Geofís. Int., Vol. 28-4, 1989, pp. 785-794

UN ALGORITMO DE SUAVIZACION PARA CURVAS EMPIRICAS

J. FREZ*
(Recibido: 12 de abril, 1988)
(Aceptado: 28 de octubre, 1988)

RESUMEN

Existen varios métodos para suavizar curvas empíricas. Un método estándar consiste en minimizar, al mismo tiempo, dos normas cuadráticas: la del vector de residuales y la de un operador regularizante que controla el grado de suavidez de la solución. Para este operador, se toma generalmente la norma cuadrática de la derivada de orden p en la función que se estima. En la versión que aquí se presenta, también se incluye la contribución del espacio nulo del operador regularizante y, para invertir este operador se utiliza una función de Green. El algoritmo tiene controladores globales y locales para medir el grado de ajuste. El algoritmo se aplica al problema sismológico de suavización de tablas de camino-tiempo. Los resultados se comparan con los producidos por un método basado en polinomios osculantes ("splines") cúbicos y el de valores sumarios de Jeffreys.

ABSTRACT

There are several methods for smoothing empirical functions. A standard method consists in the minimization of the quadratic norms for both, the vector of residuals, and the vector of the p-th derivative of the function to be estimated. Here, the contribution of the null-space of the derivative functional is considered and Green's functions are used for inverting this operator. The algorithm contains global and local means of controlling the degree of fitting. The procedure is applied to the standard seismological problem of smoothing travel-time tables and the results are compared with two other methods mentioned in the literature, namely, a cubic spline scheme with variable knots and the summary method of Jeffreys.

* *División de Ciencias de la Tierra, Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Ensenada, B.C., 22830, MEXICO.*

INTRODUCCION

El problema de suavizar curvas empíricas consiste en determinar las fluctuaciones esenciales de los datos que corresponderían a la señal, eliminando la contribución del error. Este problema es interesante por dos motivos. En primer lugar, corresponde a una situación común en ciencia experimental donde, además de la función, se pueden necesitar las derivadas de ella. En segundo lugar, es una de las formas más simples para estimar una función continua a partir de datos empíricos.

Existen varios métodos para suavizar datos empíricos, todos ellos basados en la suposición de que los errores se conducen aleatoriamente, sin componentes sistemáticas, mientras que la señal es una función sin inflexiones u oscilaciones rápidas en su conducta. Así, un operador de suavización corresponde a un filtro de altas frecuencias que debe tener parámetros de ajuste no sólo globales sino también locales. Esto es con el fin de seguir sólo la variación significativa de la curva a lo largo de su rango. Muchos métodos utilizan funciones analíticas simples como aproximantes, determinándose los parámetros correspondientes a través de un proceso que generalmente es el mínimo-cuadrático. Por otro lado, polinomios osculantes ("splines") cúbicos han sido utilizados en la literatura sismológica por Curtis y Shimshoni (1970) para suavizar curvas de camino-tiempo, mientras que el método de Lanczos (1956), basado en un desarrollo en series, ha sido aplicado a otro problema sismológico por Dziewonski y Landisman (1970). Una estrategia diferente, que no usa funciones-bases, consiste en definir un "grado de suavización" a través de un funcional diferencial, siendo éste optimizado, junto con un criterio de aproximación mínimo-cuadrático, a los puntos empíricos (Whittaker y Robinson, 1924).

EL METODO

El procedimiento de Whittaker y Robinson (1924) puede ser considerado un método de regularización (Tikhonov y Arsenin, 1977), con lo cual el problema de suavización queda situado dentro del marco más general de la teoría de estimación de funciones. Lo que se presenta en este artículo es una forma más general y completa del esquema desarrollado por Whittaker y Robinson (1924). Un tratamiento más moderno de ideas similares a las aquí desarrolladas se presenta en Hilger (1976); sin embargo, nuestro algoritmo se desarrolló independientemente como un corolario de un esquema de regularización para estimar funciones continuas.

