

OPTIMIZACIÓN GLOBAL EFICIENTE Y EFECTIVA EN LA INVERSIÓN DE DATOS DE CAMPOS POTENCIALES

*Efficient and effective global optimizing in the inversion of
potential fields data*

Jorge Gotay Sardiñas
Pedro Gil Junco Bernázar

E-mail: jgotay@civil.ispjae.edu.cu
Instituto Superior Politécnico José A. Echeverría

RESUMEN

Los problemas inversos de campos potenciales son difíciles de resolver utilizando métodos automáticos, sobre todo por la incapacidad de los procedimientos tradicionales de localizar globalmente el conjunto óptimo de los parámetros. Este artículo establece la naturaleza de los múltiples óptimos locales en la inversión de datos de campos potenciales en un modelo de seis parámetros y analiza la consistencia de tres métodos de optimización global: un método de multicomienzo con el algoritmo Simplex (MSX), un algoritmo genético combinado con el Simplex (GSX) y el método de Evolución y Mezcla de Complejos (SCE). Todos los algoritmos fueron capaces de encontrar el conjunto de parámetros óptimos durante el proceso de inversión de campo potencial para un modelo de seis parámetros. En 100 pruebas independientes de cada algoritmo, el procedimiento del SCE se comporta tres veces más eficiente que el procedimiento MSX y dos veces más eficiente que el procedimiento GSX. El método GSX es dos veces más eficiente que el procedimiento MSX.

PALABRAS CLAVE: Campos potenciales, inversión de datos, optimización global.

ABSTRACT

The potential field inverse problems are difficult to solve by means of automatic methods, one major reason for this is the inability of conventional procedures to locate the globally optimal set of parameters. This paper establish clearly the nature of the multiple optima problem for the research to inversion of potential field data in the six parameters model and investigates the consistency with three global optimization methods. The Multistart Simplex (MSX) method, a Genetic

algorithm combined with Simplex (GSX) and the Shuffled Complex Evolution (SCE) method. All of them are able to find the optimal parameters set during the inversion of potential field data for a six-parameter model. In 100 independent trials of each algorithm the SCE procedure appears to be about 3 times more efficient than MSX procedure and twice time more efficient than GSX. The GSX procedure appears to be about 2 times more efficient than MSX.

KEY WORDS: Potential fields, data inversion, global optimizing.

INTRODUCCIÓN

Diferentes técnicas pueden ser usadas en la exploración geofísica para obtener información acerca de la distribución de los minerales bajo la superficie terrestre. Dentro de esa variedad, el análisis de los datos de los campos potenciales tiene gran interés por ser el método de investigación menos costoso. Esto se conoce como problema inverso, en el cual se necesita un conjunto de parámetros geológicos para definir, de manera satisfactoria, el modelo matemático que reproducirá el conjunto de datos observados.

Tradicionalmente, esta clase de problema ha sido estudiado usando técnicas de optimización local, tales como el máximo descenso, los gradientes conjugados y métodos de reconstrucción simultánea. Sin embargo, dos problemas pueden limitar la efectividad de esas aproximaciones: en primer lugar, cuando se desea determinar la forma del cuerpo geológico que produce la anomalía del campo potencial junto con sus propiedades físicas, la formulación matemática del problema inverso se convierte en fuertemente

no lineal. Los problemas fuertemente no lineales son muy propensos a quedar atrapados en los mínimos locales (Al-Chalabi, 1971a), en estas circunstancias se necesita un buen modelo inicial y, además, información acerca de la curvatura de la función objetivo en el espacio de los parámetros, pues estos algoritmos hacen uso de ella; en segundo lugar, existe una ambigüedad inherente a la inversión de datos de campos potenciales; es decir, se puede encontrar una gran cantidad de soluciones igualmente buenas (Al-Chalabi, 1971b) y, en ese caso, los métodos de búsqueda local son buenos cuando sólo existe un punto de mínimo.

Desde la última década del siglo xx se vienen utilizando técnicas de optimización global que se han identificado en la literatura como algoritmos genéticos, los cuales han podido sobreponerse a estas limitaciones (Boschetti *et al.*, 1997).

