese de dois estratos, mas refira-se que os resultados para a espessura do segundo estrato, t_2^{IIm}, são algo surpreendentes. De facto, t_2^{IIm} surge com

erro, aparentemente um enviesamento, de cerca de 2 a 3 m. A explicação resultará, provavelmente, das condições que provocam o abortamento do algoritmo e que falseariam as médias desse particular parâmetro ou duma conjugação específica e infeliz dos erros das medidas. Para o traçado das curvas, a hipótese inicial foi r_1 = 10 Ωm, t_1 = 9 m, r_2 = 5 Ωm, t_2 = 50 m, r_3 = = 2 Ωm. Os desvios padrões, como era de esperar razoavelmente altos, não foram representados.

O terreno é, realmente, de difícil interpretação. De facto, não só exigiu a utilização de séries de medidas nas curvas de dois estratos, como até nas de um estrato. Pior ainda: como o leitor poderá verificar inspeccionando as curvas, *a utilização de falsas séries resulta, aqui, difícil*, por não se conseguirem definir, com clareza, grupos de medidas fixas nas condições ditadas pela nossa estratégia e abrangendo um número suficiente de medidas. No entanto, *parte dessas dificuldades resulta do lote inicial ser mal dimensionado*, comportando poucas medidas a distâncias interelectródicas pequenas (o substrato começa à profundidade de 20 m). Caberia ao interpretador optar por recolher novo lote, por exemplo com *uma primeira distância interelectródica menor e um passo também menor*, em alternativa à recolha de novos lotes nas condições do primeiro. Isso permitir-lhe-ia, provavelmente, utilizar falsas séries. Note-se, no entanto, que o problema interpretativo, que advém do facto de as três resistividades serem próximas conjugado com os dois estratos terem igual espessura, continuaria sempre a dificultar-lhe a tarefa.

5.4.3 Terreno do tipo H

O terreno, apresentado por Hoversten, Dey e Morrison (1982), tem como parâmetros reais

R_1 = 100 Ωm; T_1 = 50 m; R_2 = 3 Ωm; T_2 = 100 m; R_3 = 1000 Ωm.

A dificuldade reside aqui no contraste entre a resistividade intermédia e as restantes. O estrato muito condutor, *funcionando quase como um curto-circuito para a corrente injectada,* dificulta a determinação do substrato.

Como se pode imediatamente constatar da curva de resistividades aparentes homogéneas, r_1^0, sabendo-se que a resistividade do substrato é de 1000 Ωm, *o lote deveria ter medidas a maiores distâncias interelectródicas*. Hoversten, Dey e Morrison (1982) consideram também aqui medidas a distâncias da ordem de dezenas de quilómetros. Note-se também que a curva homogénea já anuncia que o terreno não é de um estrato mas que, dado o lote ser pouco extenso, é possível traçar curvas de um estrato, cobrindo o fundo do lote.

As curvas de um estrato foram obtidas a partir da hipótese inicial r_1 = 100 Ωm, t_1 = 20 m, r_2 = 10 Ωm, que se justifica por inspecção da curva de r_1 da Figura V-11A. Uma única série de medidas permite com facilidade recusar o modelo e passar ao de dois estratos (como aliás a curva homogénea permitia, já o dissemos). Nessa série o algoritmo abortou na medida de ordem 28. Saliente-se que cada série apresentada, aqui ou à frente, não é, evidentemente, seleccionada, mas ditada por RANF quando se faz a semente igual a 1. Esse insucesso deve-se a que, casualmente, devido ao erro, as medidas fixas 2 e 9 têm resistividade aparente homogénea associada crescente com a distância interelectródica.

As curvas de dois estratos, porque de facto temos medidas com distâncias interelectródicas pequenas, para a interpretação, sobretudo para

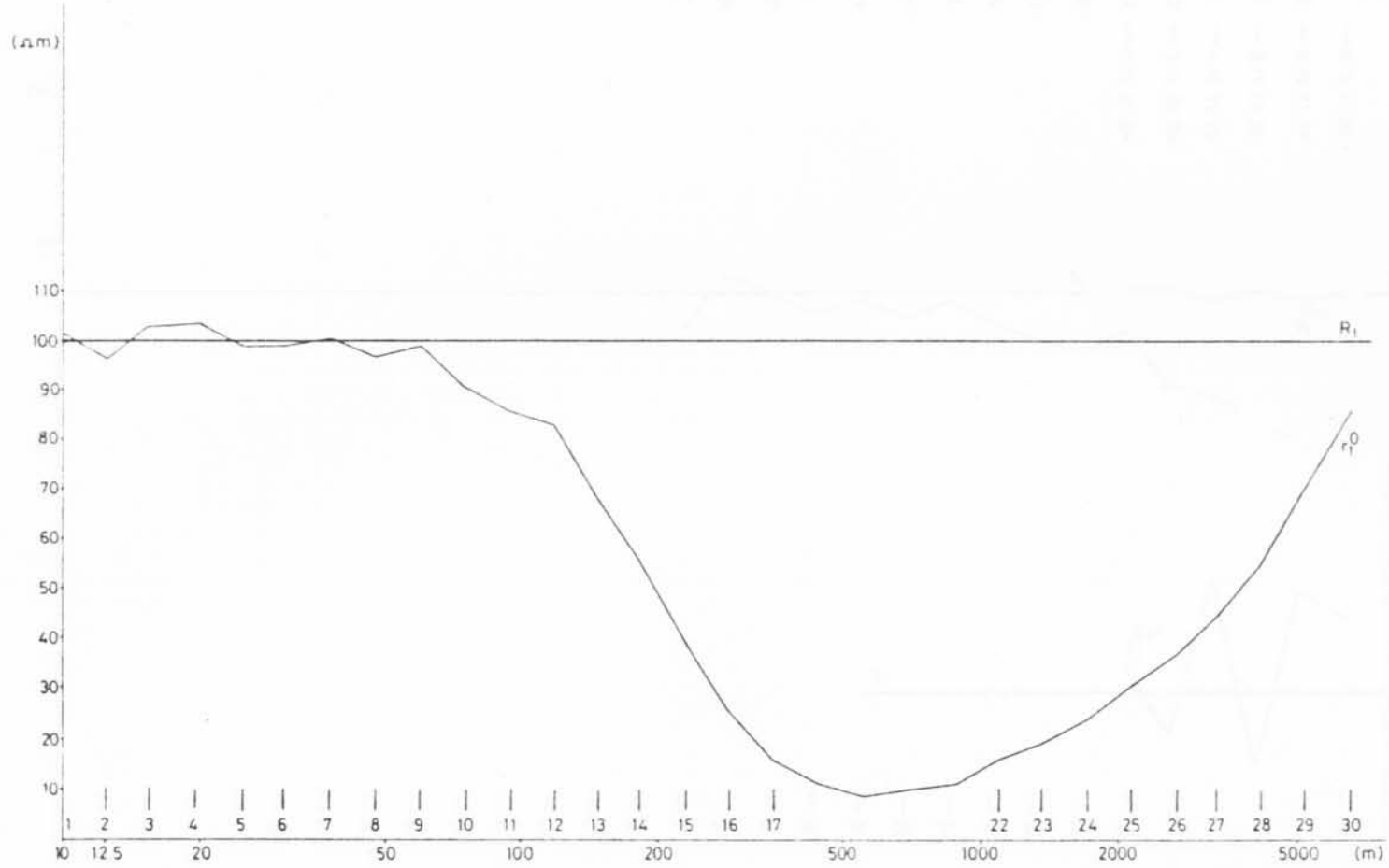


Figura V-11A - Curvas de parâmetros aparentes do terreno de estrutura:
R_1 = 100 Ωm, T_1 = 50 m, R_2 = 3 Ωm, T_2 = 100 m, R_3 = 1000 Ωm.
Erro relativo das medidas inferior a .04

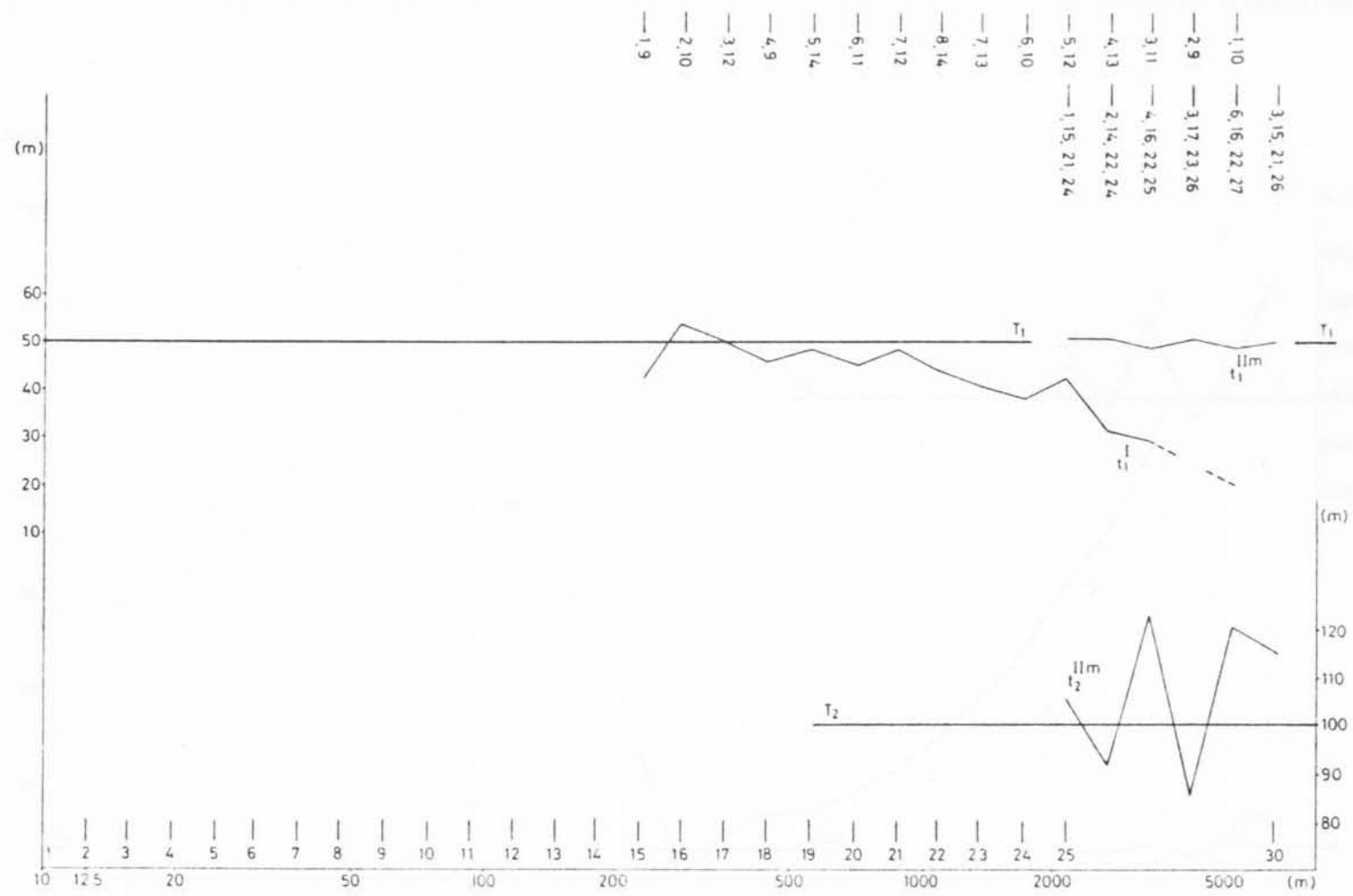


Figura V-11B - Curvas de parâmetros aparentes do terreno de estrutura:
R_1 = 100 Ωm, T_1 = 50 m, R_2 = 3 Ωm, T_2 = 100 m, R_3 = 1000 Ωm.
Erro relativo das medidas inferior a .04

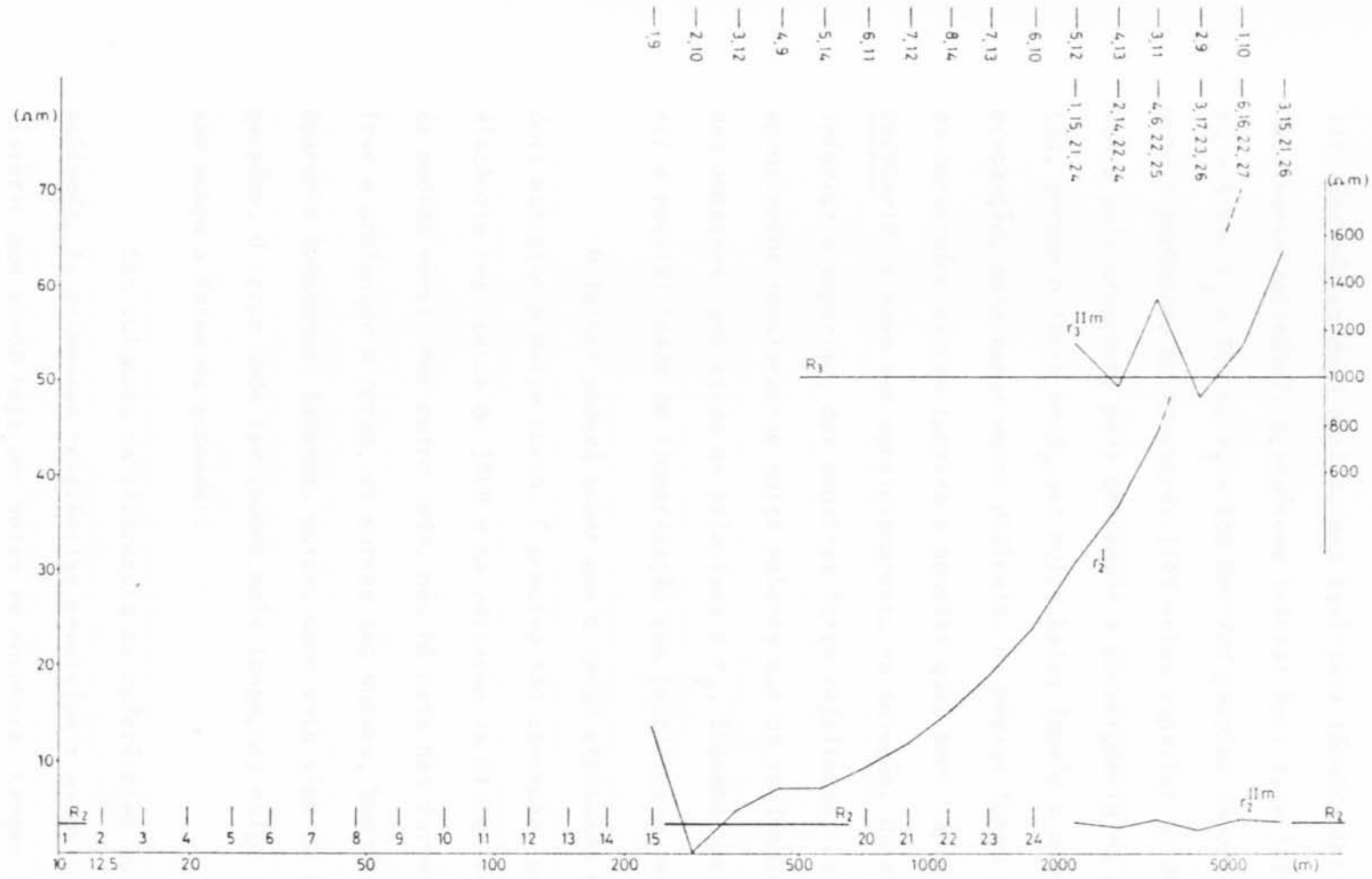


Figura V-11C - Curvas de parâmetros aparentes do terreno de estrutura:
R_1 = 100 Ωm, T_1 = 50 m, R_2 = 3 Ωm, T_2 = 100 m, R_3 = 1000 Ωm
Erro relativo das medidas inferior a .04

a definição dos parâmetros mais profundos, tiveram de ser traçadas a partir das médias de 9 séries, mas aqui já a técnica das falsas séries é facilmente aplicável. A hipótese inicial foi: r_1 = 100 Ωm; t_1 = 50 m; r_2 = 5 Ωm; t_3 = 200 m; r_3 = 200 Ωm. *Foi preciso impor um valor inicial para o parâmetro de Marquardt* (100 vezes superior ao definido automaticamente pelo programa) para conseguir a convergência na primeira optimização, porque o facto de R_2 ser muito baixa impele o algoritmo, sem essa precaução, para zonas muito difíceis. As médias foram obtidas considerando as convergências com sucesso e aquelas que, sem aproximação a menos de PREPOM/10, tinham bom condicionamento na solução. Os valores extremos, inferior e superior, das amostras foram rejeitados. Os desvios padrões aproximados revelaram-se muito maiores que os realmente estimados a partir das amostras, sobretudo os relativos a r_3. Supomos que não se pode aqui admitir a possibilidade de linearização que justifica o seu cálculo.

