



Integração do Sistema de Equações do Traçado de Raios através de Variantes do Método de Runge-Kutta.

Paulo Sérgio Lucio

Departamento de Estatística – ICEX – UFMG (Brazil)

ABSTRACT

Este estudo está direcionado à determinação do campo de raios, baseado na construção de frentes de ondas, definidas através de um critério de densidade uniforme para amostragem de uma variedade lagrangiana (Lambaré et al., 1996; Lucio et al., 1996) e pelo método de integração baseado na continuação por Runge-Kutta (R-K) a passo constante. O objetivo deste ensaio é verificar com que grau de confiabilidade pode-se variar o passo a cada integração. A integração numérica de um raio em (Lambaré et al., 1996; Lucio et al., 1996) é baseada na técnica de R-K-MAP (média aritmética ponderada das derivadas). A estimação do passo empregado por este calculador numérico não é evidente, e permanece um dos problemas delicados intrínsecos a esta técnica. O controle de truncamento entre dois métodos predictor-corretor de mesma ordem, é determinado através de uma estimativa robusta para o erro local, cujo o custo computacional deve ser mínimo (Evans, 1991; Wazwaz, 1994). Os algoritmos desenvolvidos, neste trabalho, são designados à aplicação em modelagem sísmica direta pelo método do traçado dinâmico de raios (DRT). Relativo ao critério de composição das derivadas e do controle do erro, mostra-se que os algoritmos de traçado dinâmico de raios DRTUWFC2D™ e DRTUWFC3D™ são rápidos, eficientes e robustos, mesmo no caso de campos complexos de velocidade sísmica.

INTRODUÇÃO

Este estudo está direcionado à determinação do campo de raios, baseado na construção de frentes de ondas, definidas através de um critério de densidade uniforme para a amostragem de uma variedade lagrangiana (Lambaré et al., 1996; Lucio et al., 1996) e pelo método de integração de Runge-Kutta (R-K) a passo constante. O objetivo deste ensaio é determinar com que grau de estabilidade poder-se-ia variar o passo de R-K a cada integração nos algoritmos DRTUWFC2D™ e DRTUWFC3D™.

Um problema de valor de contorno (*pvc*) para equações diferenciais ordinárias como as equações do traçado de raios definidas no espaço de fases cuja existência e unicidade é garantida através da determinação de um hamiltoniano que satisfaça a equação do “*eikonal*”, consiste de um sistema de equações definido em determinado intervalo, juntamente com condições subsidiárias que envolvem valores da solução ou de suas derivadas em dois ou mais pontos distintos, chamadas condições de contorno. No traçado de raios essas condições são prescritas nos extremos do intervalo de integração e o problema é então denominado um problema de valor de contorno de dois pontos. Observa-se ainda, que no traçado de raios, as condições subsidiárias são todas especificadas num mesmo ponto inicial (fonte pontual), assim temos um caso particular de um problema de valor inicial (*pvi*).

A integração numérica de um raio de referência e de sua aproximação paraxial de primeira ordem em (Lambaré et al., 1996; Lucio et al., 1996) é baseada na técnica de R-K-MAP (média aritmética ponderada das derivadas) a 4 (quatro) estágios e com ordem de consistência 4 (quatro), através da transformação do *pvc* em dois *pvi*'s (*shooting*). A estimação do passo empregado por este calculador numérico não é evidente, e permanece um dos problemas delicados intrínsecos a esta técnica.

Os algoritmos desenvolvidos são designados à aplicação em modelagem sísmica. Relativo ao critério de composição das derivadas e do controle do erro, mostra-se que os algoritmos DRTUWFC2D™ e DRTUWFC3D™ são rápidos, eficientes e robustos, mesmo no caso de campos complexos de velocidade.