Es evidente la necesidad de contar con un efectivo y eficiente procedimiento de optimización global que pueda ayudar a resolver automáticamente el problema inverso. Tal procedimiento debe reflejar el estado del arte de la optimización global y, además, estar diseñado para manejar las dificultades específicas que se encuentran en la resolución de la tarea inversa. En este artículo se utiliza una técnica computacional intensiva, que establece claramente la naturaleza de los múltiples óptimos en un modelo de seis parámetros y se exponen tres procedimientos de optimización global.

MATERIALES Y MÉTODOS

El modelo utilizado se basa en el método de los prismas para el cálculo de la componente vertical de la intensidad del campo gravimétrico producido por un cuerpo de forma arbitraria. El método de cálculo consiste en la sustitución del cuerpo por un sistema de prismas poligonales de n lados, al cual se le calcula la componente vertical del campo gravimétrico. En la práctica de la geofísica se encuentran cuerpos de forma irregular, los cuales pueden ser convenientemente aproximados por prismas de longitud finita y una adecuada sección transversal. El modelo empleado está representado por tres prismas horizontales de cuatro lados, en donde los parámetros por determinar son: la profundidad a la que ellos se encuentran situados, así como sus respectivas densidades, de manera que es un modelo de seis parámetros.

EL PROBLEMA DE LOS MÚLTIPLES ÓPTIMOS EN LA INVERSIÓN DE DATOS DE CAMPOS GRAVIMÉTRICOS

Las dificultades reportadas en la inversión de datos de campos potenciales plantean la necesidad de esta-

blecer las características de este problema. Esto ayudará a diseñar una estrategia para alcanzar la solución exitosamente. El interés aquí es, primero, detectar la posición y el número de óptimos y, segundo, obtener información acerca de la sensibilidad de la superficie respuesta de la función objetivo. Dada la estructura fuertemente no lineal del problema, es muy difícil un análisis teórico de las ecuaciones del modelo para obtener la información requerida, por lo que usamos una metodología computacional, que emplea una información basada en un muestreo en el espacio completo de los parámetros. El procedimiento utilizado es el Muestreo Aleatorio Uniforme (MAU) del espacio de los parámetros.

El MAU es una primitiva técnica de aproximación probabilística de optimización global. En este método se especifica un número de puntos N (digamos $N=1\ 000$), y son generadas aleatoriamente sus coordenadas en el espacio de los parámetros, siguiendo una distribución uniforme. Se calcula el valor de la función objetivo en cada punto, y el punto con el mejor valor (el mínimo) es tomado como una estimación del óptimo. Sin embargo, los N puntos muestreados contienen importante información acerca de la naturaleza y la estructura de la superficie respuesta de la función objetivo. Esta información puede ser extraída usando un procedimiento de análisis apropiado. Un procedimiento tal es construir las proyecciones de los puntos muestreados, después de haberlos ordenados según valores crecientes de la función objetivo. Se analizaron dos proyecciones gráficas: en la primera se grafican los valores de la función objetivo contra la distancia de cada punto al óptimo, normalizada por el rango de los parámetros (DNORM); en la segunda, se grafican los valores de la función objetivo contra los valores de los parámetros (VPAR).

Para ilustrar la utilidad de estos gráficos, se presentan dos ejemplos simples. Primero consideremos la función de Hosaki (Fig. 1a-1d), la cual es una función bidimensional no convexa que tiene dos óptimos: un mínimo global en $(X_1=4.0, X_2=2.0)$ y un mínimo local en $(X_1=1.0, X_2=2.0)$. La ecuación de la función viene dada por:

$$F(X_1, X_2) = \left(1 - 8X_1 + 7X_1^2 - \frac{7}{3}X_1^3 + \frac{1}{4}X_1^4\right) X_2^2 e^{-X_2}$$

Los gráficos de DNORM y VPAR para la función de Hosaki se muestran en las figuras 1b-1d. Cuando los puntos de la muestra están próximos al óptimo global, la distancia normalizada es pequeña, y la medida DNORM se incrementa suavemente (Fig. 1b) en forma de una banda que es típica de una superficie elíptica.