O leitor poderá achar que o recuo efectuado com o modelo de dois estratos é muito curto. É preciso não esquecer, porém, que cobre, em distância real, cerca de 3000 m de variação da distância interelectródica da medida móvel. Por outro lado, não há nada nas curvas de um estrato que leve a prolongar o recuo, as curvas são suaves, bem como a de resistividade aparente homogénea. Sabemos, porém, como este tipo de análise pode ser enganador. O recuo pode ser levado mais longe, mas exige um pouco de reflexão sobre a forma de proceder.

São vulgares na literatura as referências ao *princípio de equivalência*. As primeiras referências envolviam o assunto num certo ar de mistério que ainda hoje por vezes se encontra. Langer (1933) mostrou que se a resistividade do terreno for apenas função da profundidade, o que é

o nosso caso, então o potencial à superfície determina essa função; por outras palavras, mostrou que o problema teórico de inversão dum terreno estratificado tem solução única. Mas as medidas recolhidas à superfície são amostras do potencial, apenas dalguns pontos da superfície, e não são exactas, mas sujeitas a erros, e daqui resulta a ambiguidade. Eis como Lasfargues (1957, p. 108) apresenta o princípio da equivalência:

"Duma maneira geral, um terreno cuja espessura t é inferior ou igual à profundidade do seu tecto é menos bem caracterizado por sua espessura t ou resistividade ρ que

- pelo quociente $C = \frac{t}{\rho} = t\sigma$, se esse terreno é condutor (em relação aos terrenos encaixantes)
- ou pelo produto $R = t\rho$, se esse terreno é resistente (em relação aos terrenos encaixantes)".

Ora isto, como vimos, traduzimos nós dizendo que no 1º caso, o do actual exemplo, há uma *forte correlação positiva entre espessura e resistividade* e, no 2º, o do exemplo de Inman estudado na secção anterior, *correlação negativa*. Em ambos os casos os parâmetros podem ser determinados com grande erro mas aquele quociente ou produto, consoante o caso, com grande precisão. No exemplo presente, o quociente $R_2/T_2 = .03$, em todas as optimizações do modelo de 2 estratos, foi sempre determinado com erro relativo inferior a 2.5%.

O nosso método, e aí reside uma outra sua vantagem, *fornece no entanto uma estimativa independente de um dos parâmetros*. A curva r_2^1, do modelo de um estrato, diz-nos assimptoticamente que R_2 deve ser de cerca de 5 Ωm. Então, sabido, de optimizações com melhor condicionamento fi-

nal, a maiores distâncias interelectródicas da medida móvel, o valor do quociente r_2/t_2, ele pode ser utilizado no recuo para zonas de pior condicionamento, não só para averiguar, a olho nu, da consistência da hipótese implicada pelo modelo, como se fosse um parâmetro, mas até para obter avaliações mais correctas de t_2, *rejeitando as optimizações que, fornecendo uma estimativa* r_2/t_2 *boa, indiquem um valor de* r_2 *muito diferente dos obtidos a melhor condicionamento ou do estimado das curvas anteriores*. Esse controlo pode aliás ser feito logo à partida, mesmo para optimizações bem condicionadas, a partir de r_2/t_2 e de r_2 estimado das curvas anteriores.

5.4.4 Terreno do tipo A

O terreno baseia-se num exemplo apresentado por Lasfargues (1957, p. 103), e tem os parâmetros reais

$$R_1 = 30\ \Omega m;\quad T_1 = 10\ m;\quad R_2 = 70\ \Omega m;\quad T_2 = 30\ m;\quad R_3 = 160\ \Omega m.$$

Para obtenção das curvas de um estrato, as hipóteses de partida foram: $r_1 = 30\ \Omega m$, $t_1 = 30\ m$, $r_2 = 100\ \Omega m$. Saliente-se, uma vez mais, que a escolha destas hipóteses não é ditada por um palpite sem nexo, mas resulta da inspecção da curva de resistividades aparentes homogéneas. O algoritmo, no entanto, funciona com hipóteses muito mais afastadas dos valores reais do que estas. Um lote de medidas e umas curvas simples de um estrato, dele retiradas, permitem fundamentadamente recusar a hipótese de um estrato. Para as curvas de 2 estratos, as hipóteses iniciais foram $r_1 = 30\ \Omega m$, $t_1 = 9\ m$, $r_2 = 60\ \Omega m$, $t_2 = 100\ m$, $r_3 = 160\ \Omega m$. A dificuldade de interpretação do terreno é devida sobretudo à fraca espessura dos ter-

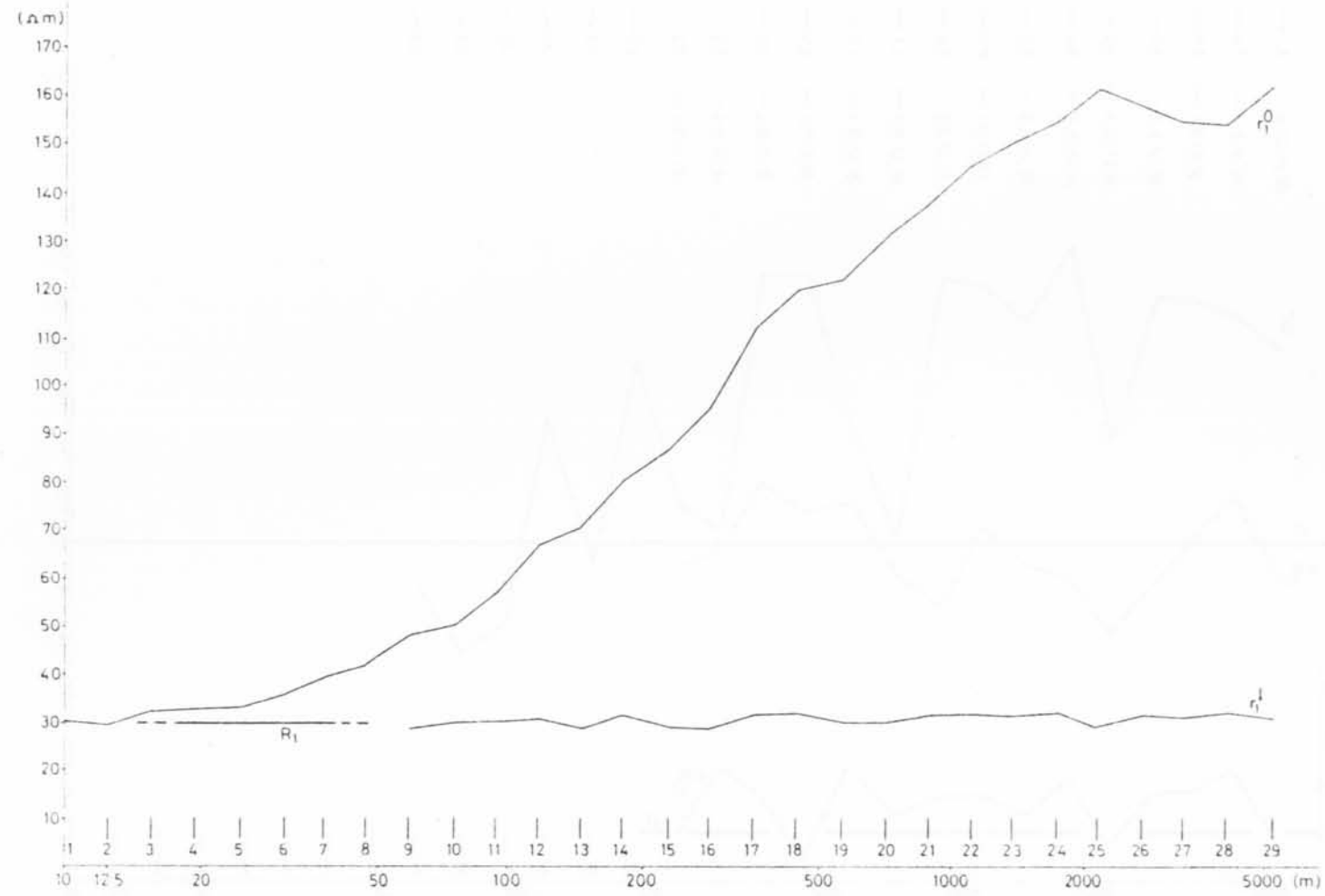


Figura V-12A - Curvas de parâmetros aparentes do terreno de estrutura:
R_1 = 30 Ωm, T_1 = 10 m, R_2 = 70 Ωm, T_2 = 30 m, R_3 = 160 Ωm.
Erro relativo das medidas inferior a .04

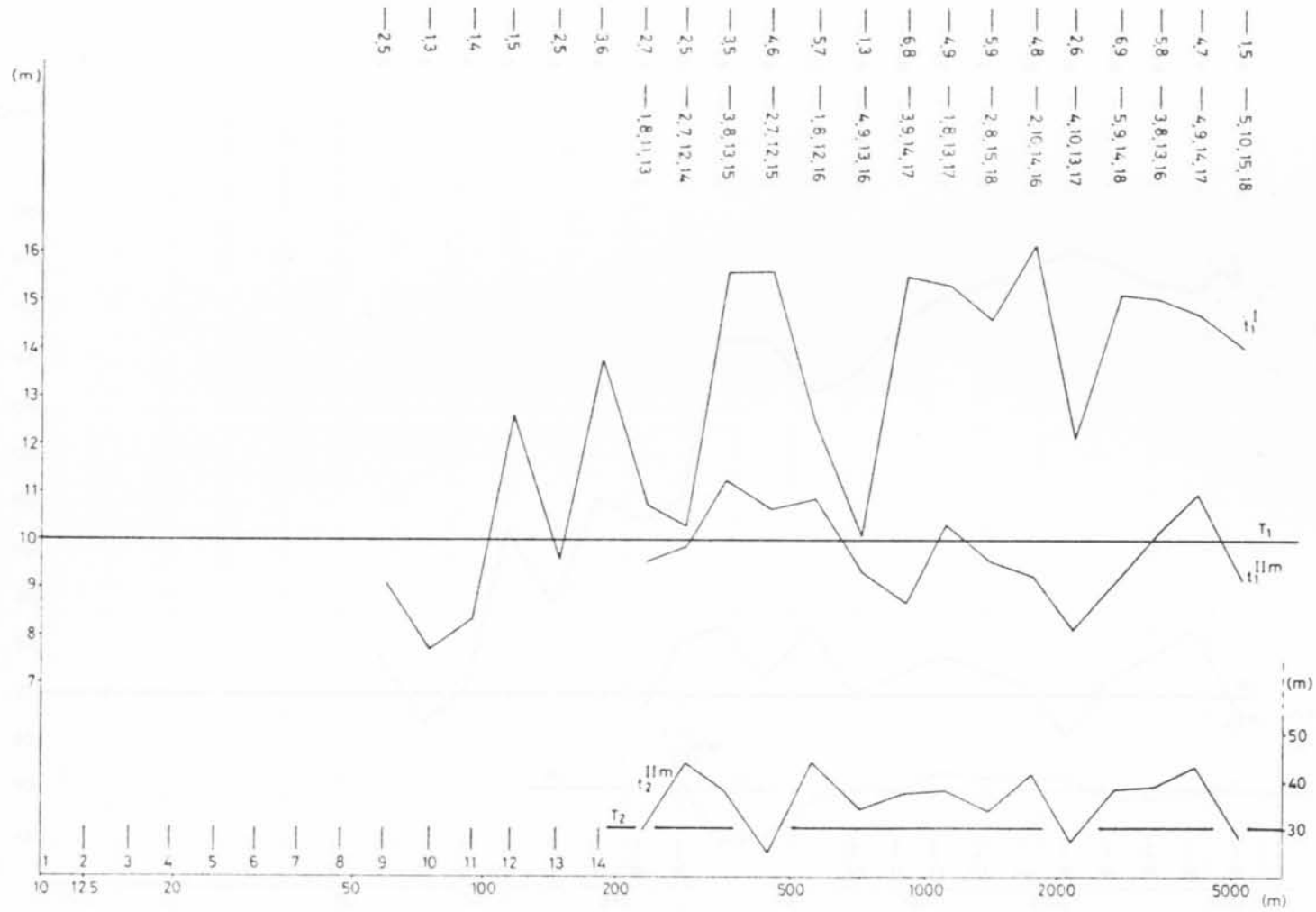


Figura V-12B - Curvas de parâmetros aparentes do terreno de estrutura:
R_1 = 30 Ωm, T_2 = 10 m, R_2 = 70 Ωm, T_2 = 30 m, R_3 = 160 Ωm.
Erro relativo das medidas inferior a .04