MÉTODO NUMÉRICO PARA O PVI (DRT)

A classe dos métodos lineares a passo múltiplo, através da utilização de um conjunto de aproximações numéricas para a solução de um sistema canônico de equações diferenciais, cuja existência e unicidade está garantida em determinado intervalo $[\tau_1, \tau_2]$, permite gerar uma aproximação em um certo ponto com uma ordem de consistência preestabelecida. Alternativamente, substituindo-se as informações em pontos anteriores por avaliações da derivada, pode-se gerar uma aproximação para a solução deste problema, cuja ordem de consistência depende do número de derivadas considerado. Concernente aos sistemas de traçado de raios (1.A) e de traçado de raios paraxiais (1.B):

$$(1.A): \begin{cases} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \tau} = \mathbf{p} \\ \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \tau} = \frac{1}{2} \nabla u^2(\mathbf{x}) \end{cases} \quad (1.B): \begin{cases} \frac{\partial \delta \mathbf{x}}{\partial \delta \tau} = \delta \mathbf{p} \\ \frac{\partial \delta \mathbf{p}}{\partial \delta \tau} = \frac{1}{2} \nabla \nabla u^2(\mathbf{x}) \bullet \delta \mathbf{x} \end{cases}$$

onde \mathbf{x} é a posição do raio, \mathbf{p} é o vetor vagarosidade associado ao raio e τ é uma coordenada interna ao raio e u é a vagarosidade. Observa-se que a existência e a unicidade das soluções $\mathbf{y}(\tau)=[\mathbf{x}(\tau), \mathbf{p}(\tau)]$ e $\delta \mathbf{y}(\tau)=[\delta \mathbf{x}(\tau), \delta \mathbf{p}(\tau)]$, são garantidas no espaço de fases através da determinação de um simples hamiltoniano e de sua perturbação de primeira ordem, respectivamente. Os raios de referência (assim como os paraxiais) são construídos a partir de um valor inicial para τ ao nível da fonte pontual (τ_0). Uma discretização aceitável para τ é baseada em uma amostragem periódica do tempo de trajeto. Seja

$$\tau_n = \tau_0 + n \cdot \Delta \sigma,$$

uma discretização do intervalo $[\tau_i, \tau_f]$, cujo $\Delta \sigma$ denota o tamanho do passo de integração (ou passo de progressão) definido em (Lambaré et al., 1996; Lucio et al., 1996) como constante mas que, conforme apresentado neste estudo, poderá ser considerado variável a cada integração.

Neste trabalho resgata-se o método baseado na formulação do R-K-MAP de ordem 4 utilizado em (Lambaré et al., 1996) e (Lucio et al., 1996), com a meta de compará-lo, baseando-se no erro de truncamento local a cada integração, a algumas outras variantes de Runge-Kutta de mesma ordem, como: R-K-MGE (média geométrica das derivadas); R-K-MHA (média harmônica das derivadas); R-K-MCH (média contra-harmônica das derivadas) e R-K-MHE (média heroniana das derivadas). O controle de truncamento entre dois métodos predictor-corretor de mesma ordem, é determinado através de uma estimativa robusta para o erro local cujo o custo computacional deve ser mínimo (Evans, 1991; Wazwaz, 1994). Deseja-se determinar o melhor método em termos de ordem de precisão, eficiência e estabilidade.

Deve-se ressaltar a importância de advertir-se a propósito do R-K-MGE, quando os sinais das derivadas são opostos num mesmo "intervalo", assim como para o método R-K-MHA quando pelo menos uma das combinações de duas derivadas subseqüentes num mesmo "intervalo" é zero. No que concerne ao primeiro caso, basta considerarmos os valores absolutos das derivadas, já com relação ao segundo caso deve-se substituir o zero por um valor EPS conveniente à precisão que se deseja. Observa-se, ainda, a propósito do R-K-MCH quando a média aritmética ponderada for nula ou quando os sinais das derivadas são opostos num mesmo "intervalo", a mesma astúcia matemática deve ser empregada. Já, no que tange ao R-K-MHE deve-se fazer as mesmas observações referentes ao R-K-MHA, quando os sinais das duas derivadas envolvidas são opostos num mesmo "intervalo".