Sea el modelo directo

$$y_{ob}(x) = 1\, y(x) + e(x) \tag{1}$$

donde $y_{ob}(x)$ representa la función observada; I, el operador identidad; $y(x)$, la función incógnita, y $e(x)$, el ruido o error. El criterio para estimar $y(x)$ es

$$\min \left\{ \|y_{ob} - y\|^2_{S_1} + \alpha \|D_p y\|^2_{S_2} \right\} \tag{2}$$

donde

$$y = y^{\star} + y_p \; ; \; D_p = \frac{dP}{dxP} \; ; \; D_p\, y^{\star} \neq 0 ; \; D_p\, y_p = 0 \tag{3}$$

Así, la función incógnita tiene una componente dentro del rango ($y^{\star}$) y otra en el espacio nulo (y_p) del operador D_p. La minimización se puede realizar antes o después de discretizar las ecuaciones. Optando por la segunda alternativa, usamos la definición de la norma de un vector

$$\|z\|^2_C = z^T C z \tag{4}$$

donde z^T es el vector transpuesto de z. Las matrices simétricas positivas definidas S_1 y S_2 se construyen combinando adecuadamente: a) los factores de la integración numérica que nos permiten pasar de normas de funciones a su representación discreta; b) las estimaciones de los errores de las observaciones, incluyendo la de las correlaciones entre ellos, y c) otras ponderaciones que permitan enfatizar el ajuste a una observación o a "tensar" localmente la curva. El parámetro α gobierna el balance global entre el ajuste a los datos y la suavización.

Claramente, y_p es un polinomio de grado p-1

$$y_p(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + \ldots + c_{p-1} x^{p-1} \tag{5}$$

Expresando esta ecuación en su versión discreta y en notación compacta

$$y_p = Y_p c \tag{6}$$

donde c es el vector de coeficientes y Y_p es una matriz cuyas filas contienen las diferentes potencias de x para los distintos puntos de observación.

Las ecuaciones normales para $\underline{D_p y^\star}$ son

$$(D_p^{-1})^T S_1 (y_{ob} - \hat{y}_p - D_p^{-1} D_p y^\star) + \alpha S_2 D_p y^\star = 0 \tag{7}$$

que producen

$$\hat{y}^\star = D_p^{-1} [(D_p^{-1}) S_1 D_p^{-1} + \alpha S_2]^{-1} (D_p^{-1})^T S_1 (y_{ob} - \hat{y}_p) \tag{8}$$

Definiendo una función de Green discreta $\underline{G_p}$ y una matriz $\underline{A}$ por

$$D_p^{-1} = G_p S_2 \; ; \; A = G_p S_3 \tag{9}$$

la solución para $\underline{\hat{y}^\star}$ se puede escribir como

$$\hat{y}^\star = A A^T J_\alpha^{-1} S_1 (y_{ob} - \hat{y}_p) \tag{10}$$

donde

$$J_\alpha = S_1 A A^T + \alpha I \tag{11}$$

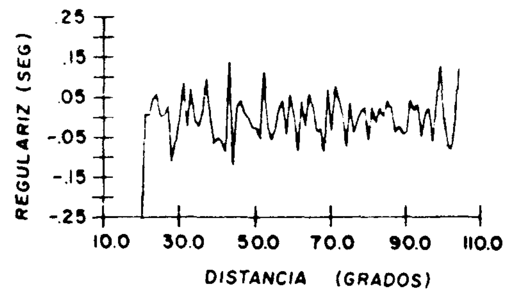
donde $\underline{I}$ es una matriz identidad adecuada y en la definición de $\underline{S_3}$, se incluye, para el caso más general, una descomposición de Choleski de la matriz $\underline{S_1}$. Las ecuaciones normales para $\underline{\hat{y}_p}$ son

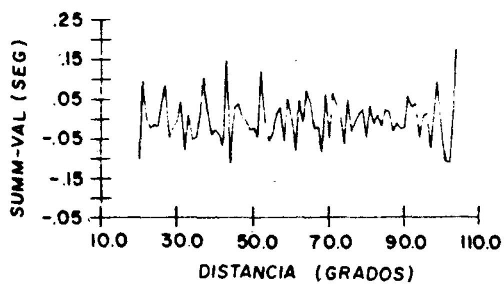
$$Y_p^T S_1 (y_{ob} - \hat{y}^\star - \hat{y}_p) = 0 \tag{12}$$

cuya solución se puede escribir como

$$\hat{y}_p = Y_p [Y_p^T J_\alpha^{-1} S_1 Y_p]^{-1} y_p^T J_\alpha^{-1} S_1^{-1} y_{ob} \tag{13}$$

En la implementación del método se hace primero un ajuste global manipulando el parámetro $\underline{\alpha}$. Después se ajusta localmente la tensión de la curva y la satisfacción de los datos utilizando los valores de las matrices $\underline{S_1}$ y $\underline{S_2}$. Paralelamente, se grafican los residuales $r(x) = y_{ob}(x) - \hat{y}(x)$ y se estudian sus propiedades estadísticas. El objetivo del ajuste es obtener residuales que muestren aleatoriedad a un nivel de amplitud máxima, pero sin mostrar la presencia de tendencias sistemáticas. El nivel de las amplitudes de los residuales que finalmente se acepta como óptimo puede requerir cambios en nuestra estimación inicial de los errores en las observaciones.