Después que un cierto número de puntos han sido ploteados, el conjunto ordenado comenzará a contener puntos de la región del óptimo local, los cuales tienen valores similares de la función objetivo, hasta puntos alrededor del óptimo global. Para los primeros puntos la distancia normalizada es mayor, por lo que ellos se agrupan en diferentes regiones de la gráfica. De esta manera, la existencia de los óptimos locales está claramente identificada. De forma similar, el óptimo local y su posición son identificables con los gráficos de VPAR (Fig. 1c-1d).

El segundo ejemplo es el problema de inversión de datos gravimétricos para un cuerpo prismático horizontal de cuatro lados, situado a una profundidad de 1 000 metros, con una densidad relativa de $-0,1\text{kg/m}^3$. El prisma tiene una extensión de 10 000 metros, la profundidad y la densidad son los parámetros por determinar. Las figuras 2a-2d, reflejan el comportamiento de la superficie respuesta de la función formada por la suma de los cuadrados de las desviaciones entre el campo observado y el calculado por el modelo del prisma. En el gráfico VPAR se observa cómo la función respuesta es muy poco sensible a la variación del parámetro profundidad. En la figura 2c se muestra un espectro amplio de profundidades, que provocan valores similares y pequeños de la función objetivo; sin embargo, esto no sucede así con el parámetro densidad, figura 2d. El gráfico de DNORM, refleja la multitud de puntos que tienen un valor pequeño de la función objetivo, pero que se encuentran alejados del punto de óptimo global.

El método de MAU fue empleado también para estudiar el problema de la inversión de datos gravimétricos para el caso de tres prismas de base rectangular con una extensión de 10 000 metros cada uno, donde nuevamente los parámetros por determinar son las profundidades (en metros) y las respectivas densidades (en kg/m^3), como se muestra en la Tabla 1.

En la figura 3a-3g, se refleja una pobre sensibilidad de la función objetivo respecto a la variación de los parámetros en su espacio factible, así como una gran cantidad de puntos lejos del óptimo global que provocan valores también muy pequeños de la función

objetivo. En la figura 3b-3g no se distingue un patrón, lo cual puede estar dado quizá, por el número insuficiente de puntos generados o por las características propias del modelo. La fundamentación de este hecho no es propósito de este trabajo.

EVALUACIÓN DE TRES PROCEDIMIENTOS DE BÚSQUDA GLOBAL

Dado que los procedimientos de optimización de búsqueda local tienen muy poco éxito en alcanzar el óptimo global en los problemas de inversión de datos de campos potenciales y la variación no predecible de la función objetivo respecto a la variación de los parámetros, es necesario utilizar procedimientos de optimización global, y éstos son pocos en comparación con la cantidad de métodos de optimización local (Rinnooy y Timer, 1989). En general, estos métodos pueden ser clasificados como determinísticos o probabilísticos. Una revisión detallada de las ventajas y desventajas de varias estrategias globales, aparece en los trabajos de Duan (1992). En esencia, los métodos determinísticos han probado tener una rígida garantía de éxito, pero a expensas de un alto costo o requerimiento de la función; es decir, la función debe satisfacer ciertas condiciones (Ej.: continuidad, diferenciabilidad de segundo orden, condición de Lipschitz, etc.) que no pueden ser garantizadas en los problemas de inversión de datos de campos potenciales. De manera que ellos no serán efectivos en la búsqueda del óptimo global. Los métodos probabilísticos, por otro lado, involucran la evaluación de la función en una muestra aleatoria de puntos en el espacio de búsqueda de los parámetros, usando combinaciones de reglas determinísticas y probabilísticas. Mientras que los métodos probabilísticos pueden garantizar convergencia solamente en el sentido probabilístico, tienen como mayor ventaja que no hay que imponerle restricciones a la naturaleza de la función. De manera que los métodos probabilísticos pueden ser empleados cuando la función es discontinua y cuando la información acerca de la derivada se dificulta o es imposible de obtener. Esto hace que los métodos probabilísticos

TABLA 1. VALORES DE LAS PROFUNDIDADES Y DENSIDADES DE LOS TRES PRISMAS RECTANGULARES HORIZONTALES DE 10 000 METROS DE EXTENSIÓN					
Z1	Z2	Z3	ρ_1	ρ_2	ρ_3
3 500	6 000	3 500	0,1	-0,2	0,3

sean candidatos naturales para resolver los problemas de inversión de datos de campos potenciales.