O MÉTODO DE RUNGE-KUTTA

Denomina-se método de Runge-Kutta a \underline{s} estágios ao algoritmo numérico para a obtenção de aproximações para a solução dos problemas de valor inicial (1.A) e (1.B), definido por (usando a notação de somatório de Einstein):

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \Delta \sigma \cdot \mathbf{b}_i \mathbf{y}_i, \quad i=1, s.$$

Denomina-se erro de truncamento local de um método de Runge-Kutta a \underline{s} estágios, num ponto τ_n , ao valor T_{n+1} determinado por:

$$T_{n+1} = \mathbf{y}(\tau_{n+1}) - (\mathbf{y}(\tau_n) + \Delta \sigma \cdot \mathbf{b}_i \mathbf{y}_i), \quad i=1, s$$

onde $\mathbf{y}(\tau_n)$ é a solução exata.

Se ao utilizarmos um método de Runge-Kutta considerarmos a hipótese local $\mathbf{y}_n = \mathbf{y}(\tau_n)$ e denotarmos \mathbf{y}_{n+1}^p a

aproximação obtida, então podemos constatar que $T_{n+1} = [\mathbf{y}(\tau_{n+1}) - \mathbf{y}_{n+1}^p]$. Diz-se que o método de Runge-Kutta tem ordem de consistência \underline{p} se sob a hipótese local $\mathbf{y}_n = \mathbf{y}(\tau_n)$ obtém-se $T_{n+1} = O(\tau^{p+1})$.

Ao se trabalhar com métodos predictor-corretor que têm a mesma ordem, pode-se obter sem dificuldade e com custo computacional mínimo, uma estimativa para o erro de truncamento local a cada integração (Sanugi & Evans, 1988).

Runge-Kutta pela Média Aritmética Ponderada

Classicamente, os métodos de Runge-Kutta consideram uma média aritmética das derivadas obtidas nos pontos de discretização do intervalo $[\tau_a, \tau_b]$, com o objetivo de gerar uma aproximação em determinado ponto para as soluções $\mathbf{y}(\tau)$ e $\delta \mathbf{y}(\tau)$ do problema de valor inicial para o traçado de raios, com determinada ordem de consistência.

Sanugi & Evans (1988) propõe tomarmos um determinado método de R-K e então, considerando uma outra combinação de suas derivadas gerar um novo método de mesma ordem que aquele original. Desta forma, explora-se a partir do método clássico de R-K para a determinação do traçado de raios, diferentes composições de suas derivadas, gerando novos métodos, que se mostram eficientes como ferramenta para o controle do erro de truncamento local da aproximação gerada pelo método básico, apesar de um adicional esforço computacional para a determinação de novas avaliações das derivadas.

Dentro da classe dos métodos de Runge-Kutta explícitos a \underline{s} estágios e ordem \underline{p} encontramos métodos que permitem rescrever a aproximação $\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \Delta \sigma \cdot \mathbf{b}_i \mathbf{y}_i$ (usando a notação de Einstein para o somatório) sob uma forma que possibilite combinar duas a duas as derivadas, considerando as suas médias aritméticas ponderadas por um valor constante adequado. Como ilustração, considere o método de R-K-MAP sob a condição $\underline{s}=\underline{p}=4$ empregado nos algoritmos de traçado de raios DRTUWFC2D™ (Lambaré et al., 1996) e DRTUWFC3D™ (Lucio et al., 1996), definido

por:

$$y_{n+1} = y_n + \Delta\sigma/6 dy_a + \Delta\sigma/3 dy_b + \Delta\sigma/3 dy_c + \Delta\sigma/6 dy_d ,$$

onde

$$y_a = y_n + \Delta\sigma/2 dy_n$$

$$y_b = y_n + \Delta\sigma/2 dy_a$$

$$y_c = y_n + \Delta\sigma/2 dy_b$$

$$y_d = y_n + \Delta\sigma/2 dy_c$$

Com o erro de truncamento local da ordem de $O(\Delta\sigma^5)$.