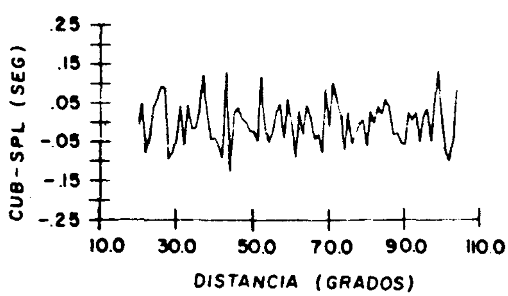


Fig. 1. Residuales como función de la distancia epicentral que resultan de la aplicación de un método de polinomios osculantes ("splines") cúbicos con nodos variables, del de valores sumarios y del de regularización.

APLICACION

Este método tiene una aplicación rutinaria en diferentes problemas; en particular, en la suavización de curvas que resultan al invertir ecuaciones integrales de Fredholm de primera clase a través del uso de la descomposición de valores singulares. Esto es necesario cuando sólo se utilizan unos pocos elementos de la descomposición y se prefiere una solución que no muestre las oscilaciones de los vectores propios utilizados.

En esta sección mostraremos los resultados de la aplicación del método a un caso simple. El ejercicio no pretende entregar un resultado geofísico nuevo, sino más bien utilizar una base de datos estándar para comparar el método que proponemos con otros de uso relativamente común. Se utiliza la tabla de camino-tiempo para ondas P que aparece en Arnold (1968); los datos originales provienen de Herrin *et al.* (1968). El ejercicio consiste en suavizar los tiempos de arribo usando tres métodos: el de valores sumarios de Jeffreys (1961), el de polinomios osculantes ("splines") cúbicos con nodos variables de Curtis y Shimshoni (1970) y el método de regularización aquí presentado. La figura 1 presenta los residuales de los valores observados que resultan de la aplicación de los tres métodos, las funciones primera-derivadas aparecen en la figura 2, y las de segunda-derivadas, en la figura 3. En las dos últimas figuras se incluyen también los resultados de diferenciar directamente las funciones observadas. Una solución estable correspondiente al método de regularización con $p = 4$ se obtiene con relativa facilidad, mientras que con $p = 2$ hay más dificultad para obtener una convergencia en la solución óptima. Los esquemas numéricos de derivación utilizados se seleccionaron por su simplicidad; ésto, para minimizar la acción de cualquier suavización adicional. Así, se aplicó un polinomio de interpolación lagrangiano de segundo grado, para tres puntos sucesivos, en el cálculo de las primeras y segundas derivadas. La aplicación de este esquema a los resultados del método de valores sumarios produjo inestabilidad, por lo que se prefirió utilizar en este caso un método basado en polinomios osculantes cúbicos.

Los resultados ilustrados en las figuras muestran efectos tanto de los errores de observación como del de modelar la Tierra como lateralmente homogénea. Para distancias menores de 25 grados, las heterogeneidades del manto superior producen dificultades en definir una curva "promedio" o representativa. Una situación semejante ocurre a distancias máximas debido tanto al efecto de difracción por la curvatura del núcleo terrestre, como a las heterogeneidades existentes cerca de la discontinuidad entre el núcleo y el manto.