Procedimiento de Multicomienzo (MSX)

Un método utilizado para manejar con múltiples óptimos es el que consiste en realizar varias pruebas de un método de optimización local, desde diferentes puntos en el espacio de los datos. La validez de esta aproximación está fundada por los argumentos siguientes: si se tiene confianza en los resultados de algún procedimiento de optimización probabilístico, entonces es necesario que se tenga en el problema de interés una probabilidad de fallo relativamente pequeña. Digamos que corremos un procedimiento una vez desde una posición seleccionada aleatoriamente en el espacio de búsqueda y la probabilidad de fallo es P_f (cantidad de fallos por cada 100 pruebas independientes, entonces esperamos que $100 \times P_f$ de ellas fallen). Si entonces corremos el procedimiento r veces desde r posiciones seleccionadas aleatoriamente, la probabilidad completa de fallo irá decreciendo según la ecuación $P_f(r) = P_f(1)^r$ y tiende a cero cuando r crece ilimitadamente. Si P_f es de 0,55 (es decir, 55 fallos en 100 pruebas), entonces con $r=8$ daría una probabilidad de fallo menor que 1 en 100. A esta estrategia simple de búsqueda global, consistente en repetir la búsqueda desde muchas posiciones diferentes, se le llama Procedimiento de Multicomienzo.

La eficiencia del Procedimiento de Multicomienzo varía no linealmente con P_f , por lo que el número de puntos de comienzo r requerido para alcanzar la probabilidad de fallo $P_f(r)$ está dado por:

$$r = \frac{\ln(P_f(r))}{\ln(P_f(1))}$$

La curva de r contra $P_f(1)$ está dada en la figura 4, para el caso en que $P_f(r)$, es igual a 0,01 (un fallo en 100). Se observa que la probabilidad de fallo para un solo punto de comienzo, menor que aproximadamente 0,8 (80 fallos en 100), no requiere de un número grande de puntos de comienzo; sin embargo, cuando $P_f(1)$ se incrementa por encima de 0,8 hacia 1,0, el número de comienzos requerido se incrementa rápidamente hacia infinito, haciendo impracticable el procedimiento.

Se examinaron 100 pruebas independientes de optimización del Procedimiento de Multicomienzo basado en un procedimiento de búsqueda local de Nelder-Mead llamado Simplex, que aparece en la caja de herramienta de optimización del asistente matemático Matlab a través de la función **fmins**, trabajan-

do con los valores que tiene por defecto con la precisión de 10^{-4} , para el problema de inversión de datos gravimétrico en el modelo de seis parámetros conformado por tres prismas. Con la experiencia obtenida en el modelo, se conoce que valores de la función objetivo menores o iguales que 10^{-6} , garantizan que los valores de los parámetros “verdaderos” sean obtenidos hasta con tres cifras significativas correctas. Los valores verdaderos de los parámetros se muestran en la Tabla 1. El Simplex inicial para cada corrida fue creado seleccionando siete puntos aleatoriamente (el número de parámetros más uno) en el espacio de los datos. El número de fracasos cada 100 corridas independientes del algoritmo es una medida de su “efectividad” y el número promedio de evaluaciones de la función cada vez que ésta ha alcanzado un valor igual o menor que 10^{-6} es una medida de la eficiencia del algoritmo.

Los resultados de esta prueba del Procedimiento de Multicomienzo son presentados en la figura 5. En ella se muestra que para una probabilidad de fallo de aproximadamente 55 % para un solo punto de comienzo, son suficientes 8 puntos de comienzo para alcanzar una probabilidad de fallo de 1 en 100. Este resultado es alentador, dada la naturaleza del problema. Sin embargo, el número de evaluaciones de la función que se requiere es alto (aproximadamente 12 000). Sobre todo para problemas más complejos, que involucren un número elevado de parámetros, traerá como consecuencia un gran esfuerzo computacional.