Runge-Kutta pela Média Geométrica

Suponha que no lugar de considerar-se as médias aritméticas das derivadas, considera-se as suas respectivas médias geométricas. Investigando a questão concernente à conservação da ordem, gerada por esta transformação, Evans (1991) procurou analisar os pontos onde nesta nova representação as derivadas fossem determinadas de forma conveniente. Assim, considerando as condições sob ordem de consistência $p=4$ como no método de referência R-K-MAP, determina-se os coeficientes do método R-K-MGE, obtendo-se:

$$y_{n+1} = y_n + \Delta\sigma/3 [(dy_a \cdot dy_b)^{1/2} + (dy_b \cdot dy_c)^{1/2} + (dy_c \cdot dy_d)^{1/2}],$$

onde

$$y_a = y_n + \Delta\sigma/2 dy_n$$

$$y_b = y_n + \Delta\sigma/2 dy_a$$

$$y_c = y_n + \Delta\sigma/2 (-1/8 dy_a + 9/8 dy_b)$$

$$y_d = y_n + \Delta\sigma/2 (-3/12 dy_a + 5/12 dy_b + 22/12 dy_c) .$$

Com o erro de truncamento local da ordem de $O(\Delta\sigma^5)$, como no método básico de referência (R-K-MAP).

Observa-se a importância de advertir-se a propósito do R-K-MGE quando os sinais das derivadas são opostos num mesmo "intervalo", assim, neste caso adota-se uma solução um tanto quanto simplista, porém eficaz, basta considerarmos os valores absolutos das derivadas.

Considerando esta estratégia, pode-se construir o seguinte par de métodos explícitos cujo $s=p=4$:

$$y_{n+1}^{MAP} = y_n + \Delta\sigma/6 [dy_a + 17/7 dy_b + 11/7 dy_c + dy_d]$$

$$y_{n+1}^{MGE} = y_n + \Delta\sigma/3 [(dy_a \cdot dy_b)^{1/2} + (dy_b \cdot dy_c)^{1/2} + (dy_c \cdot dy_d)^{1/2}],$$

onde

$$y_a = y_n + \Delta\sigma/2 dy_n$$

$$y_b = y_n + \Delta\sigma/2 dy_a$$

$$y_c = y_n + \Delta\sigma/2 (-1/6 dy_a + 7/6 dy_b)$$

$$y_d = y_n + \Delta\sigma/2 (-1/6 dy_a + 19/42 dy_b + 12/7 dy_c) .$$

Estimando o erro de truncamento local das aproximações y_{n+1}^{MAP} e y_{n+1}^{MGE} , pode-se determinar como estimativa para o erro de truncamento local de y_{n+1}^{MAP} ao valor:

$$\varepsilon = (y_{n+1}^{MAP} - y_{n+1}^{MGE}) .$$

Pode-se considerar esta estimativa para o erro de truncamento local sem que seja necessário um aumento do custo computacional, quando consideramos o par de métodos y_{n+1}^{MAP} e y_{n+1}^{MGE} .

Runge-Kutta pela Média Harmônica

Consideremos, agora, a construção de métodos tipo Runge-Kutta sob $s=p=4$, porém baseado na média harmônica das derivadas, *i. e.* deve-se gerar aproximações através da seguinte relação:

$$y_{n+1}^{MHA} = y_n + \Delta\sigma/3 [2 (dy_a \cdot dy_b)/(dy_a + dy_b) + 2 (dy_b \cdot dy_c)/(dy_b + dy_c) + 2 (dy_c \cdot dy_d)/(dy_c + dy_d)],$$

onde

$$y_a = y_n + \Delta\sigma/2 dy_n$$

$$y_b = y_n + \Delta\sigma/2 dy_a$$

$$y_c = y_n + \Delta\sigma/2 (-1/4 dy_a + 5/4 dy_b)$$

$$y_d = y_n + \Delta\sigma/2 (-1/2 dy_a + 7/10 dy_b + 9/5 dy_c) .$$

Com o erro de truncamento local da ordem de $O(\Delta\sigma^5)$.