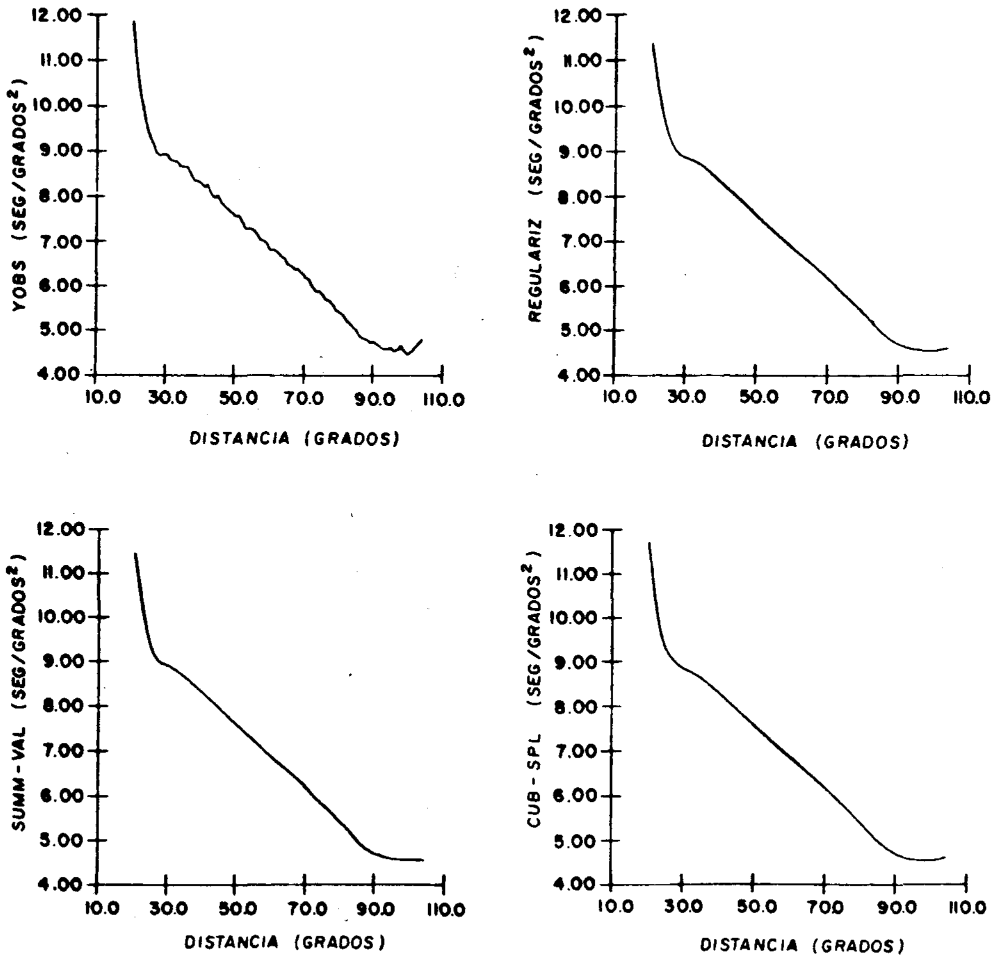


Fig. 2. Primera derivada de la función incógnita como función de la distancia epicentral. Se presentan los resultados de derivar las funciones suavizadas por los tres métodos señalados en la figura 1.