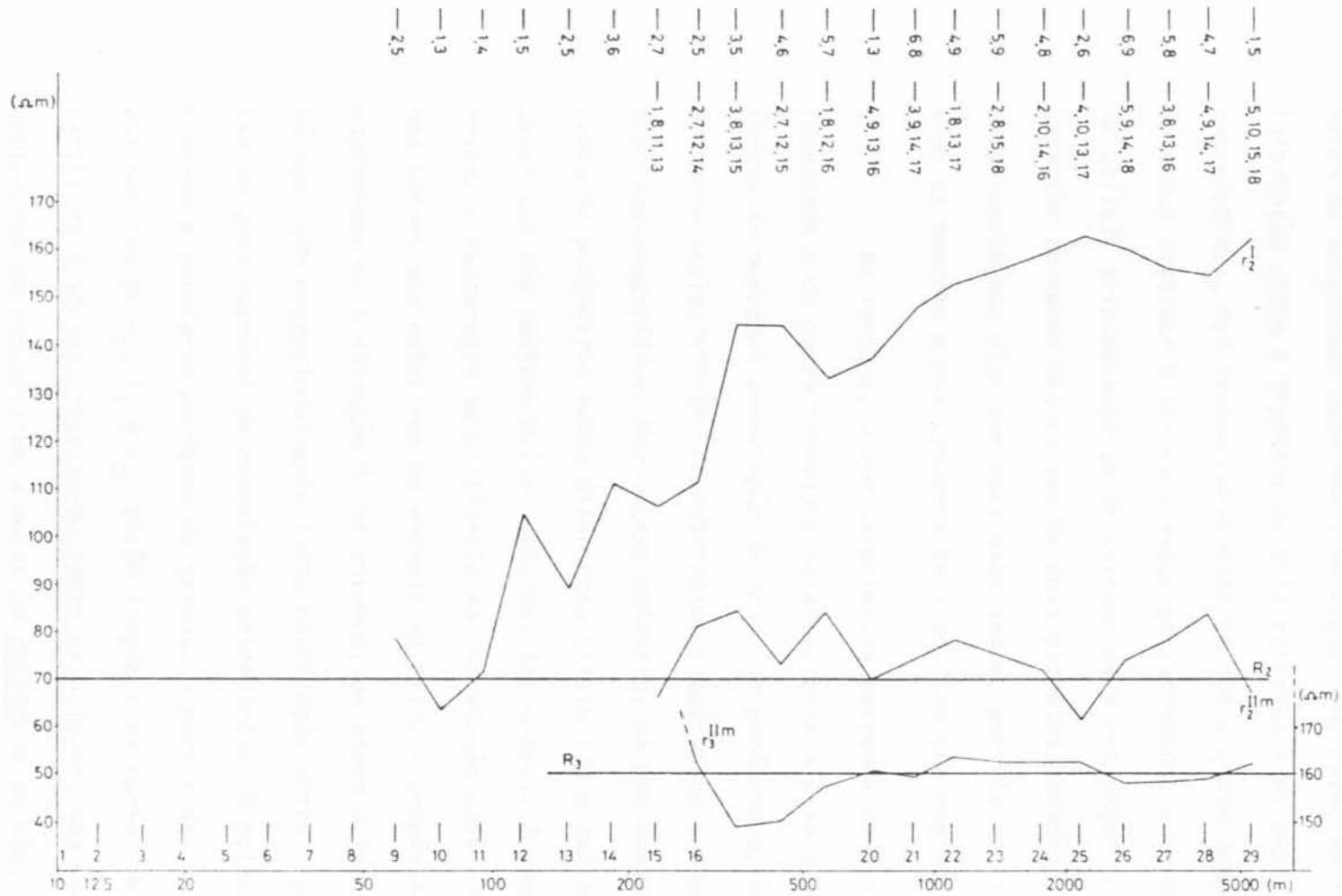


Figura V-12C - Curvas de parâmetros aparentes do terreno de estrutura:
R_1 = 30 Ωm, T_1 = 10 m, R_2 = 70 Ωm, T_2 = 30 m, R_3 = 160 Ωm.
Erro relativo das medidas inferior a .04

renos, a pouca profundidade. Embora uma única série de medidas seja, a menos de insucessos ocasionais do algoritmo, capaz de fornecer muita informação sobre a hipótese de dois estratos, e as experiências, que não reproduzimos, nos tenham convencido de que é quase sempre suficiente, resolvemos utilizar 9 séries, e recorrer justamente à característica que torna difícil a interpretação do terreno para prolongar o mais possível a extensão do recuo das curvas de dois estratos, embora, já de per si, a experiência nos diga que esta extensão é, por via de regra , maior neste tipo de terreno e nos terrenos de tipo Q do que nos outros.

Na verdade, o que caracteriza terrenos de estratos a pouca profundidade e de pouca espessura relativamente a essa profundidade é a existência de *razoável correlação de todos os parâmetros*, à excepção eventualmente da resistividade do substrato, e até mesmo a bem pequena distância interelectródica. Por outras palavras, há uma enorme variedade de terrenos de parâmetros todos diferentes (incluindo a resistividade superficial) que dão medidas muito próximas das nossas. É uma boa ocasião de testar a estratégia de utilização da correlação para prolongar o recuo, nos termos que referimos no exemplo anterior a propósito do princípio de equivalência. A situação é, no entanto, um pouco diferente porque não há aqui uma excepcionalmente forte correlação entre 2 parâmetros, mas antes um grau razoável de correlação entre todos. O princípio é no entanto o mesmo e baseia-se no facto de termos, a partir das curvas de um estrato, estimativas de r_1, t_1 e r_2. Então, traçámos as curvas de dois estratos, a partir de 9 séries, rejeitando todas as soluções das optimizações (independentemente de convergirem a menos de PREPOM/10 ou não) em que um ou mais dos parâmetros r_1, t_1 e r_2 tivessem "caído" fora das respectivas "*janelas*"

$r_1 \in [26, 34]$

$t_1 \in [4, 14]$

$r_2 \in [40, 110]$

definidas empiricamente a partir das curvas de um estrato. As "janelas" podiam, obviamente, ser mais estreitas, em especial a de r_1, mas isso diminuiria o número de optimizações capazes de as satisfazer e, para então se obterem resultados significativos, teríamos de recorrer a mais lotes de medidas ou, no caso de utilizarmos falsas séries construídas sobre um único lote, a estabelecer conjuntos de mais medidas fixas diferentes, o que nem sempre é possível.

Refira-se que aqui também o *lote deveria ser melhor dimensionado*, com menor distância interelectródica inicial e menor passo das distâncias, facilitando a utilização de falsas séries.

5.4.5 Outro terreno do tipo A

Este exemplo deve-se também a Inman (1973). Os parâmetros reais são

$$R_1 = 10\ \Omega m;\quad T_1 = 20\ m;\quad R_2 = 50\ \Omega m;\quad T_2 = 100\ m;\quad R_3 = 150\ \Omega m$$

O terreno é de interpretação mais fácil que o anterior, essencialmente porque as espessuras dos estratos são maiores. A hipótese inicial para um estrato foi: $r_1 = 10\ \Omega m$; $t_1 = 50\ m$; $r_2 = 100\ \Omega m$. E para 2 estratos: $r_1 = 10\ \Omega m$; $t_1 = 20\ m$; $r_2 = 40\ \Omega m$; $t_2 = 150\ m$, $r_3 = 200\ \Omega m$. Um jogo de curvas de dois estratos, curvas simples, tirado de um único lo-

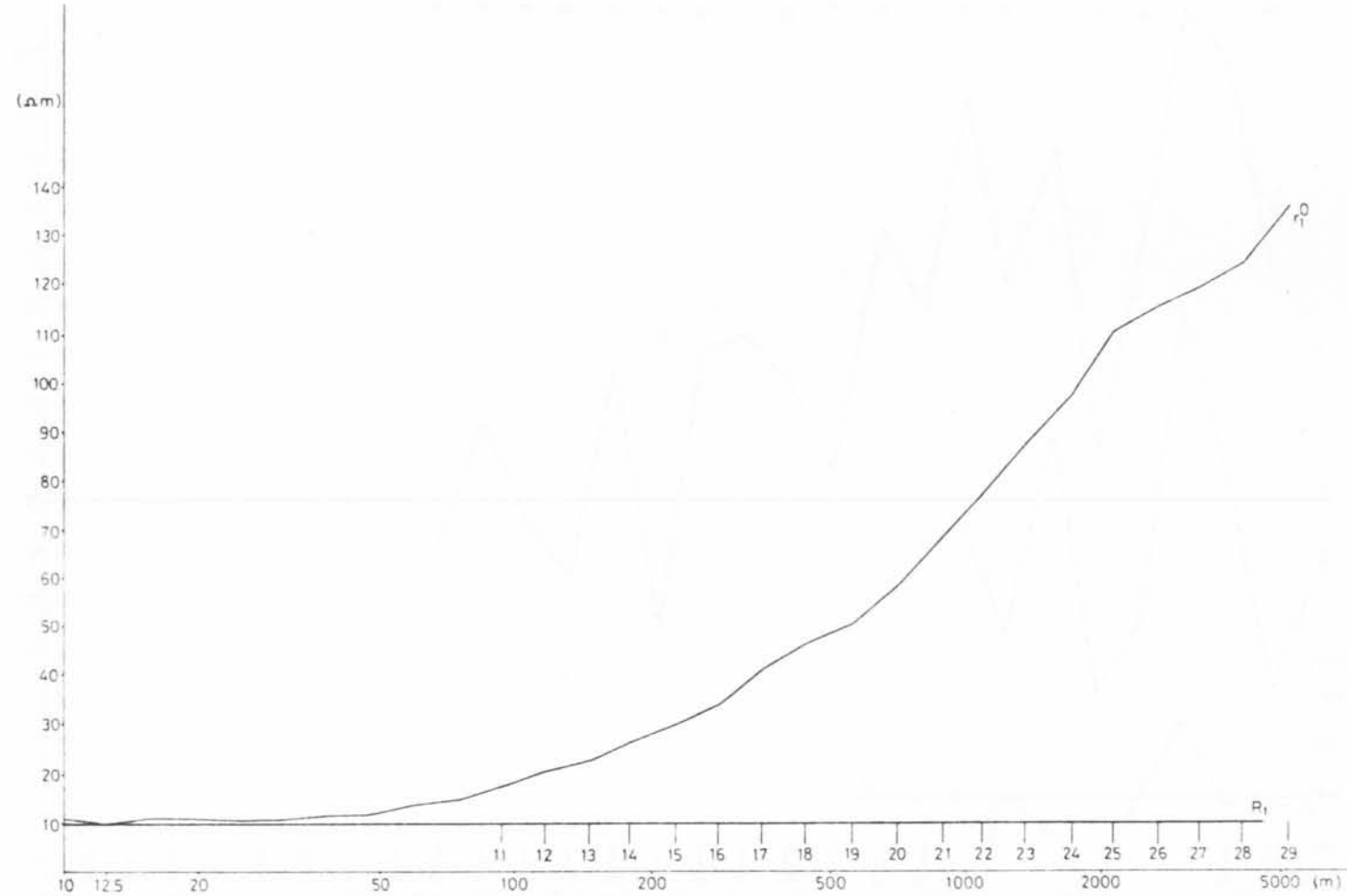


Figura V-13A - Curvas de parâmetros aparentes do terreno de estrutura:
R_1 = 10 Ωm, T_1 = 20 m, R_2 = 50 Ωm, T_2 = 100 m, R_3 = 150 Ωm.
Erro relativo das medidas inferior a .04

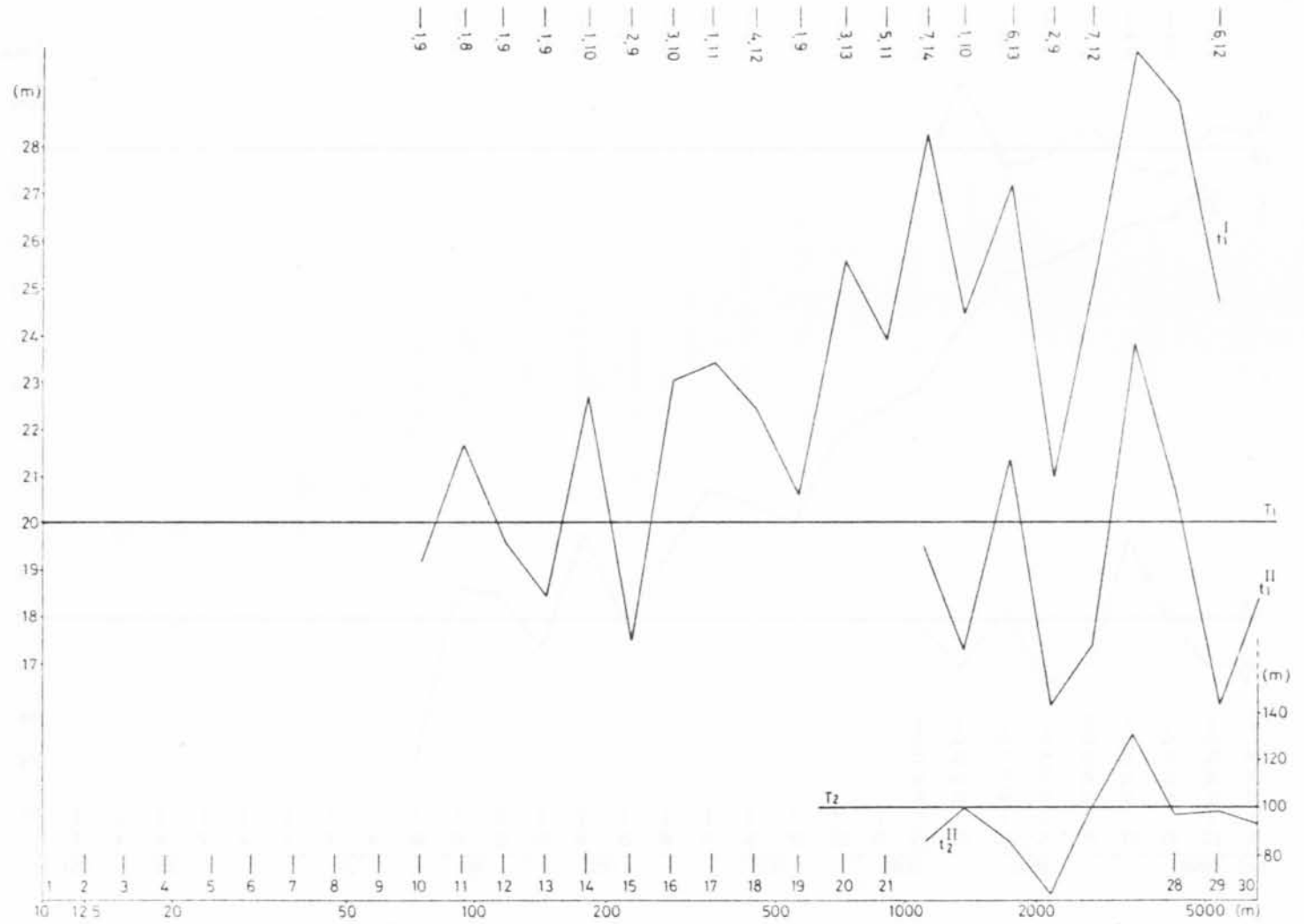


Figura V-13B - Curvas de parâmetros aparentes do terreno de estrutura:
R_1 = 10 Ωm, T_1 = 20 m, R_2 = 50Ωm, T_2 = 100 m, R_3 = 150 Ωm.
Erro relativo das medidas inferior a .04