Ressalta-se a importância de advertir-se a propósito R-K-MHA quando pelo menos uma das combinações de duas derivadas subseqüentes num mesmo "intervalo" é zero. Neste caso deve-se substituir o zero por um valor EPS tão pequeno quanto se queira!

Estimando o erro de truncamento local das aproximações y_{n+1}^{MAP} e y_{n+1}^{MHA} , pode-se determinar como estimativa para o erro de truncamento local de y_{n+1}^{MAP} ao valor:

$$\varepsilon = (y_{n+1}^{MAP} - y_{n+1}^{MHA}) .$$

Pode-se considerar esta estimativa para o erro de truncamento local sem que seja necessário um aumento do custo

computacional, quando consideramos o par de métodos \mathbf{y}_{n+1}^{MAP} e \mathbf{y}_{n+1}^{MHA} .

RUNGE-KUTTA PELA MÉDIA CONTRA-HARMÔNICA

Analogamente, considera-se uma nova combinação de derivadas, a partir da média contra-harmônica das mesmas, tomadas duas a duas.

Dada a média aritmética (MAP) e a média geométrica (MGE) das derivadas, a média contra-harmônica dessas derivadas (MCH) é definida por:

$$MCH = [2 (MAP)^2 - (MGE)^2]/MAP, \text{ se } MAP \neq 0.$$

Assim, a aproximação de Runge-Kutta com $\underline{s}=\underline{p}=4$, que considera a MCH é dada por:

$$\mathbf{y}_{n+1}^{MCH} = \mathbf{y}_n + \Delta\sigma/3 [(d\mathbf{y}_i^2 + d\mathbf{y}_{i+1}^2)/(d\mathbf{y}_i + d\mathbf{y}_{i+1})], \text{ } i=a,b,c$$

onde

$$\mathbf{y}_a = \mathbf{y}_n + \Delta\sigma/2 d\mathbf{y}_n$$

$$\mathbf{y}_b = \mathbf{y}_n + \Delta\sigma/2 d\mathbf{y}_a$$

$$\mathbf{y}_c = \mathbf{y}_n + \Delta\sigma/2 (1/4 d\mathbf{y}_a + 3/4 d\mathbf{y}_b)$$

$$\mathbf{y}_d = \mathbf{y}_n + \Delta\sigma/2 (1/2 d\mathbf{y}_a - 3/2 d\mathbf{y}_b + 3 d\mathbf{y}_c).$$

Com o erro de truncamento local da ordem de $\mathbf{O}(\Delta\sigma^5)$.

Ressalta-se a importância de advertir-se a propósito da MAP ser zero. Neste caso deve-se substituir o zero por um valor EPS tão pequeno quanto se queira!

Estimando o erro de truncamento local das aproximações \mathbf{y}_{n+1}^{MAP} e \mathbf{y}_{n+1}^{MCH} , pode-se determinar como estimativa para o erro de truncamento local de \mathbf{y}_{n+1}^{MAP} ao valor:

$$\varepsilon = (\mathbf{y}_{n+1}^{MAP} - \mathbf{y}_{n+1}^{MCH}).$$

Pode-se considerar esta estimativa para o erro de truncamento local sem que seja necessário um aumento do custo computacional, quando consideramos o par de métodos \mathbf{y}_{n+1}^{MCH} e \mathbf{y}_{n+1}^{MAP} .