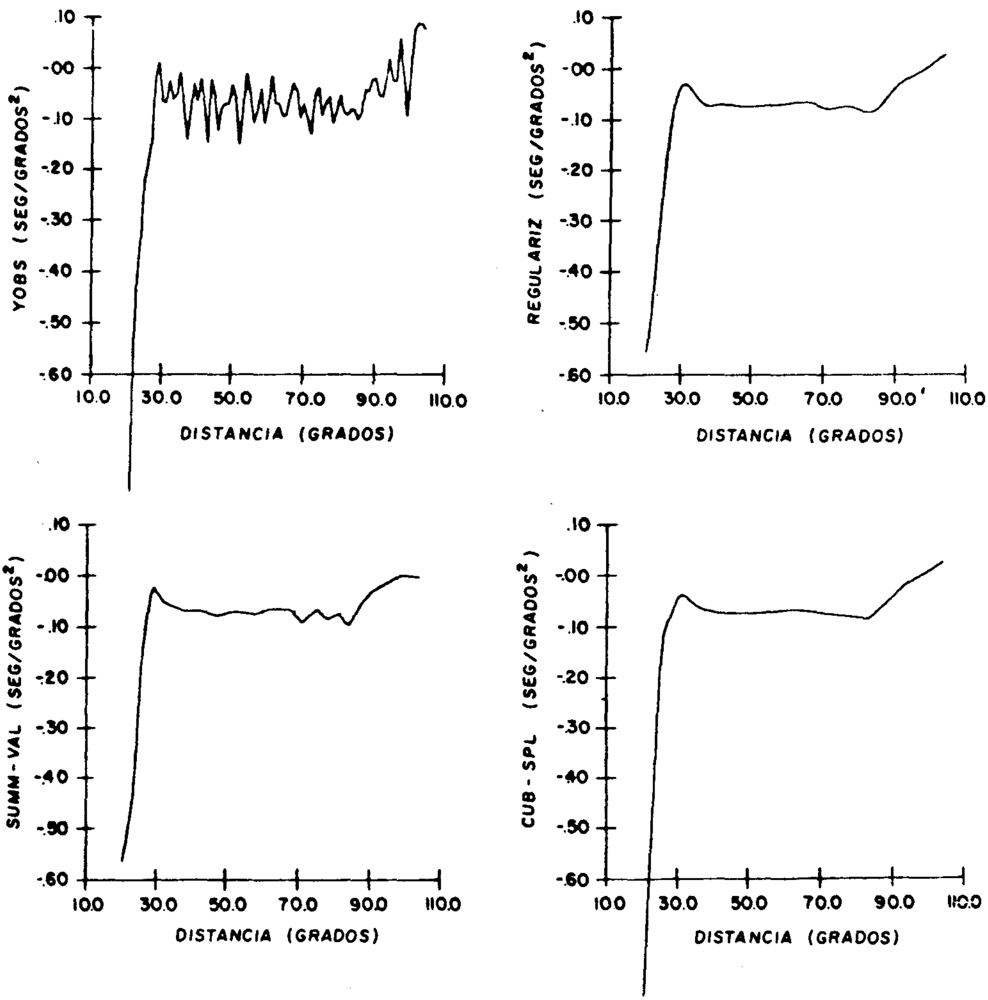


Fig. 3. Igual que en la figura 2, para la segunda derivada.

CONCLUSIONES

El desempeño numérico y estadístico del método de regularización se compara bien con el de los otros procedimientos. La inspección de las figuras lo confirma cualitativamente, así como la prueba global del Ji-cuadrático. La flexibilidad del método es, quizás, su mejor cualidad, mientras que la necesidad de invertir una gran matriz puede ser una dificultad en problemas de gran escala.

En el esquema propuesto, la suavización se controla a través de la minimización de la norma de la derivada de orden $\underline{p}$ de la función incógnita. En principio, puede ser necesario también estabilizar la norma del polinomio y_p. Esto no ha sido necesario en nuestros ejercicios de aplicación. Sin embargo, en la generalización del método al problema de estimar funciones continuas que resultan de la inversión de ecuaciones integrales de Fredholm de primera clase, se hace necesaria esta segunda estabilización cuando se aplica a problemas de inversión típicos en Geofísica. Ello se debe al carácter indeterminado de tales problemas de estimación, como por ejemplo, el de determinar la estructura interna de la Tierra con base en mediciones sismológicas.

AGRADECIMIENTOS

Parte de este trabajo se realizó en el IGPP de la UCLA. Agradezco a L. Knopoff, por su apoyo durante mi estadía en ese Instituto. M. Valdés y L. Martínez ayudaron en la edición del manuscrito. Los cálculos y gráficas se realizaron en el Centro de Computo de CICESE.

BIBLIOGRAFIA

ARNOLD, E. P., 1968. Smoothing travel-time tables. *Bull. Seism. Soc. Am., 58,* 1345-1351.

CURTIS, A. R. and M. SHIMSHONI, 1970. The smoothing of seismological travel-time tables using cubic-splines. *Bull. Seism. Soc. Am., 60,* 1077-1087.

DZIEWONSKI, A. and M. LANDISMAN, 1970. Great circle Rayleigh and Love waves from 100 to 90C seconds. *Geophys. J. R. Astr. Soc., 19,* 37-91.

HERRIN, E., W. TUCKER, D. W. TAGGART, D. W. GORDON and J. L. LOBDELL, 1968. Estimation of surface-focus P travel times. *Bull. Seism. Am., 58,* 1273-1291.

HILGERS, J. W., 1976. On the equivalence of regularization and certain reproducing kernel Hilbert space approaches for solving first kind problems. *SIAM J. Num. Anal., 13,* 172-184.

JEFFREYS, H., 1961. Theory of Probability, Clarendon Press, Oxford, 3rd Edition, 380 pp.

LANCZOS, C., 1956. Applied Analysis, Prentice Hall, 539 pp.

TIKHONOV, A. N. and V. Y. ARSENIN, 1977. Solution of ill-posed problems, Wiley, 258 pp.

WHITTAKER, E. and G. ROBINSON, 1924. The Calculus of Observations, Blackie and Son. (republished by Dove), 397 pp.