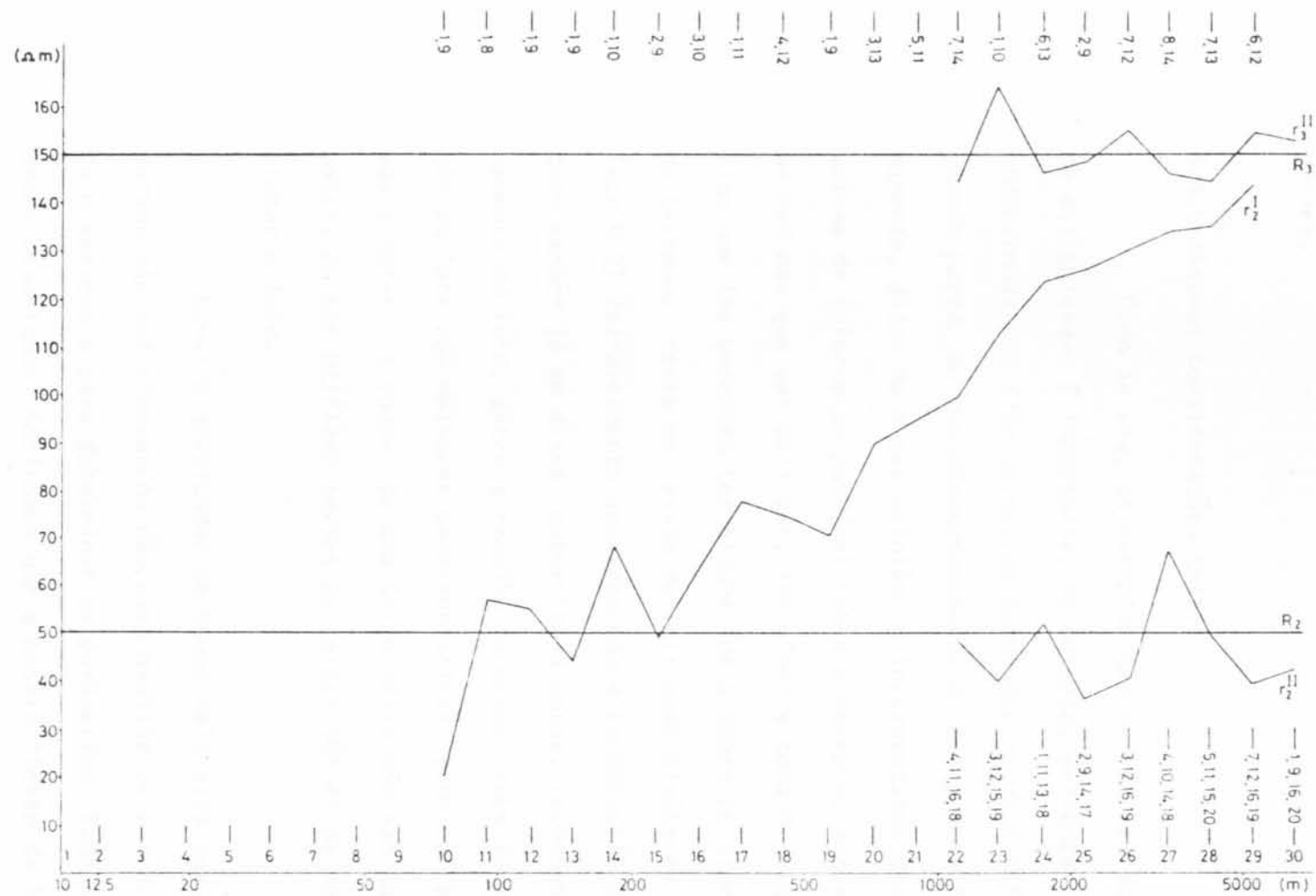


Figura V-13C - Curvas de parâmetros aparentes do terreno de estrutura:
R_1 = 10 Ωm, T_1 = 20 m, R_2 = 50 Ωm, T_2 = 100 m, R_3 = 150 Ωm.
Erro relativo das medidas inferior a .04

te, é aqui claramente suficiente para se poder aceitar o modelo de dois estratos, sem ser preciso recorrer a mais lotes ou à construção de falsas séries.

5.4.6 Algumas considerações gerais

Como se viu, os exemplos não se revestiram todos do mesmo grau de dificuldade. É importante, no entanto, salientar que *as dificuldades encontradas nos três primeiros terrenos, os mais difíceis, se deveram, em grande parte, ao mau dimensionamento do lote*, como ficou, também, oportunamente, dito. Na nossa opinião, o interpretador deve procurar o maior volume de informação possível sobre o terreno, antes de recolher o lote de medidas que vai utilizar, incluindo a toma de algumas medidas exploratórias que lhe permitam ter alguma ideia sobre as dimensões dos parâmetros do terreno, tentando assim definir umas hipóteses iniciais ou "guesses" (ver 4.9) razoavelmente apuradas, com antecedência. De qualquer forma, e como também já se disse, caber-lhe-á optar, reconhecido o mau dimensionamento do lote, entre a recolha de novos lotes idênticos e a reformulação do lote com melhores características. Isto é, reconhecendo que as curvas simples tiradas de uma única série não são suficientes, ele deverá optar, ou por utilizar séries ou falsas séries de medidas, ou por redimensionar o lote.

Convirá aprofundar um pouco mais esta questão de decidir se as curvas são suficientes, ou não, para avaliar se o modelo em ensaio representa o terreno e para determinar os parâmetros. Tudo depende dos desvios padrões associados. Admitamos que a possibilidade de linearização das potências nos permite tomar a expressão 4.8 como aproximação à matriz de

covariâncias das estimativas, fornecendo assim aproximações válidas aos desvios padrões associados a cada ponto das curvas.

Observemos umas curvas simples, tiradas de um único lote, sem recurso a outros lotes ou a falsas séries, num qualquer dos exemplos estudados. Elas dificilmente serão perfeitamente horizontais.

Se os desvios padrões forem muito pequenos, *as variações nas curvas são significativas*, as curvas não são, de facto, horizontais, e a hipótese em ensaio, do respectivo modelo representar o terreno, não é de aceitar. Com esses desvios padrões, se determinássemos os parâmetros com outro lote de medidas nas mesmas condições, iríamos obter curvas quase sobreponíveis às que agora possuímos. As variações das curvas não são fruto dum "acidente" de amostragem, não são determinadas pelo ruído das medidas, mas pela estrutura do terreno.

Um aumento dos desvios padrões significa que, se obtivermos várias estimativas dos parâmetros correspondentes a cada abcissa das curvas, elas serão cada vez mais espalhadas, ou, pelo menos, têm alta probabilidade de o serem. As variações das curvas são menos significativas, mais acidentais, mais determinadas pelo ruído. Torna-se difícil dizer imediatamente se podem ser consideradas horizontais ou não. *É então que pode ser útil efectuar uma análise estatística rigorosa das curvas.*

Mas admitamos que os desvios padrões associados sejam muito grandes. Então *não temos confiança nenhuma nas medidas*. A potência dos testes estatísticos que poderíamos efectuar diminui de tal maneira que eles se tornam inúteis. Qualquer hipótese sobre as curvas se torna estatisticamente crível ; é impossível garantir que a forma da curva seja determinada pelo sinal e não pelo ruído. *A informação dilui-se e as curvas são,*

então, insuficientes.

O processo de ultrapassar a situação é obter mais amostras e assim filtrar o ruído, pois temos a certeza que, de facto, se trata de ruído (se as medidas fossem exactas, cada curva seria determinada univocamente pela estrutura do terreno). Obtendo mais amostras, utilizando mais lotes ou, quando possível, construindo falsas séries a partir dum único lote (possíveis de conseguir em todos os exemplos atrás estudados, com eventual excepção do primeiro), define-se uma média com menor desvio padrão (divide-se pela raíz quadrada do número de elementos da amostra, como vimos no capítulo anterior) e a informação aumenta.

É nesse sentido que temos de decidir se as curvas obtidas são ou não suficientes e, no fundo, a decisão depende da maior ou menor potência que queremos que tenham os nossos testes. Se os desvios padrões forem muito grandes, *o interpretador não encontra razão nenhuma para duvidar da hipótese que formula, mas também não vê justificação nenhuma para se decidir por ela.*

Poderá o leitor argumentar, com toda a razão, aliás, que a situação não depende tanto assim da grandeza dos desvios padrões associados, e que haverá sempre várias hipóteses de estruturas que um determinado jogo de curvas permite aceitar a um nível de confiança igual ao da hipótese que o interpretador formula. É de facto assim, mas o utilizador, ao formular uma hipótese, permite uma certa margem de incerteza. Na verdade, tem pouco significado para ele saber se um determinado estrato, digamos, de 10 Ωm de resistividade, pode ser ou não formado, na realidade, por dois estratos, um de resistividade 9.5 Ωm e outro 10.5 Ωm, por exemplo. E, se

teimar em fazer a distinção, o algoritmo de optimização, que terá de aplicar ao modelo mais complexo resultante da divisão do estrato, quando não abortar, manterá a dúvida. Um determinado grau de incerteza aparece, também, já não na definição da estrutura do terreno, mas na definição dos seus parâmetros, afinal o erro com que eles são obtidos.

Nada impede, teoricamente, o utilizador de tratar o problema de modo diferente, definindo, para cada colecção de dados, não uma solução, mas um *intervalo de soluções*, englobando, eventualmente, estruturas de terreno diferentes. Nesses termos, ele procurará, perante um jogo de curvas, não verificar uma determinada hipótese, mas determinar quais as hipóteses (melhor quais as condições limites para hipóteses) que são incompatíveis, a um certo nível de significado, com as curvas. O leitor poderá, com facilidade, ajuizar da magnitude da tarefa que uma tal abordagem do problema, necessariamente, implicaria.

Belle conclusion, et digne de l'exorde

Racine, 1639-1699

Les plaideurs

CAPÍTULO VI

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

6.1 Conclusões

Cremos que os objectivos do trabalho foram, no geral, conseguidos. Em particular, parece-nos importante realçar os seguintes aspectos:

6.1.1 - A definição da potência consumida no terreno, entre eléctrodos aparentes, como medida indirecta a obter no terreno, facilita a implementação dos algoritmos de optimização empregues nos métodos de mínimos quadrados, sobretudo se se utilizam técnicas de medição no campo que garantam, por variação de corrente injectada, a mesma ordem de grandeza para todas as medidas.

6.1.2 - O desenvolvimento em série, de potências e suas derivadas nos parâmetros, utilizado, derivado da chamada segunda denotação de Van Dam, permite, economicamente, tratar, conjuntamente, potências e derivadas a diferentes distâncias interelectródicas.

6.1.3 - A utilização do método de Marquardt e as alterações propostas, nomeadamente no controlo do respectivo parâmetro e nos critérios de convergência e de insucesso, permitem dispor dum algoritmo de optimização robusto, económico e conduzindo a estimativas normalmente isentas de viés.

6.1.4 - A utilização da rotina de resolução de sistemas por decomposição em valores singulares, nas iterações que o algoritmo de optimização exige, acompanha a solução obtida de valiosa informação quanto aos erros e correlações dos parâmetros, bem como quanto às medidas

do lote disponível que mais determinam cada particular parâmetro do modelo em ensaio.

6.1.5 - Os conceitos de parâmetros aparentes e de curvas de parâmetros aparentes, pedras de toque do método, revelam-se eficientes, tratáveis estatisticamente e ricos em informação sobre as características do terreno.

6.1.6 - O método utilizado na inversão do terreno a partir da análise das curvas de parâmetros aparentes de modelos sucessivamente mais complexos, os quais se procura ajustar ao lote de medidas recolhidas no terreno real, apresenta, entre outras, as seguintes vantagens sobre os métodos de mínimos quadrados que denominámos globais por utilizarem todas as medidas do lote numa única optimização:

6.1.6.1 - a decisão de aceitação ou rejeição de um modelo é facilitada de forma significativa e tornada independente do erro das medidas

6.1.6.2 - as hipóteses iniciais ou "guesses" para os parâmetros do terreno são, por um lado, mais fáceis de arbitrar e, por outro, vão sendo apresentadas escalonadamente ao algoritmo de optimização, melhorando o seu comportamento

6.1.6.3 - os erros dos parâmetros que se obtêm como solução são mais seguramente avaliados, de forma independente dos erros das medidas, sobretudo no caso de estas últimas terem erro relativo mui-

to elevado.

6.1.6.4 - as chamadas medidas aberrantes, "outliers", são facilmente detectadas, independentemente dos erros das medidas.

6.1.6.5 - a análise estatística em que, em último caso, se fundamenta a interpretação pode, facilmente, ser substituída por métodos não explicitamente estatísticos como, por exemplo, processos de discriminação sinal/ruído, de implementação simples.

6.1.6.6 - torna-se fácil, em caso de necessidade, definir quais as medidas suplementares a um determinado lote que é preciso obter para conseguir uma inversão mais segura e precisa.

6.1.6.7 - as correlações entre os parâmetros, em lugar de prejudicarem a inversão, nos termos que o chamado princípio de equivalência estipula, podem, ao contrário, facilitá-la.

6.1.7 - O método, em igualdade de circunstâncias, compara-se, pelo menos, em precisão das soluções e esforço computacional, com os outros métodos de mínimos quadrados a que chamámos globais, tendo, porém, sobre eles as vantagens já indicadas.

6.2 Perspectivas futuras

Permitimo-nos, como conclusão última do trabalho, apontar algumas linhas futuras de desenvolvimento que, a nosso ver, interessaria explorar.

Assim:

6.2.1 - O método precisa de ver a sua implementação, com as modificações que se revelarem oportunas, algumas das quais sugeridas neste trabalho, alargada a terrenos de mais estratos.

6.2.2 - Os programas escritos deverão ser optimizados ao máximo e condensados num "package", devidamente complementado por rotinas de tratamento estatístico apropriadas.

6.2.3 - Deve ser feito um esforço no sentido de acelerar, com controlo do erro, o cálculo de potências e suas derivadas nos parâmetros.

6.2.4 - Métodos não explicitamente estatísticos de análise das curvas de parâmetros aparentes devem ser explorados, em conjunto com a aceleração do cálculo e a optimização e condensação dos algoritmos e programas, de forma a permitir a inversão "on-line".

6.2.5 - Como qualquer outro, este novo método deve ser exaustivamente testado de forma a definir as suas capacidades limite na interpretação de casos difíceis.

6.2.6 - Devem ser ensaiadas diferentes configurações tetraelectródicas colineares simétricas e estudar (o que o método, pela sua estrutura, permite) os seus poderes de resolução, profundidades de penetração e investigação e outras características.

CEEUP (I.N.E.G.) PORTO BIBLIOTECA

6.2.7 - Os conceitos de potência consumida entre eléctrodos aparentes, de parâmetros aparentes e de curvas de parâmetros aparentes devem ser explorados, não só quanto, por exemplo, à informação sobre terrenos estratificados complexos que pode ser retirada de curvas de parâmetros aparentes de modelos mais simples, como o de um estrato, mas também quanto à sua utilização na interpretação de terrenos de estratos inclinados ou mesmo não estratificados, bem como na detecção e avaliação de formações anómalas.