Algoritmo Genético (AG)

Los algoritmos genéticos son métodos de búsqueda basados en el comportamiento evolutivo de sistemas biológicos. Lo racional que hay detrás de estos procedimientos de búsqueda es que los sistemas biológicos son capaces de resolver problemas adaptativos complejos sin ningún conocimiento del medio en el cual ellos existen, excepto la experiencia directa. Similarmente, los algoritmos genéticos son capaces de resolver problemas no lineales complejos sin necesidad de tener información de la curvatura de la función, simplemente mediante un muestreo directo en el espacio solución. Una de sus características es que ellos trabajan modificando una población de soluciones en lugar de una sola solución, como es el caso de los algoritmos tradicionales. De esta manera es posible explorar diferentes áreas del espacio de búsqueda al mismo tiempo. Por consiguiente, la posibilidad de que la solución quede atrapada en un mínimo local se reduce.

El algoritmo genético presentado aquí es una propuesta utilizada para la calibración de modelos hidrológicos conceptuales (Franchini, 1996) ante algunas modificaciones realizadas al algoritmo genético formulado por Wang (Wang, 1991), que estaban dadas en el sistema de codificación real en lugar del binario, en la forma de realizar los cruzamientos de los individuos y la selección de la población.

El algoritmo se describe a continuación:

Sea el problema $\min f(x_1, x_2, \dots, x_N)$

sujeto a :

$$a_i < x_i < b_i \text{ donde } i=1 \dots N$$

Los pasos pudieran resumirse de la forma siguiente:

Paso 0:

Inicializar el contador de las iteraciones:

$$\text{Iter}=0$$

Paso 1:

Para cada i se toman M puntos aleatorios uniformemente distribuidos en cada intervalo, de manera que el conjunto de puntos donde se realizará la búsqueda es del orden M^N .

Paso 2:

Se seleccionan m puntos aleatorios según una distribución uniforme y se evalúa la función objetivo en cada uno de los m puntos y luego estos puntos son ordenados en forma decreciente según los valores de la función objetivo.

Paso 3:

Se realiza una asignación de pesos (probabilidad) a cada individuo de los m puntos, dando mayor peso a aquellos puntos que tienen valores más pequeños de la función objetivo.

Paso 4:

Atendiendo a la distribución de probabilidades realizadas se seleccionan dos individuos diferentes (selección de los padres).

Paso 5 (cruzamiento)

Para producir un nuevo individuo (hijo) se realiza según la regla siguiente:

Se seleccionan aleatoriamente dos números enteros uniformemente distribuidos entre 1 y 5 (en este caso $N=5$). Los números enteros fueron $I_1=2$ y $I_2=4$ para formar el nuevo individuo. Del padre #1 se toman todos los valores que ocupan posiciones menores que I_1 y todos los valores que ocupan posiciones mayores que I_2 ; del padre #2 se toman los valores que ocupan las posiciones que están entre I_1 e I_2 , y para aquellos que ocupan las posiciones I_1 e I_2 se generan números aleatorios que se encuentren entre ellos (Tabla 2).

Paso 6: (mutación)

Se realiza alguna alteración en algunos de los parámetros aleatoriamente con una baja probabilidad (Goldberg, 1989; Wang, 1991; Franchini, 1996). Se tomó un valor de probabilidad $P_0=0,01$.

Paso 7

Repetir los pasos 5 y 6 m veces, de manera que se obtenga una nueva población de puntos con la misma cantidad que la inicial.

Paso 8: (selección de la población)

Se evalúa la función objetivo en cada uno de los m nuevos puntos y se ordena según valores decrecientes de la función objetivo, se compara el "mejor" punto de la vieja población con el "mejor" punto de la nueva población. De ser este último mejor, nos identificamos totalmente con la nueva población de puntos; en caso contrario, se reemplaza el peor punto de la nueva población por el mejor punto de la vieja población y ésta será la población definitiva con que nos identificamos.

Paso 9:

Evaluar la función objetivo en los m puntos de la nueva población y éstos son ordenados en forma decreciente de los valores de la función objetivo

Paso 10:

Incrementar el contador

$\text{Iter} = \text{iter} + 1$, y regresar al paso #3.