RUNGE-KUTTA PELA MÉDIA HERONIANA

A média heroniana de dois valores distintos τ_i e τ_{i+1} é definida por:

$$MHE = [\tau_i + \tau_{i+1} + (\tau_i \cdot \tau_{i+1})^{1/2}]/3.$$

Assim, através deste conceito de média, agora para as derivadas, Wazwaz (1994) propõe considerar a aproximação de Runge-Kutta com $\underline{s}=\underline{p}=4$, definida por:

$$\mathbf{y}_{n+1}^{MHE} = \mathbf{y}_n + \Delta\sigma/9 [d\mathbf{y}_i + d\mathbf{y}_{i+1} + (d\mathbf{y}_i \cdot d\mathbf{y}_{i+1})^{1/2}], \text{ } i=a,b,c$$

onde

$$\mathbf{y}_a = \mathbf{y}_n + \Delta\sigma/2 d\mathbf{y}_n$$

$$\mathbf{y}_b = \mathbf{y}_n + \Delta\sigma/2 d\mathbf{y}_a$$

$$\mathbf{y}_c = \mathbf{y}_n + \Delta\sigma/2 (-1/24 d\mathbf{y}_a + 25/24 d\mathbf{y}_b)$$

$$\mathbf{y}_d = \mathbf{y}_n + \Delta\sigma/2 (-1/12 d\mathbf{y}_a + 47/300 d\mathbf{y}_b + 289/150 d\mathbf{y}_c).$$

Com o erro de truncamento local da ordem de $\mathbf{O}(\Delta\sigma^5)$.

Deve ser observado que é aconselhável utilizar o valor absoluto de $\mathbf{y}_i \cdot \mathbf{y}_{i+1}$ para o cálculo das raízes.

Estimando o erro de truncamento local das aproximações \mathbf{y}_{n+1}^{MAP} e \mathbf{y}_{n+1}^{MHE} , pode-se determinar como estimativa para o erro de truncamento local de \mathbf{y}_{n+1}^{MAP} ao valor:

$$\varepsilon = (\mathbf{y}_{n+1}^{MAP} - \mathbf{y}_{n+1}^{MHE}).$$

Pode-se considerar esta estimativa para o erro de truncamento local sem que seja necessário um aumento do custo computacional, quando consideramos o par de métodos \mathbf{y}_{n+1}^{MAP} e \mathbf{y}_{n+1}^{MHE} .

CONCLUSÕES

As equações analíticas dos raios nos permitem validar o programa de traçado dinâmico de raios comparando os resultados numéricos às soluções analíticas em meios simples como os homogêneos, aqueles à gradiente da velocidade constante ou mesmo os meios a gradiente da vagarosidade ao quadrado constante. Os processos de prolongação do raio apresentados anteriormente, supõe um campo suave de velocidade. Nesta fase apresentaremos alguns testes de validação dos algoritmos e suas implementações. Relativo ao critério de composição das derivadas e do controle do erro, mostra-se que os algoritmos de traçado dinâmico de raios DRTUWFC2D™ e DRTUWFC3D™ são rápidos e estáveis.

REFERÊNCIAS

- Evans, D.J. (1991) A new fourth order Runge-Kutta methods for initial value problems with error control. *International Journal of Computer Mathematics*, **39**, 217-227.
- Lambaré, G., Lucio, P.S., Hanyga, A. (1996) Two-dimensional multivalued traveltimes and amplitude maps by a uniform sampling of the ray field. *Geophys. Journal International*, **125**, 584-598.
- Lucio, P.S., Lambaré, G., Hanyga, A. (1996) 3D multivalued travel times and amplitude maps. *Pure and Applied Geophysics*, **148**, 449-479.
- Sanugi, B.B., Evans, D.J. (1988) A new fourth order Runge-Kutta formula for $y'=Ay$ with stepsize control. *Comput. Math. Applications*, **15** [12], 991-995.
- Wazwaz, A.M. (1994) A comparison of modified Runge-Kutta formulas based on a variety of means. *International Journal of Computer Mathematics*, **50**, 105-112.