ANEXO A

POTÊNCIAS E SUAS DERIVADAS NOS PARÂMETROS EM TERRENOS DE UM E DE DOIS ESTRATOS

BIBLIOTECA F.E. PORTO

A.1 Terrenos de um estrato

$$P = \frac{R_1 I^2}{\pi}\left(\frac{1}{C} - \frac{1}{D-C}\right) + \frac{2 R_1 I^2}{\pi}\int_0^{\infty}\frac{K_1 e^{-2\lambda H_1}}{1-K_1 e^{-2\lambda H_1}}\left(J_0(\lambda C) - J_0(\lambda(D-C))\right) d\lambda$$

$$= \frac{R_1 I^2}{\pi}\left(\frac{1}{C} - \frac{1}{D-C}\right) + \frac{2 R_1 I^2}{\pi}\int_0^{\infty}\sum_{p=1}^{\infty} K_1^p e^{-2\lambda H_1 p}\left(J_0(\lambda C) - J_0(\lambda(D-C))\right) d\lambda$$

$$\text{com } K_1 = \frac{R_2 - R_1}{R_2 + R_1}$$

e onde:

- R_1 é a resistividade superficial;
- R_2, a resistividade do substrato;
- H_1, a profundidade da superfície de separação;
- I, a corrente injectada;
- C, a semi largura horizontal interna dos eléctrodos aparentes;
- D, a distância entre eléctrodos de corrente.

É então

$$\frac{\partial P}{\partial R_1} = \frac{P}{R_1} + \frac{2 R_1 I^2}{\pi}\int_0^{\infty}\sum_{p=0}^{\infty} p K_1^{p-1}\frac{\partial K_1}{\partial R_1} e^{-2\lambda H_1 p}\left(J_0(\lambda C) - J_0(\lambda(D-C))\right) d\lambda$$

com

$$\frac{\partial K_1}{\partial R_1} = \frac{-2\ R_2}{(R_1+R_2)^2},$$

$$\frac{\partial P}{\partial R_2} = \frac{2\ R_1\ I^2}{\pi} \int_0^{\infty} \sum_{p=1}^{\infty} p\ K_1^{p-1}\ \frac{\partial K_1}{\partial R_2}\ e^{-2\lambda H_1 p}\ (J_0\ (\lambda C) - J_0\ (\lambda(D-C)))\ d\lambda$$

com

$$\frac{\partial K_2}{\partial R_2} = \frac{2\ R_1}{(R_1+R_2)^2},$$

e

$$\frac{\partial P}{\partial H_1} = -\frac{4\ R_1\ I^2}{\pi} \int_0^{\infty} \sum_{p=1}^{\infty} p\ K_1^{p}\ e^{-2\lambda H_1 p}\ \lambda(J_0\ (\lambda C) - J_0\ (\lambda(D-C)))\ d\lambda$$

A.2. Terrenos de dois estratos

$$P = \frac{R_1\ I^2}{\pi}\ (\frac{1}{C} - \frac{1}{D-C}) + \frac{2\ R_1\ I^2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{K_1\ e^{-2\lambda H_1} + K_2\ e^{-2\lambda H_2}}{1+K_1 K_2\ e^{-2\lambda(H_2-H_1)} - K_1\ e^{-2\lambda H_1} - K_2\ e^{-2\lambda H_2}}$$

$$(J_0\ (\lambda C) - J_0\ (\lambda(D-C)))\ d\lambda$$

$$= \frac{R_1\ I^2}{\pi}\ (\frac{1}{C} - \frac{1}{D-C}) + \frac{2\ R_1\ I^2}{\pi}\ \alpha \int_0^{\infty} (K_1\ e^{-2\lambda H_1} + K_2\ e^{-2\lambda H_2}) \sum_{p=0}^{\infty}$$

$$(1 - \alpha - \alpha K_1 K_2\ e^{2\lambda(H_2-H_1)} + \alpha K_1\ e^{-2\lambda H_1} + \alpha K_2\ e^{-2\lambda H_2})^p$$

$$(J_0(\lambda C) - J_0(\lambda(D-C)))\, d\lambda$$

com

$$K_2 = \frac{R_3 - R_2}{R_3 + R_2}$$

e onde:

- R_2 representa agora a resistividade do 2º estrato;
- R_3, a resistividade do substrato;
- H_1, a profundidade da superfície de separação entre o estrato superficial e o 2º estrato;
- H_2, a profundidade da superfície de separação entre o 2º estrato e o substrato.
- α, parâmetro de Van Dam

É então

$$\frac{\partial P}{\partial R_1} = \frac{P}{R_1} + \frac{2\, R_1\, I^2}{\pi}\alpha\, \frac{\partial K_1}{\partial R_1} \int_0^{\infty} \sum_{p=0}^{\infty} [e^{-2\lambda H_1} + (p+1)\,\alpha\,(K_1\, e^{-2\lambda H_1} + K_2\, e^{-2\lambda H_2})$$

$$(-K_2\, e^{-2\lambda(H_2-H_1)} + e^{-2\lambda H_1})](1 - \alpha - \alpha K_1\, K_2\, e^{-2\lambda(H_2-H_1)} + \alpha K_1\, e^{-2\lambda H_1} + \alpha K_2\, e^{-2\lambda H_2})^p$$

$$(J_0(\lambda C) - J_0(\lambda(D-C)))\, d\lambda$$

$$\frac{\partial P}{\partial H_1} = - \frac{4\ R_1\ I^2}{\pi} \alpha K_1 \int_0^\infty \sum_{p=0}^{\infty} [e^{-2\lambda H_1} + (p+1)(K_1\ e^{-2\lambda H_1} + K_2\ e^{-2\lambda H_2})$$

$$\alpha\ (K_2\ e^{-2\lambda(H_2-H_1)} + e^{-2\lambda H_1})]\ (1 - \alpha - \alpha\ K_1\ K_2\ e^{-2\lambda(H_2-H_1)} + \alpha\ K_1\ ^{-2\lambda H_1} +$$

$$+ \alpha\ K_2\ e^{-2\lambda H_2})^p \lambda\ (J_0\ (\lambda C) - J_0\ (\lambda(D-C)))d\lambda$$

$$\frac{\partial P}{\partial R_2} = \frac{2\ R_1\ I^2}{\pi} \alpha \int_0^\infty \sum_{p=0}^{\infty} \{\frac{\partial K_1}{\partial R_2} e^{-2\lambda H_1} + \frac{\partial K_2}{\partial R_2} e^{-2\lambda H_2} + (p+1)(K_1\ e^{-2\lambda H_1} + K_2\ e^{-2\lambda H_2})$$

$$\alpha[(- \frac{\partial K_1}{\partial R_2} K_2 - K_1 \frac{\partial K_2}{\partial R_2})\ e^{-2\lambda(H_2-H_1)} + \frac{\partial K_1}{\partial R_2} e^{-2\lambda H_1} + \frac{\partial K_2}{\partial R_2} e^{-2\lambda H_2}\ ]\}$$

$$(1 - \alpha - \alpha K_1\ K_2\ e^{-2\lambda(H_2-H_1)} + \alpha\ K_1\ e^{-2\lambda H_1} + \alpha\ K_2\ e^{-2\lambda H_2})^p$$

$$(J_0\ (\lambda C) - J_0\ (\lambda(D-C)))\ d\lambda$$

$$\frac{\partial P}{\partial H_2} = - \frac{4\ R_1\ I^2}{\pi} \alpha K_2 \int_0^\infty \sum_{p=0}^{\infty} [e^{-2\lambda H_2} + (p+1)(K_1\ e^{-2\lambda H_1} + K_2\ e^{-2\lambda H_2})$$

$$\alpha(-K_1\ e^{-2\lambda(H_2-H_1)} + e^{-2\lambda H_2})]\ (1 - \alpha - \alpha K_1\ K_2\ e^{-2\lambda(H_2-H_1)} +$$

$$\alpha K_1\ e^{-2\lambda H_1} + \alpha K_2\ e^{-2\lambda H_2})^p\ \lambda\ (J_0\ (\lambda C) - J_0\ (\lambda(D-C)))\ d\lambda$$

$$\frac{\partial P}{\partial R_3} = \frac{2\ R_1\ I^2}{\pi}\ \alpha\ \frac{\partial K_2}{\partial R_3} \int_0^{\infty} \sum_{p=0}^{\infty} [e^{-2\lambda H_2} + (p+1)(K_1\ e^{-2\lambda H_1} + K_2\ e^{-2\lambda H_2})$$

$$\alpha\ (-K_1\ e^{-2\lambda (H_2-H_1)} + e^{-2\lambda H_2})\ ]\ (1 - \alpha - \alpha K_1\ K_2\ e^{-2\lambda (H_2-H_1)} +$$

$$+ \alpha K_1\ e^{-2\lambda H_1} + \alpha K_2\ e^{-2\lambda H_2})^p\ (J_0\ (\lambda C) - J_0\ (\lambda (D-C)))\ d\lambda$$

com

$$\frac{\partial K_2}{\partial R_2} = \frac{-2R_3}{(R_2+R_3)^2} \qquad \text{e} \qquad \frac{\partial K_2}{\partial R_3} = \frac{2\ R_2}{(R_2+R_3)^2}$$

ANEXO B

CÁLCULO DE MAJORANTES DO ERRO DE TRUNCATURA DOS DESENVOLVIMENTOS EM SÉRIE DE POTÊNCIAS E DERIVADAS EM TERRENO DE UM ESTRATO

A potência, no caso do terreno de um estrato, vem dada por

$$P = \frac{R_1 I^2}{\pi} \left(\frac{1}{C} - \frac{1}{D-C}\right) + \frac{2 R_1 I^2}{\pi} \int_0^\infty \theta(\lambda) \left(J_0(\lambda C) - J_0(\lambda(D-C))\right) d\lambda$$

com

$$\theta(\lambda) = \frac{K_1 e^{-2\lambda H_1}}{1 - K_1 e^{-2\lambda H_1}} = \frac{P(\lambda)}{Q(\lambda)}$$

onde

$$K_1 = \frac{R_2 - R_1}{R_2 + R_1}$$

Sabemos também que

$$\int_0^\infty \theta(\lambda) \left(J_0(\lambda C) - J_0(\lambda(D-C))\right) d\lambda = \sum_{p=0}^{\infty} \int_0^\infty P(\lambda) \left(1-Q(\lambda)\right)^p$$

$$\left(J_0(\lambda C) - J_0(\lambda(D-C))\right) d\lambda$$

$$= \sum_{p=0}^{\infty} \int_0^\infty K_1^{p+1} e^{-2\lambda H_1 (p+1)} \left(J_0(\lambda C) - J_0(\lambda(D-C))\right) d\lambda =$$

$$= \sum_{p=1}^{\infty} K_1^p \int_0^\infty e^{-2\lambda H_1 p} \left(J_0(\lambda C) - J_0(\lambda(D-C))\right) d\lambda =$$

$$= \sum_{p=1}^{\infty} K_1^p \left(\frac{1}{\sqrt{4 H_1^2 p^2 + C^2}} - \frac{1}{\sqrt{4 H_1^2 p^2 + (D-C)^2}}\right)$$

Quando se calculam n-1 termos deste desenvolvimento em série o erro de truncatura que se comete ao tomar a sua soma pela série é

$$\sum_{p=n}^{\infty} K_1^p \left(\frac{1}{\sqrt{4\ H_1^2\ p^2+C^2}} - \frac{1}{\sqrt{4\ H_1^2\ p^2+(D-C)^2}} \right)$$

majorado por, uma vez que $|K_1| < 1$,

$$\varepsilon = |K_1|^n \int_n^{\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{4\ H_1^2\ x^2+C^2}} - \frac{1}{\sqrt{4\ H^2\ x^2+(D-C)^2}} \right) dx$$

ou, fazendo as transformações $\frac{2\ H_1}{C}\ x = tg\ \phi$, $\frac{2\ H_1}{D-C}\ x = tg\ \theta$ e integrando (Espain, 1973, p. 61),

$$\varepsilon = |K_1|^n \frac{1}{2\ H_1} \ln \left| \frac{\sqrt{4\ H_1^2\ n^2+(D-C)^2}+2\ H_1\ n}{\sqrt{4\ H_1^2\ n^2+C^2}\ +\ 2\ H_1\ n} \right|$$

Utilizando a mesma metodologia e as mesmas mudanças de variáveis, é possível obter majorantes para os erros de truncatura das restantes séries representativas das derivadas.

Os majorantes obtidos provaram permitir uma avaliação bastante razoável do erro de truncatura.

ANEXO C

ELÉCTRODOS LINEARES

C-1 Introdução

A primeira referência à substituição de eléctrodos pontuais por eléctrodos lineares constituídos por, teoricamente, 2 linhas rectas paralelas, de comprimento infinito, deve-se, provavelmente, a Lundberg em 1918, quando propôs a sua utilização no método das cartas de potencial. Mais recentemente, é de referir o trabalho de Parasnis (1965) que aborda também o caso de os eléctrodos lineares serem finitos.

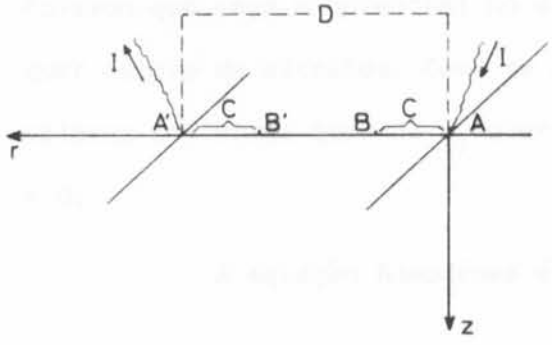


Figura C-1 - Eléctrodos lineares.

De forma geral, importa referir que a utilização de eléctrodos deste tipo, embora mais difícil no trabalho de campo (sobretudo na implantação), conduz, não só a equações mais simples, como, por regra, a maiores profundidades de investigação e melhor resolução (Bhattacharya e Dutta, 1982).

A principal diferença introduzida pelos eléctrodos lineares infinitos é que o campo criado resulta plano ou bidimensional.

C-2 Equações

De forma em tudo idêntica à desenvolvida para o caso de elétrodos pontuais, o leitor poderá facilmente verificar que o potencial criado num ponto P pelos dois eléctrodos lineares A e A', um de injecção e outro de retorno de corrente, em coordenadas cartesianas r, z centradas em A (o campo

é bidimensional), é dado pela expressão

$$V_0 = \frac{1}{4} \frac{R_1 I}{\pi} \ln \frac{(D-r)^2+z^2}{r^2+z^2}$$

quando o terreno é homogêneo de resistividade R_1.

É também esta a solução particular ou forçada da equação de Poisson que rege o potencial no estrato superficial dum terreno dum qualquer número de estratos. Como se espera, a solução dá potencial nulo para valores infinitos quer de r_1 quer de z_1 e satisfaz a $\left.\frac{\partial V_0}{\partial z}\right|_{z=0} = 0$ e a $V_0\Big|_{\substack{r=D/2 \\ z=0}} = 0$.

A equação homogénea é agora

$$\frac{\partial^2 V}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} = 0$$

integrável por separação de variáveis. Repare-se que aqui V não tem o mesmo significado que no capítulo II do corpo da tese. É de facto o potencial criado pelos dois eléctrodos, o de injecção e o de retorno, conjuntamente. A razão da consideração dos dois campos em simultâneo é a da facilidade com que se encontram soluções conjuntas que satisfaçam as condições fronteira, em tudo idênticas às apresentadas para o caso de eléctrodos pontuais, e que conduzem no campo conjunto, como vimos no citado capítulo, à obrigatoriedade do campo ser nulo na vertical do centro do dispositivo ($r = D/2$).