TABLA 2. CRUZAMIENTO ENTRE PADRE 1 Y PADRE 2 A TRAVÉS DE DOS PUNTOS DE CORTE, SELECCIONADOS ALEATORIAMENTE ENTRE 1 Y 5. LOS VALORES DE LAS POSICIONES $I=2$, $I=4$ PARA OBTENER EL HIJO, SE OBTIENEN GENERANDO NÚMEROS ALEATORIOS UNIFORMEMENTE DISTRIBUIDOS ENTRE LOS VALORES DE LOS PADRES EN LAS RESPECTIVAS POSICIONES

Padre 1				
	$I=1$		$I=4$	
24	133	204	17	0,67
Padre 2				
31	140	195	26	0,12
Hijo				
24	137	195	22	0,67

Podemos fijar un número máximo de iteraciones **itermax**, o también un número máximo de evaluaciones de la función objetivo **nmaxeval** = itermax*m.

Se efectuaron 6 experimentos que consistieron en correr el algoritmo genético 10 veces y seleccionar el mejor en cada caso. Los parámetros que se utilizaron en el algoritmo se muestran en la Tabla 3. En ninguno de los casos se obtienen los parámetros verdaderos; sin embargo, los parámetros obtenidos están en una vecindad próxima al óptimo global. En la Tabla 4 aparecen los mejores resultados de cada experimento, de manera que ellos constituyen buenos puntos de comienzo para procedimientos de búsqueda local (Franchini, 1996).

Algoritmo Genético Combinado con un Procedimiento de Búsqueda Directa (GSX)

Los resultados obtenidos por el algoritmo genético fueron utilizados como puntos de comienzo para un procedimiento de búsqueda local, en este caso se utilizó nuevamente el Simplex de Nelder-Mead, que aparece en la caja de herramientas de Matlab a través de la

TABLA 3. VALORES DE LOS PARÁMETROS DEL ALGORITMO GENÉTICO UTILIZADO EN LOS SEIS EXPERIMENTOS REALIZADOS, QUE CONSISTIERON EN SELECCIONAR EL MEJOR DE CADA 10 CORRIDAS REALIZADAS

# Experimento	M	m	Generaciones	nmaxeval
1	1000	20	10	200
2	1000	20	20	400
3	1000	20	30	600
4	1000	20	40	800
5	1000	20	50	1000
6	1000	20	60	1200

TABLA 4. RESULTADOS DE LA MEJOR CORRIDA DE CADA EXPERIMENTO

	Corr. #1	Corr. #2	Corr. #3	Corr. #4	Corr. #5	Corr. #6
Z1	3 405,0	3 515,8	3 622,8	3 481,0	3 562,8	3 515,8
Z2	5 876,0	6 010,6	6 168,4	5 968,1	5 949,2	5 956,6
Z3	3 520,5	3 467,1	3 505,1	3 474,9	3 509,4	3 505,7
ρ1	0,13	0,14	0,11	0,11	0,12	0,11
ρ2	-0,18	-0,21	-0,19	-0,23	-0,21	-0,23
ρ3	0,31	0,33	0,28	0,31	0,33	0,31
Valor fobj	0,0073	0,0066	0,0048	0,0040	0,0030	0,0023

función **fmins**, donde el número máximo de evaluaciones de la función objetivo es 1 200 y la precisión de 10⁻⁴. En este caso se obtuvieron los valores “verdaderos” de los parámetros hasta con tres cifras significativas exactas. En la figura 6 se muestran los resultados del algoritmo para 100 corridas independientes, donde el número de generaciones fue aumentando desde 10 hasta 60, incrementándose el número de evaluaciones de la función objetivo.

Método de Evolución y Mezcla de Complejos (SCE)

Paso 0:

Inicialización: seleccionar $p > 1$ y $m > n+1$, donde p es el número de complejos y m es el número de puntos en cada complejo. Se calcula el tamaño de la muestra $s = p*m$

Paso 1:

Generación de la muestra. Se seleccionan s puntos x_1, \dots, x_s en el espacio de los datos $\Omega \subset \mathbb{R}^n$. Se calcula el valor de la función f_j en cada punto x_j . En ausencia de información *a priori*, se usa una distribución uniforme.