Para o caso do terreno de 2 estratos a solução geral que satisfaz a bom número de condições fronteira impostas é, representando por V^1 o potencial no estrato superficial, V^2 o potencial no 2º estrato e V^3 o potencial no substrato:

$$V^1 = \frac{1}{4}\ \frac{R_1\ I}{\pi}\ \ln\frac{(D-r)^2 + z^2}{r^2 + z^2} + \int_0^\infty A_1(\lambda)\ (e^{-\lambda z}+e^{+\lambda z})\ \text{sen}\ (\lambda(\frac{D}{2} - r))\ d\lambda$$

$$V^2 = \int_0^\infty (A_2(\lambda)\ e^{-\lambda z} + B_2(\lambda)\ e^{\lambda z})\ \text{sen}\ (\lambda(\frac{D}{2} - r))\ d\lambda$$

$$V_3 = \int_0^\infty A_3\ (\lambda)\ e^{-\lambda z}\ \text{sen}\ (\lambda(\frac{D}{2} - r))\ d\lambda$$

A integração da equação de Laplace, equação homogénea, não oferece grandes dificuldades. Não é talvez aparente que o potencial assim escrito venha a cumprir a condição de se anular com $r\to\infty$. O leitor poderá no entanto confirmá-lo recorrendo a Morse e Feshbach (1953, p. 709-710 e, sobretudo, p. 762-763) que estuda um caso semelhante.

As únicas condições fronteira a que as soluções V^1, V^2 e V^3 devem satisfazer e que ainda não foram consideradas são

$$V^1\Big|_{z=H_1} = V^2\Big|_{z=H_1}$$

$$\frac{1}{R_1}\ \frac{\partial V^1}{\partial z}\Big|_{z=H_1} = \frac{1}{R_2}\ \frac{\partial V^2}{\partial z}\Big|_{z=H_1}$$

$$V^2\Big|_{z=H_2} = V^3\Big|_{z=H_2}$$

$$\frac{1}{R_2}\ \frac{\partial V^2}{\partial z}\Big|_{z=H_2} = \frac{1}{R_3}\ \frac{\partial V^3}{\partial z}\Big|_{z=H_2}$$

Para as impor, no entanto, é preciso exprimir V_0 num integral apropriado em λ. Atendendo a Campbell (1951, p. 76, expressão 633.4 em conjunção com as expressões da p.9), conclui-se que

$$\frac{R_1 I}{4\pi} \ln \frac{(D-r)^2 + z^2}{r^2 + z^2} = \int_0^\infty \frac{R_1 I}{\pi} \frac{1}{\lambda} \operatorname{sen} \left(\lambda\left(\frac{D}{2} - r\right)\right) e^{-\lambda z} \operatorname{sen} \frac{\lambda D}{2} \, d\lambda$$

Impondo então as condições fronteira que faltavam, conclui-se ser

$$A_1(\lambda) = \frac{R_1 I}{\pi} \frac{1}{\lambda} \operatorname{sen}\lambda \frac{D}{2} \frac{K_1 e^{-2\lambda H_1} + K_2 e^{-2\lambda H_2}}{1 + K_1 K_2 e^{-2\lambda(H_2 - H_1)} - K_1 e^{-2\lambda H_1} - K_2 e^{-2\lambda H_2}}$$

e resulta então para potência medida, P_2 (trata-se dum terreno a dois estratos), atendendo a que o potencial é medido à superfície entre os pontos $r = C$, $z = 0$ e $r = D-C$, $z = 0$ ou que, dada a simetria do campo, ele é duplo do potencial do ponto $r = C$, $z = 0$,

$$P_2 = \frac{R_1 I^2}{\pi} \ln \frac{D-C}{C} + \frac{2R_1 I^2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\theta_2(\lambda)}{\lambda} 2 \operatorname{sen} \frac{\lambda D}{2} \operatorname{sen} \left(\lambda\left(\frac{D}{2} - C\right)\right) d\lambda$$

em que $\theta_2(\lambda)$ é a função nuclear já conhecida do estudo das equações com eléctrodos pontuais. Com uma transformação elementar vem

$$P_2 = \frac{R_1 I^2}{\pi} \ln \frac{D-C}{C} + 2 \frac{R_1 I^2}{\pi} \int_0^\infty \theta_2(\lambda) \frac{1}{\lambda} (\cos \lambda C - \cos(\lambda(D-C))) \, d\lambda$$

o que constitui um *resultado notável quando comparado com o correspondente para eléctrodos pontuais*

De forma geral, estudando um terreno de qualquer número de estratos, resulta

$$P_n = \frac{R_1 I^2}{\pi} \ln \frac{D-C}{C} + \frac{2R_1 I^2}{\pi} \int_0^{\infty} \theta_n(\lambda) \frac{1}{\lambda} (\cos \lambda C - \cos (\lambda(D-C))) \, d\lambda$$

onde $\theta_n(\lambda)$ é a mesma função Kernel conhecida da situação correspondente de eléctrodos pontuais. Generalizando, *essa função surge na solução dos terrenos estratificados, independentemente do tipo de eléctrodo utilizado.*

Foram escritos e testados programas de interpretação de terrenos estratificados com utilização de eléctrodos lineares infinitos, calculando potências e derivadas por quadratura gaussiana de três pontos dos integrais na forma do produto de dois senos, efectuada entre cada dois zeros consecutivos desse produto. Os resultados confirmaram os obtidos com os eléctrodos pontuais e apontam, como era de esperar, para melhores características dos dispositivos, trazidas por esta forma dos eléctrodos.

Embora na redacção final da dissertação tenha sido relegado para este apêndice, historicamente (e por razões de facilidade computacional), os nossos trabalhos foram inicialmente desenvolvidos sobre este esquema de medida, tendo sido sobre ele construídos os conceitos de recuo, de curvas de parâmetros aparentes, etc.

Estas considerações de facilidade computacional resultaram do facto de o nosso trabalho se ter desenvolvido, simultaneamente com o longo processo de reequipamento informático da Universidade do Porto, em

- COMMODORE PET, 8 KB, BASIC
- HEWLETT PACKARD, 2114 B, 16 KB, ALGOL

- WANG VS 80, 1 MB, FORTRAN IV

- CDC CYBER 170/720, 128 KB, FORTRAN V

ANEXO D

EXEMPLO DE "OUTPUT" DE JOANA

JOANA,TAPES,CARLOS M. C. ESPAIN 84/09/21.

TIPO DE CONFIGURACAO : SCHLUMBERGER

TIPO DE DISTRIBUICAO DE ERROS : UNIFORME

ERRO RELATIVO MAXIMO (PREPOM) = .02

POTENCIA MEDIDA = .69E-03

PRIMEIRA DISTANCIA INTERELECTRODICA = 10

PASSO DAS DISTANCIAS = 1.25

NUMERO DE MEDIDAS = 30

MENOR CORRENTE INJECTADA = .050

MAIOR CORRENTE INJECTADA = 1.146

NUMEROS DE ORDEM DAS MEDIDAS A UTILIZAR : 3 9 17 24 27

DISTANCIAS INTERELECTRODICAS CORRESPONDENTES : 15.6 59.6 355.3 1694.1 3308.7

ITERACOES

V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
8.000	15.000	500.000	150.000	5.000
10.681	8.453	537.196	155.106	39.262
10.257	9.847	395.971	219.610	22.192
10.142	9.987	398.230	245.868	11.992
10.143	9.999	400.280	244.777	9.963
10.143	9.998	400.090	245.069	9.769
10.143	9.998	400.052	245.076	9.782
10.143	9.998	400.053	245.074	9.783
10.143	9.998	400.053	245.074	9.783

APROXIMACAO MENOR QUE PREPOM / 10

CONDICAO DO JACOBIANO = 177

NUMERO TOTAL DE AVALIACOES DA FUNCAO OBJECTIVO = 18

VECTORES DE DADOS 3	9	17	24	27	VALORES SINGULARES	VECTORES DE PARAMETROS V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
-.429	-.594	-.464	-.002	.497	.42E-03	-.792	.601	.039	.083	.053
.872	-.383	-.304	-.022	.011	.87E-04	.603	.797	-.037	-.009	.002
.217	.274	.270	.464	.768	.98E-04	.098	-.044	.504	.754	.408
-.016	.570	-.785	.233	-.064	.24E-05	-.004	-.018	-.640	.649	-.410
-.091	-.315	.059	.854	-.399	.13E-04	.001	.029	.577	.056	-.814

DESVIOS MEDIOS QUADRATICOS APROXIMADOS DOS PARAMETROS

V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
.19	.31	43.20	33.82	4.56

NUMEROS DE ORDEM DAS MEDIDAS A UTILIZAR : 4 11 18 23 29

DISTANCIAS INTERELECTRODICAS CORRESPONDENTES : 19.5 93.1 444.1 1355.3 5169.9

ITERACOES

V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
9.689	9.286	330.304	300.843	9.671
10.509	10.661	408.568	225.541	11.191
10.439	10.694	441.723	217.795	10.621
10.442	10.703	445.551	215.969	10.659
10.442	10.704	445.814	215.851	10.660
10.442	10.704	445.830	215.844	10.660
10.442	10.704	445.831	215.844	10.660

APROXIMACAO MENOR QUE PREPOM / 10

CONDICAO DO JACOBIANO = 191

NUMERO TOTAL DE AVALIACOES DA FUNCAO OBJECTIVO = 12

VECTORES DE DADOS					VALORES SINGULARES	VECTORES DE PARAMETROS				
4	11	18	23	29		V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
-.456	-.589	-.453	-.135	.471	.41E-03	-.771	.618	.012	.042	.147
.308	.238	.214	.227	.867	.13E-03	.239	.064	.240	.380	.858
-.834	.423	.325	.123	.068	.72E-04	-.590	-.779	.115	.118	.137
-.031	-.308	-.002	.939	-.149	.29E-04	.024	.085	.564	.674	-.469
-.002	-.568	.802	-.184	.006	.21E-05	.008	.025	.781	-.621	.053

DESVIOS MEDIOS QUADRATICOS APROXIMADOS DOS PARAMETROS

V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
.24	.42	61.61	34.15	.79

NUMEROS DE ORDEM DAS MEDIDAS A UTILIZAR : 2 12 19 25 30

DISTANCIAS INTERELECTRODICAS CORRESPONDENTES : 12.5 116.4 555.1 2117.6 6462.3

ITERACOES

V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
10.143	9.998	400.053	245.074	9.783
9.704	9.295	319.336	303.972	9.746
9.689	9.281	329.581	301.572	9.666
9.689	9.285	330.234	300.913	9.671
9.689	9.286	330.298	300.849	9.671
9.689	9.286	330.304	300.843	9.671

APROXIMACAO MENOR QUE PREPOM / 10

CONDICAO DO JACOBIANO = 81

NUMERO TOTAL DE AVALIACOES DA FUNCAO OBJECTIVO = 10

VECTORES DE DADOS					VALORES SINGULARES	VECTORES DE PARAMETROS				
2	12	19	25	30		V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
-.488	-.652	-.429	.118	.373	.36E-03	-.790	.586	.005	.037	.177
.286	.221	.165	.125	.909	.16E-03	.246	.035	.147	.192	.938
-.825	.462	.312	-.012	.092	.98E-04	-.561	-.808	.078	.036	.158
.012	-.044	.181	.969	-.159	.50E-04	.010	.041	.684	.683	-.251
-.002	-.557	.812	-.175	.012	.45E-05	.006	.038	.710	-.702	.029

DESVIOS MEDIOS QUADRATICOS APROXIMADOS DOS PARAMETROS

V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
.16	.29	23.04	21.76	.25

NUMEROS DE ORDEM DAS MEDIDAS A UTILIZAR : 5 10 21 26 30

DISTANCIAS INTERELECTRODICAS CORRESPONDENTES : 24.4 74.5 867.4 2647.0 6462.3

ITERACOES

V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
10.442	10.704	445.831	215.844	10.660
10.126	10.278	386.676	248.839	10.080
10.098	10.236	389.439	249.747	10.029
10.098	10.237	389.619	249.599	10.030
10.099	10.238	389.650	249.579	10.030
10.099	10.238	389.654	249.576	10.030

APROXIMACAO MENOR QUE PREPOM / 10

CONDICAO DO JACOBIANO = 87

NUMERO TOTAL DE AVALIACOES DA FUNCAO OBJECTIVO = 10

VECTORES DE DADOS					VALORES SINGULARES	VECTORES DE PARAMETROS				
5	10	21	26	30		V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
-.545	-.638	-.305	.296	.339	.39E-03	-.756	.629	.026	.055	.168
.247	.259	.166	.145	.907	.17E-03	.187	-.053	.140	.204	.949
.788	-.515	-.337	.002	-.006	.47E-04	.619	.767	-.139	-.092	-.038
.142	.028	.299	.910	-.246	.63E-04	.101	.101	.588	.752	-.262
-.019	.510	-.822	.250	-.029	.44E-05	-.025	-.048	-.784	.618	-.014

DESVIOS MEDIOS QUADRATICOS APROXIMADOS DOS PARAMETROS

V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
.37	.50	27.93	17.64	.20

NUMEROS DE ORDEM DAS MEDIDAS A UTILIZAR : 1 13 20 26 27

DISTANCIAS INTERELECTRODICAS CORRESPONDENTES : 10.0 145.5 693.9 2647.0 3308.7

ITERACOES

V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
10.099	10.238	389.654	249.576	10.030
10.078	10.130	374.141	270.702	5.893
10.069	10.072	369.898	269.082	7.523
10.071	10.076	372.062	267.372	7.541
10.072	10.094	374.725	265.061	7.725
10.073	10.101	375.615	264.544	7.663
10.073	10.103	375.843	264.426	7.643
10.073	10.103	375.899	264.397	7.638
10.073	10.103	375.913	264.390	7.636
10.073	10.103	375.914	264.390	7.636
10.073	10.103	375.914	264.390	7.636
10.073	10.103	375.915	264.389	7.636

APROXIMACAO MENOR QUE PREPOM / 10

CONDICAO DO JACOBIANO = 257

NUMERO TOTAL DE AVALIACOES DA FUNCAO OBJECTIVO = 32

VECTORES DE DADOS					VALORES SINGULARES	VECTORES DE PARAMETROS				
1	13	20	26	27		V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
-.417	-.577	-.352	.296	.532	.39E-03	-.802	.573	.073	.133	.071
.849	-.092	.003	.377	.357	.12E-03	.564	.637	.271	.404	.200
-.306	.569	.464	.371	.479	.97E-04	-.196	-.514	.480	.616	.295
.094	.378	-.454	-.609	.521	.89E-05	.002	-.036	-.670	.143	.728
-.053	.438	-.674	.512	-.297	.15E-05	-.002	-.018	-.493	.647	-.581

DESVIOS MEDIOS QUADRATICOS APROXIMADOS DOS PARAMETROS

V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
.14	.37	50.89	54.66	8.53

NUMEROS DE ORDEM DAS MEDIDAS A UTILIZAR : 2 11 17 25 29

DISTANCIAS INTERELECTRODICAS CORRESPONDENTES : 12.5 93.1 355.3 2117.6 5169.9

ITERACOES

V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
10.073	10.103	375.915	264.389	7.636
9.808	10.067	448.100	218.975	10.264
9.810	10.094	469.708	211.233	10.217
9.811	10.099	471.405	210.664	10.206
9.811	10.100	471.484	210.633	10.206
9.811	10.100	471.484	210.633	10.206

APROXIMACAO MENOR QUE PREPOM / 10

CONDICAO DO JACOBIANO = 221

NUMERO TOTAL DE AVALIACOES DA FUNCAO OBJECTIVO = 12

VECTORES DE DADOS					VALORES SINGULARES	VECTORES DE PARAMETROS				
2	11	17	25	29		V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
-.399	-.583	-.478	.145	.501	.43E-03	-.776	.606	.035	.075	.155
.528	.199	.191	.268	.757	.14E-03	.405	.266	.239	.397	.742
-.747	.463	.374	.024	.296	.98E-04	-.484	-.749	.132	.186	.391
.070	.031	-.072	-.949	.297	.44E-04	.016	.002	-.490	-.698	.522
.009	.636	-.768	.077	-.008	.19E-05	-.002	-.018	-.827	.561	-.026

DESVIOS MEDIOS QUADRATICOS APROXIMADOS DOS PARAMETROS

V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
.15	.32	74.38	33.74	.49

NUMEROS DE ORDEM DAS MEDIDAS A UTILIZAR : 5 10 20 23 28

DISTANCIAS INTERELECTRODICAS CORRESPONDENTES : 24.4 74.5 693.9 1355.3 4135.9

ITERACOES

V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
9.811	10.100	471.484	210.633	10.206
10.214	10.581	464.701	206.257	9.790
10.344	10.748	460.599	207.252	10.898
10.304	10.665	453.670	209.718	10.986
10.288	10.616	440.932	216.758	10.705
10.222	10.477	418.516	230.635	10.060
10.144	10.319	394.394	248.130	9.237
10.095	10.225	383.086	258.392	8.609
10.086	10.207	380.927	260.661	8.437
10.085	10.206	380.743	260.847	8.423
10.085	10.206	380.727	260.862	8.422
10.085	10.206	380.725	260.864	8.422

APROXIMACAO MENOR QUE PREPOM / 10

CONDICAO DO JACOBIANO = 153

NUMERO TOTAL DE AVALIACOES DA FUNCAO OBJECTIVO = 25

VECTORES DE DADOS					VALORES SINGULARES	VECTORES DE PARAMETROS				
5	10	20	23	28		V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
-.499	-.585	-.337	-.121	.529	.42E-03	-.755	.544	.034	.072	.091
.293	.263	.265	.337	.813	.11E-03	.179	.031	.471	.627	.594
-.814	.416	.325	.239	-.046	.49E-04	-.625	-.750	.185	.111	-.037
.051	-.526	.180	.795	-.237	.18E-04	.085	.147	.568	.263	-.761
.012	-.373	.824	-.426	.025	.26E-05	.014	.029	.648	-.721	.242

DESVIOS MEDIOS QUADRATICOS APROXIMADOS DOS PARAMETROS

V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
.38	.52	36.68	33.53	2.25

NUMEROS DE ORDEM DAS MEDIDAS A UTILIZAR : 1 12 18 24 30

DISTANCIAS INTERELECTRODICAS CORRESPONDENTES : 10.0 116.4 444.1 1694.1 6462.3

ITERACOES

V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
10.205	10.230	373.027	265.850	8.479
10.049	9.789	377.437	260.818	10.106
10.048	9.822	390.539	250.597	10.138
10.053	9.880	398.113	245.750	10.157
10.054	9.886	399.759	244.736	10.163
10.054	9.887	400.067	244.540	10.165
10.054	9.887	400.124	244.503	10.165
10.054	9.887	400.135	244.497	10.165

APROXIMACAO MENOR QUE PREPOM / 10

CONDICAO DO JACOBIANO = 132

NUMERO TOTAL DE AVALIACOES DA FUNCAO OBJECTIVO = 14

VECTORES DE DADOS					VALORES SINGULARES	VECTORES DE PARAMETROS				
1	12	18	24	30		V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
-.455	-.653	-.500	-.008	.343	.36E-03	-.797	.582	-.007	.017	.160
.261	.185	.155	.113	.928	.17E-03	.230	.049	.114	.168	.951
-.851	.409	.308	.055	.099	.11E-03	-.558	-.810	.068	.052	.159
.013	-.134	.072	.982	-.109	.43E-04	.007	.054	.628	.747	-.212
-.008	-.595	.791	-.139	.006	.27E-05	.002	.026	.767	-.641	.019

DESVIOS MEDIOS QUADRATICOS APROXIMADOS DOS PARAMETROS

V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
.14	.30	44.80	29.30	.26

NUMEROS DE ORDEM DAS MEDIDAS A UTILIZAR : 3 13 21 24 28

DISTANCIAS INTERELECTRODICAS CORRESPONDENTES : 15.6 145.5 867.4 1694.1 4135.9

ITERACOES

V(1).	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
10.085	10.206	380.725	260.864	8.422
10.210	10.249	376.603	261.936	8.776
10.207	10.240	374.812	263.961	8.612
10.206	10.235	373.918	264.910	8.544
10.206	10.233	373.469	265.384	8.511
10.206	10.231	373.244	265.621	8.494
10.206	10.231	373.132	265.739	8.486
10.205	10.230	373.076	265.798	8.482
10.205	10.230	373.048	265.828	8.480
10.205	10.230	373.034	265.843	8.479
10.205	10.230	373.027	265.850	8.479

APROXIMACAO MENOR QUE PREPOM / 10

CONDICAO DO JACOBIANO = 73

NUMERO TOTAL DE AVALIACOES DA FUNCAO OBJECTIVO = 20

VECTORES DE DADOS					VALORES SINGULARES	VECTORES DE PARAMETROS				
3	13	21	24	28		V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
-.465	-.595	-.301	-.011	.582	.38E-03	-.784	.602	.048	.093	.112
.579	.148	.197	.289	.721	.11E-03	.413	.326	.394	.552	.513
-.670	.538	.383	.261	.218	.82E-04	-.464	-.723	.301	.341	.234
.004	-.440	.245	.809	-.304	.19E-04	.019	.079	.347	.451	-.818
.001	-.376	.814	-.441	.029	.52E-05	.009	.042	.795	-.605	.007

DESVIOS MEDIOS QUADRATICOS APROXIMADOS DOS PARAMETROS

V(1)	V(2)	V(3)	V(4)	V(5)
.19	.33	23.56	15.38	1.02

NUMERO DE ESTRATOS DO TERRENO = 2

PARAMETROS REAIS : 10.000, 10.000, 390.000, 250.000, 10.000

TEMPO DE EXECUCAO DO PROGRAMA = 1369.646 SECS

Beware of the man of one book

Disraeli, Tancred, 1847

BIBLIOGRAFIA

Adby, P.R., e Dempster, M.A.H., 1974, Introduction to optimization methods London, Chapman and Hall

Aivazian, S., 1978, Etude statistique des dépendances: Moscovo, Mir

Angot, A., 1965, Compléments de Mathématiques à l'usage des ingénieurs de l'Électrotechnique et des Télécommunications: Paris, Revue d'optique

Apparao, A., 1981, Additional reply to comments by Gupta Sarma on "A theorem for direct current regimes and some of its consequences" and some related papers: Geophys. Prosp., v. 29, p. 822-824

Argelo, S.M., 1967, Two computer programs for the calculation of standard--graphs for resistivity prospecting: Geophys. Prosp., v. 15, p. 71-91

Aspin, A.A., 1949, Tables for use in comparisons whose accuracy involves two variances separately estimated: Biometrika, v. 36, p. 290-293

Backus, G. E., e Gilbert, J.F., 1967, Numerical applications of a formalism for geophysical inverse problems: Geophys. J. Roy. Astr. Soc., v. 13, p. 247-276

Backus G.E., e Gilbert, J.F., 1968, The resolving power of gross earth data: Geophys. J. Roy. Astr. Soc., v. 16, p. 169-205

Backus, G. E., e Gilbert, J. F.,1969, Uniqueness in the inversion of inna-
curate gross earth data: Phil. Trans. Roy. Soc.London A., nº 266,
p. 123-192

Bard, Y., 1974, Nonlinear parameter estimation: New York, Academic Press

Beale, E. M. L., 1960, Confidence regions in nonlinear estimation: J. Roy.
Statist. Soc., s. B, v. 22, p. 41-76

Bernabini, M., e Cardarelli, E., 1978, The use of filtered Bessel functi-
ons in direct interpretation of Geoelectrical soundings: Geophys.
Prosp., v. 26, p. 841-852

Betts, J. T., 1976, Solving the nonlinear least-squares problems:J.Opt. Th.
Applics.,v. 18, p. 469-483

Bhattacharya, B. B., e Dutta, I., 1982, Depth of investigation studies for
gradient arrays over homogeneous isotropic half-space: Geophysics,
v. 47, p. 1198-1203

Bichara, M., e Lakshmanan , J., 1976, Fast automatic processing of resisti-
vity soundings: Geophys. Prosp., v. 24, p. 354-370

Bishop, T. A., e Dudewicz, E. J., 1977, Heteroescedastic ANOVA: Technical
Report nº 143, Department of Statistics, The Ohio State University,
Columbus (citado em Dudewicz e Bishop, 1979)

Box, G. E. P., e Muller, M. E., 1958, A note on the generation of random normal deviates: Ann. Math. Statist., v. 29, p. 610-611

Brandt, S., 1973, Statistical and computational methods in data analysis: Amsterdam, North-Holland

Bremermann, H., 1970, A method of unconstrained global optimization: Math. Biosciences, v. 9, p. 1-15

Brezinsky, C., 1978, Algorithmes d'accélération de la convergence. Étude numérique: Paris, Éditions Technip.

Brigham, E. O., 1974, The fast Fourier transform: New York, Prentice-Hall

Broyden, C. G., 1967, Quasi-Newton methods and their application to function minimization: Math. Computing, v. 21, p. 368 - 381

Broyden, C. G., 1970, The convergence of a class of double-rank minimization algorithms, Parts I & II, J. Inst. Maths. Applics., v. 6, p. 66--90 e 222-231

Campbell, G. A., e Foster, R. M., 1951, Fourier integrals for practical applications: Toronto, Van Nostrand

Chan, S. H., 1970, A study on the direct interpretation of resistivity sounding data measured by Wenner electrode configuration: Geophys.

Prosp., v. 18, p. 215-235

Chyba, J., 1983, On the interpretation of resistivity soundings by the least--squares method: Geophys. Prosp., v. 31, p. 795-799

Clara, A., 1964, Prospecção de estruturas tabulares por cartas de potenciais. Estudo em modelo reduzido: Boletim da Soc. Geológ. de Portugal, v. 15, p. 277-296

Coen, S., e Wang-Ho Yu, M., 1981, The inverse problem of the direct current conductivity profile of a layered earth: Geophysics, v. 46, p. 1702--1713

Cox, M. G., 1977, A survey of numerical methods for data and function approximations, in Jacobs, D. A. H., editor, The state of the art in numerical analysis: London, Academic Press

Cramer, H., 1960, Métodos matemâticos de estadîstica: Madrid. Aguilar

Dahlquist, G., e Bjorck, A., 1974, Numerical methods: New Jersey. Prentice--Hall

Davidon, W. C., 1959, Variable metric method for minimization: A. E. C. (U.S.) Research and development repot nº ANL 5990 (citado em Adby et al, 1974)

Davis, J. C., 1973, Statistics and data analysis in Geology: New York, John Wiley

Day, N. E., 1969, Statistical considerations for non-linear least squares problem, in Anderssen, R. S., e Osborne, M. R., editores, Least squares methods in data analysis: Camberra, Australian National University

Dennis, J. E., Jr., 1973, Some computational techniques for the nonlinear least-squares problem, in Byrne, G. D., e Hall, C. A., editores, Numerical solution of systems of nonlinear algebraic equations: London, Academic Press

Dennis, J. E., Jr., 1977, Nonlinear least squares and equations, in Jacobs, D. A. H., editor, The state of the art in numerical analysis: London, Academc Press

Dennis, J. E., Jr., Gay, D. M. e Welsch, R. E., 1977, An adaptive nonlinear least-squares algorithm; Report TR 77-321, Department of Computer Sciences, Cornell University (citado em Gill, Murray e Wrigt, 1981)

Doll, H. G., 1951, The Laterolog: A new resistivity logging method with electrodes using an automatic focussing system: Trans. Amer. Inst. of Mining and Mettalurgical Engineerings nº 198, p. 17-32

Dudewicz, E. J., e Bishop, T. A., 1979, The heteroescedastic method, in Rustagi, Jagdish S., editor, Optimizing methods in statistics: New York, Academic Press

Ebert, A., 1943, Guendlagen zur Auswertung geoelektrisches Tiefenmessungen: Beitrage zur angewaudten Geophysic, v. 10, p. 1-17

Erdélyi, A., Magnus, W., Oberhettinger, F.,Tricomi, F. G.,Bertin, D., Fulks, W. B., Harvey, A. R., Thomsen, D. L., Jr., Weber, M. A., Whitney, E. L., 1953, Bateman Manuscript Project. Higher transcendental functions: New York, Mc. Graw-Hill

Espain, C. (pai), 1973, Cálculo diferencial e integral, vol. II, Cálculo de integrais indefinidos: Porto, Asa

Evjen, H. M., 1938, Depth factor and resolving power of electrical measurements: Geophysics, v. 3, p. 78-95

Flathe, H., 1955, A pratical method of calculating geoelectrical model graphs for horizontally stratified media: Geophys. Prosp., v. 3, p. 268-294

Fletcher, R. e Powell, M. J. D., 1963, A rapidly convergent descent method for minimization: Computer, J., v. 6, p. 163-168

Fletcher, R., 1970, A new approach to variable metric algorithms: Computer J., v. 13, p. 317-322

Fletcher, R., 1971 a, A modified Marquardt subroutine for nonlinear least squares: Report R 6799, Atomic Energy Research Establishment, Harwell, England (citado em Gill, Murray e Wrigt, 1981)

Fletcher, R., 1971 b, A general quadratic programming algorithm: J. Inst. Maths. Applics., v. 7, p. 76-91

Fox, L., 1964, An introduction to numerical linear algebra: Oxford, Clarendon Press

Forsythe, G. E., Malcolm, M. A., e Moler, C. B., 1977, Computer methods for mathematical computations: New Jersey, Prentice-Hall

Francis, J., 1961/62, The Q. R. transformation. A unitary analogue to the LR transformation: Computer J., v. 4, p. 265-271

Freund, R. J., e Minton, P. D., 1979, Regression methods. A tool for data analysis: New York, Marcel Dekker

Gay, D. M., 1981, Perturbation bounds for nonlinear equations: SIAM J. Numer. Anal, v. 18, p. 654-663

Ghosh, D. P., 1971, The applications of linear filter theory to the direct

interpretation of geoelectrical resistivity measurement: Geophys. Prosp. v. 19, p. 192-217

Gill, P. E., e Murray, W., 1972, Quasi-Newton methods for unconstrained optimization: J. Inst. Maths. Applics., v. 9, p. 91-108

Gill, P. E., e Murray, W, 1974, Newton-type methods for unconstrained and linearly constrained optimization: Math. Prog., v. 28, p. 311--350