Paso 2:

Partición en complejos. Se realiza la partición D en p complejos A^1, \dots, A^p , cada uno de los cuales tiene m puntos tales que:

$$A^k = \{x_j^k, f_j^k \mid x_j^k = x_{k+p(j-1)}, f_j^k = f_{k+p(j-1)}, j = 1, 2, \dots, m\}$$

Paso 3:

Desarrollo de cada complejo. Cada complejo $A^k, k=1, 2, \dots, p$ se desarrolla según el algoritmo de evolución competitiva de complejo que se describe separadamente más abajo.

Paso 4:

Mezcla de complejo. Reemplazar A^1, \dots, A^p en D , tal que $D = \{A^k, k=1, 2, \dots, p\}$ y ordenar D de forma creciente según los valores de la función objetivo.

Paso 5:

Chequeo de la convergencia. Si el criterio de convergencia es satisfecho, parar. De lo contrario, ir al paso # 2.

Algoritmo de Evolución Competitiva de Complejo

Paso 0:

Inicializar q, α y β tal que $2 < q < m, \alpha > 1, \beta > 1$

Paso 1:

Asignar los pesos a $A^k, k=1, 2, \dots, p$ según una distribución triangular de probabilidad dada por:

El punto x_1^k tiene la probabilidad más alta, $\rho_1 = 2/(m+1)$. El punto x_m^k tiene la probabilidad más baja, $\rho_m = 2/m(m+1)$.

Paso 2:

Selección de padres. Se seleccionan q puntos distintos u_1, \dots, u_q de A^k según la distribución de probabilidades especificadas arriba (los q puntos definen un subcomplejo). Éstos son almacenados en un arreglo $B = \{u_i, v_i, i=1, \dots, q\}$, donde v_i es el valor de la función objetivo asociado con el punto u_i . Almacenar en L las posiciones de A^k , las cuales son usadas para construir B .

Paso 3:

Generar el hijo o descendiente.

(a) Ordenar B y L en forma creciente según los q valores de la función objetivo. Calcular el centroide g usando la expresión.

$$g = [1/(q-1)] \sum_{j=1}^{q-1} u_j$$

(b) Calcular el nuevo punto $r = 2g - u_q$ (paso de reflexión).

(c) Si r está dentro de Ω calcular el valor de la función f_r , e ir al paso (d); de lo contrario, calcular el hipercubo más pequeño $H \subset \mathcal{R}^n$ que contiene a A^k , generar aleatoriamente un punto z dentro de H , calcular f_z , poner $r = z$ y $f_r = f_z$ (paso de mutación).

(d) Si $f_r < f_z$, reemplazar u_q por r , e ir al paso (f); de lo contrario, calcular $c = (g + u_q) / 2$, f_c (paso de contracción).

(e) Si $f_c < f_z$, entonces reemplazar u_q por c , e ir al paso (f); de lo contrario, generar aleatoriamente un punto z dentro de H y calcular f_z (paso de mutación). Reemplazar u_q por z .

(f) Repetir los pasos desde (a) hasta (e) α veces, donde $\alpha \geq 1$ es un parámetro especificado por el usuario.

Paso 4:

Reemplazar los padres por los hijos. Se reemplaza B en A^k usando las posiciones originales almacenadas en L . Ordenar A^k en orden creciente de los valores de la función.

Paso 5:

Repetir los pasos del (1) al (4) β veces, donde $\beta \geq 1$ es un parámetro especificado por el usuario, el cual determina cuántos hijos deberán ser generados (es decir, cuánto debe evolucionar cada complejo).

La filosofía que existe detrás de esta aproximación de SCE es tratar la búsqueda global como un proceso de evolución natural. Los puntos muestreados (s en este caso), constituyen una población. La pobla-

ción es dividida en varias comunidades (o complejos), a cada uno de los cuales se le permite que evolucione independientemente (el espacio de búsqueda se explora en diferentes direcciones). Después de realizar un cierto número de generaciones, las comunidades se fuerzan para mezclarse; luego, nuevas comunidades son formadas a través del proceso de mezcla. Este procedimiento garantiza la supervivencia por medio de compartir la información obtenida independientemente por cada comunidad acerca del espacio de búsqueda.