Gill, P. E., e Murray, W., 1978, Algorithms for the solution of the nonlinear least squares problem: SIAM J. Numer. Anal., v. 15, p. 977--992

Gill, P. E., Murray, W., e Wright, M. H., 1981, Practical optimization: London, Academic Press

Ginzburg, A., Loewenthal, D., e Shoham, Y., 1976, On the automatic interpretation of direct current resistivity soundings: Pageoph., v. 114, p. 983-995

Gnanadesikan, R., 1977, Methods for statistical data analysis of multivariate observations: New York, John Wiley

Goldfeld, S. M., e Quandt, R. E., 1972, Nonlinear methods in econometrics: Amsterdam, North-Holland

Golub, G. H., e Reinsch, C., 1971, Singular value decompositions and least squares solution, in Wilkinson, J. H., e Reinsch, C., Handbook for automatic computations, vol. II, Linear Algebra: Heidelberg, Springer

Golub, G. H., e Varah, J. M., 1974, On a characterization of the best l_2-scaling of a matrix: SIAM J. Numer. Anal., v. 11, p. 472-479

Gomes Teixeira, 1888, Extrait d'une lettre adressée à M. Hermite: Bulletin des Sciences Mathématiques, 2ª série, t. XII, Paris

Grant, F., 1957, A problem in the analysis of geophysical data: Geophysics, v. 22, p. 309-344

Guerreiro, S. C., 1983, Comment on "A Theorem for direct current regimes and some of its consequences" by A. Roy and some related papers and comments: Geophys. Prosp., v. 31, p. 192-195

Gupta, R. N., e Bhattacharya, P. K., 1963, Unipole method of electrical profiling: Geophysics, v. 28, p. 608-616

Guptasarma, D., 1981, Comments on "A theorem for direct current regimes and some of its consequences" and some related papers: Geophys. Prosp., v. 29, p. 308-311

Guptasarma, D., 1982, Optimization of short digital linear filters for increased accuracy: Geophys. Pros., v. 30, p. 501-514

Guttman, I., e Meeter, D.A., 1965, On Beale's measures of nonlinearity; Technometrics, v. 7, p. 623-637

Guttman, I., e Smith, D. E., 1969, Investigation of rules for dealing with outliers in small samples from the normal distribuition I: Estimation of the mean: Technometrics, V. 11, p. 527-550

Guttmna, I., e Smith, D. E., 1971, Investigation of rules for dealing with outliers in small samples from the normal distribution II: Estimation of the variance: Technometrics, v. 13, p. 101-111

Hartley, H. O., 1964, Exact confidence regions for the parameters in nonlinear regression laws: Biometrika, v. 51, p. 347-353

Hoerl, A. E., e Kennard, R. W., 1970 a, Ridge regression: biased estimation for nonorthogonal problems: Technometrics, v. 12, p. 55-67

Hoerl, A. E., e Kennard, R. W., 1970 b, Ridge regression: applications to nonorthogonal problems: Technometrics, v. 12, p. 69-82

Hoversten, G. M., Dey, A., e Morrison, H. F., 1982, Comparison of five least-squares inversion techniques in resistity sounding: Geophys. Prosp. v. 30, p. 688-715

Hummel , J. N., 1929/1932, A theoretical study of apparent resistivity in surface potencial methods: Trans,, A.I.M.E., Geophys. Prosp., v. 97, p. 392-422

Inman, J. R., Ryu , J., e Ward, S.H., 1973, Resistivity inversion: Geophysics, v. 38, p. 1088-1108

Inman, J. R., 1975, Resistivity inversion with ridge regression: Geophysics, v. 40, p. 798-817

Johansen, H. K.,1975, An interactive computer/graphic-display-terminal system for interpretation of resistivity soundings: Geophys. Prosp., v. 23, p. 449-458

Johansen, H. K., 1977, A man/computer interpretation system for resistivity soundings over a horizontally stratified earth: Geophys. Prosp., v. 25, p. 667-691

Johansen, H. K., e Sørensen, K., 1979, Fast Hankel transforms: Geophys. Prosp., v. 27, p. 876-901

Jones, A., 1970, Spiral - a new algoritham for non-linear parameter estimation using least squares: Computer J., v. 12, p. 301-308

Journel, A. G., e Huijbregts, 1978, Mining Geoestatistics: London, Academic Press

Jupp, D. L. B., e Vozoff, K., 1975, Stable iterative methods for the inversion of Geophysical data: Geophys. J. Roy. Astr. Soc., v. 42, p. 957-976

Koefoed, O., 1965, Direct methods of interpreting resistivity observations: Geophys. Prosp., v. 13, p. 568-591

Koefoed, O., 1968, The application of the Kernel function in interpreting geoelectrical measurements: Geoexpl. monog., s I, nº 2, Stuttgart. Gebrüder Borntraeger.

Koefoed, O., 1972, A note on the linear filter method of interpreting resistivity sounding data: Geophys. Prosp., v. 20, p. 403-405

Koefoed, O., e Dirks, F. J. H., 1979, Determination of resistivity sounding filters by the Wiener-Hopf least-squares method: Geophys. Prosp., v. 27,p. 245-250

Korn e Korn, 1961, Mathematical handbook for scientists and engineeers: New York, Mc Graw-Hill

Kumar, R., e Chowdary, M. V. R., A numerical method to compute the resistivity transform from Wenner sounding data: Geophys. Prosp., v. 30, p. 898-909

Kunetz, G., e Rocroi, J. P., 1970, Traitement automatic des sondages électriques: Geophys. Prosp., v. 18, p. 157-198

Langer, R. E., 1933, An inverse problem in differential equations: Am. Math. Soc. Bull., s. 2, v. 29, p. 814-820

Lasfargues, P., 1957, Prospection électrique par courants continus: Paris, Masson

Lawson, C. L., e Hanson, R. J., 1974, Solving least squares problems: New Jersey, Prentice-Hall

Levenberg, K., 1944, A method for the solution of certain problems in least squares: Quar. Appl. Math., v. 2, p. 164-168

Lines, L. R,, e Treitel, S., 1984, Tutorial. A review of least-squares inversion and its application to Geophysical problems: Geophys. Prosp., v. 32, p. 159-186

Linnik, Y. V., 1961, Method of least squares and principles of the theory of observations: London, Pergamon Press

Madureira, C. M. N., 1968, Teoria da interpretação das ondas longas em prospecção sísmica: Porto

Maillet, R., 1947, The fundamental equations of electrical prospecting: Geophysics., v. 12, p. 529-556

Majundar, R. K., e Datta, S., 1981, I. P. and resistivity model studies over thin dykes: Geophys. Prosp., v. 29, p. 438-450

Marquardt, D. W., 1963, An algorithm for least-squares estimation of non-linear parameters: J. Soc. Indust. Appl. Math., v. 11, p. 431-441

Marquardt, D. W., 1970, Generalized inverses, ridge regression, biased linear estimation, and nonlinear estimation: Technometrics, v. 12, p. 591--612

Marsaglia, G., e Bray, T. A., 1964, A convenient method for generating normal variables: SIAM Rev., v. 6, p. 260-264

McMillan, R. G., 1971, Tests for one or two outliers in normal samples with unknown variance: Technometrics, v. 13, p. 87-100

McMillan, R. G., e David, H. A., 1971, Tests for one or two outliers in normal samples with know variance: Technometrics, v. 13, p. 75-85

Meyer, S. L., 1975, Data analysis for scientists and engineers; New York, John Wiley

Mifflin, R., 1975, A superlinearly convergent algorithm for minimization without evaluating derivatives: Math. Prog., v. 9, p. 100-117

Mooney, H. M., Orellana, E., Picket, H., e Tornheim, L., 1966, A resistivity computation method for layered earth models: Geophysics, v. 31, p. 192-203

Moore, R. E., e Jones, S. T., 1977, Safe starting regions for iterative methods: SIAM J. Numer. Anal., v. 14, p. 1051-1065

Moore, R. E., e Kioustelidis, J. B., 1980, A simple test for accuracy of approximate solutions to nonlinear (or linear) systems: SIAM J. Numer. Anal., v. 17,p. 521-529

Moré, J. J., 1979, Implementation and testing of optimization software, in Fosdick, L. D., editor, Performance evaluation of numerical software: Amsterdam, North-Holland

Morse, P. M., e Feshbach, H., 1953, Methods of theoretical Physics: New York, Mc Graw-Hill

Murakami, Y., e Uchida, T., 1982, Accuracy of the linear filter coefficients determined by the iteration of the least-squares method: Geophysics, v. 47, p. 244-256

Murteira, B. J. F., 1979, Probabilidade e estatística: Lisboa, Mc Graw-Hill

Muskat, M., e Evinger, H. H., 1941, Current penetration in direct current propectivity: Geophysics, v. 6, p. 397-427.

Nash, J. C., 1979, Compact numerical methods for computers. Linear algebra and function minimization: Bristol, Adam Hilger

Oldenburg, D. W., 1978, The interpretation of direct current resistivity measurements: Geophysics, v. 43, p. 610-625

Orellana, E., 1963, Properties and drawing of the so-called Dar Zarrouk curves: Geophysics, v. 28, p. 199-210

Orellana, E., 1972, Prospección geoeléctrica en corriente continua: Madrid, Paraninfo

Ortega, J. M., e Rheinboldt, W. C., 1970, Iterative solution of nonlinear equations in several variables: London, Academic Press

Parasnis, D. S., 1965, Theory and practice of electric potential and resistivity prospecting using linear current electrodes: Geoexpl., v. 3, p. 3-69

Parasnis, D. S., 1984, More comments on "A theorem for DC regimes and some of its consequences" by A. Roy: Geophys. Prosp., v. 32, p. 139-141

Pekeris, C. L., 1940, Direct methods of interpretation in resistivity prospecting: Geophysics, v. 5, p. 31-42

Powell, M. J. D., 1965, A method for minimizing a sum of squares of non-linear functions without calculating derivatives: Computer J., v. 7, p. 303-307

Powell, M. J. D., 1971, On the convergence of the variable metric algorithm: J. Inst. Math. Applics., v. 7, p. 21-30

Roman, I., 1931, How to compute tables for determining electrical resistivity of underlying beds and their application to geophysical problems: U. S. Bur. Mines Tech. Pap. 502

Romberg. W., 1955, Verein fachte numerische Integration: Kongel Norske Viden. Selskab Forh., v. 28, p. 30-36 (citado em Mooney et al., 1966)

Roy, A., e Apparao, A., 1971, Depth of investigation in direct current methods: Geophysics, v. 36, p. 943-959

Roy, A., 1978, A theorem for direct current regimes and some of its consequences: Geophys. Prosp., v. 26, p. 442-463

Roy, A., 1981, Reply to comments by D. Guptasarma: Geophys. Prosp., v. 29, p. 312-315

Roy, A., 1983, Reply to comments by S. C. Guerreiro: Geophys. Prosp., v. 31, p. 196

Roy, A., 1984, Reply to comments by D. S. Parasnis: Geophys. Prosp., v. 32, p. 142-143

Roy, K. K., e Eliott, H. M., 1980, Model studies on some aspects of resistivity and membrane polarization behaviour over a layered earth: Geophys. Prosp., v. 28, p. 759-775

Santini, R., e Zambrano, R., 1981, A numerical method of calculating the Kernel function from Schlumberger apparent resistivity data: Geophys. Prosp., v. 29, p. 108-127

Shanks, D., 1955, Non linear transformation of divergent and slowly convergent series: J. Math. Phys., v. 34, p. 1-42

Shannon, C. E., 1948, A mathematical theory of communications: Bell System Tech. J., v. 27, p. 379-423 e 623-656

Shano, D. F., 1970, Conditioning of quasi-Newton methods for function minimization: Math. Computing, v. 24, p. 647-657

Silvey, S. D., 1970, Statistical inference: Harmondsworth, Penguin

Slichter, L. B., 1933, Interpretation of resistivity prospecting for horizontal structures: Physics, v. 4, p. 307-322, e 407

Smith, F. B., e Shanno, D. F., 1971, An improved Marquardt procedure for nonlinear regressions: Technometrics, v. 13, p. 63-73

Sneddon, I. N., 1961, Special functions of mathematical physics and chemistry: Edinburg, Oliver and Boyd

Stefanesco, S., e Schlumberger, C. e M., 1930, Sur la distribution électrique potentielle autour d'une prise de terre dans un terrain à couches horizontales, homogènes et isotropes: Journal de Physique et le Rad., v. 7, 1, p. 132-140

Stoer, I., e Bulirsch, P., 1980, Introduction to numerical analysis: New York, Springer

Szaraniec, E., 1980, Direct resistivity interpretation by accumulation of layers: Geophys. Prosp., v. 28, p. 257-268

Szaraniec, E., 1982, Use of the seismic dynamic deconvolution algorithm in direct resistivity interpretation: Geophys. Prosp., v. 30, p. 850-854

Van Dam, J. C., 1965, A simple method for the calculation of standard-graphs to be used in geo-electrical prospecting: Geophys. Prosp., v. 13, p. 37-65

Van Dam, J. C., 1967, Mathematical denotation of standard-graphs for resistivity prospecting in view of their calculation by means of a digital computer: Geophys. Prosp., v. 15, p. 57-70

Vozoff, K., 1958, Numerical resistivity analysis. Horizontal layers: Geophysics, v. 23, p. 536-556

Ward, S. H., 1980, Electrical, electromagnetic, and magnetotelluric methods: Geophysics, v. 45, p. 1659-1666

Welch, B. L., 1947, The generalization of Student's problem when several different population variances are involved: Biometrika, v. 34, p. 28-35

Wilkinson, J. H., 1965, The algebraic eigenvalue problem: Oxford, Clarendon Press

Winer, B. J., 1971, Statistical principles in experimental design: Tokyo, Mc Graw-Hill

Wynn, P., 1956, On a device for computing the em (Sn) transformation: M. T. A. C., v. 10, p. 91-96

Zohdy, A. A. R., 1965, The auxiliary point method of electrical sounding interpretation and its relationship to the Dar Zarronk parameters: Geophysics, v. 30, p. 644-660

Zohdy, A. A. R., 1969, A new method for differential resistivity sounding: Geophysics, v. 34, p. 924-943

BIBLIOTECA F.E. POLI

O meu professor leu a minha tábua, disse:

"Falta aqui qualquer coisa",

bateu-me com a cana.

O vigilante encarregado da limpeza disse:

"Andaste na rua e não arranjaste as tuas roupas",

bateu-me com a cana.

O vigilante encarregado da assembleia disse:

"Porque falaste sem autorização",

bateu-me com a cana.

O vigilante encarregado do portão disse:

"Porque saíste sem autorização",

bateu-me com a cana.

O vigilante encarregado do sumério disse:

"Porque não falaste sumério",

bateu-me com a cana.

O meu professor disse:

"A tua ortografia não é satisfatória",

bateu-me com a cana.

E assim eu comecei a odiar a arte de escriba.

Anónimo sumério, cerca de 2000 A.C.

CEEUP
(I.N.I.C.)
PORTO
BIBLIOTECA

FACULDADE DE ENGENHARIA
UNIVERSIDADE DO PORTO
BIBLIOTECA
0000034481