Cada miembro de la comunidad (o complejo) es un padre potencial con capacidad de participar en el proceso de reproducción. Un subcomplejo seleccionado del complejo es como un par de padres, excepto que un subcomplejo puede consistir en más de dos miembros. Para asegurar que el proceso sea competitivo se requiere que la probabilidad de los mejores padres, para que contribuyan en la generación de los hijos, sea más alta que la de los peores padres. El uso de una distribución de probabilidad triangular asegura esta competitividad. Después, el procedimiento Simplex es aplicado a cada subcomplejo para generar muchos de los hijos. Esta estrategia usa la información contenida en cada subcomplejo, para dirigir la evolución hacia el mejoramiento de la dirección. Puede agregarse, además, que los hijos son introducidos en posiciones aleatorias del espacio de los datos, bajo ciertas condiciones, para garantizar que el proceso de evolución no quede atrapado en regiones no comprometidas. Esto es algo análogo al proceso de mutación que se produce en respuesta al estrés que ocurre en la evolución biológica. Cada mutación también ayuda a incrementar la cantidad de información almacenada en la muestra. Finalmente, cada hijo reemplaza al peor punto del subcomplejo que está evolucionando en lugar que el peor punto de la población entera. Esto garantiza que cada padre consiga, al menos, una oportunidad para contribuir con el proceso de reproducción antes de que sea reemplazado o descartado.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En la figura 7 aparecen los resultados de 100 corridas independientes del método SCE para el modelo de seis parámetros, y se indica de izquierda a derecha el incremento de la cantidad de complejos (desde 1 hasta 8) de siete puntos. Con el propósito de la comparación se incluyeron los resultados de la aplicación de los métodos del MSX y del GSX. El método de SCE es tres veces más eficiente que el MSX y dos veces más eficiente que el GSX. El método GSX es dos veces más

eficiente que el MSX. Si se considera aceptable una probabilidad de fallo de un 5 %, entonces el número de evaluaciones requeridas se reduce en menos de 1 500 (utilizando 4 complejos de 7 puntos).

Los métodos tradicionales de optimización local que han sido aplicados para resolver el problema inverso en la Geofísica, tienen dos problemas fundamentales que pueden limitar su efectividad: primero, la complejidad de la geometría de los cuerpos geológicos responsables de las anomalías de campos potenciales, conjuntamente con sus propiedades físicas (densidad y/o magnetismo) hace que la formulación matemática del modelo sea fuertemente no lineal, entonces se necesita tener un “buen” punto de comienzo para obtener resultados satisfactorios con estos métodos, y segundo, la ambigüedad inherente al proceso de inversión de datos de campos potenciales provoca un número grande de soluciones que satisfacen las restricciones del problema; es decir, hay múltiples óptimos locales y estos métodos sólo funcionan bien cuando la función es unimodal. De manera que los métodos tradicionales no están diseñados para estas dificultades y se hace necesario utilizar procedimientos de optimización global.

En la sección 4 usamos una técnica gráfica para mostrar la severidad del problema de los múltiples óptimos. Lo más importante fue la cantidad grande de óptimos locales y la baja sensibilidad de la función objetivo a la variabilidad de los parámetros sobre el espacio de los parámetros.

En la sección 5 se examinaron tres procedimientos de optimización global para el problema de inversión de datos potenciales gravimétricos, para un modelo de seis parámetros. Se realizaron 100 pruebas independientes para el Método de Multicomienzo con el algoritmo Simplex; el algoritmo pudo identificar los parámetros en 99 veces de 100, con 8 puntos de comienzo. A pesar de que la efectividad del algoritmo MSX es alta, no es muy eficiente, ya que requiere un número alto de evaluaciones de la función.

Se realizaron seis experimentos con el algoritmo genético (ver Tabla 5), y el mismo mostró su incapacidad para identificar los parámetros; sin embargo, todos los puntos obtenidos por el algoritmo genético resultaron estar en una vecindad próxima al óptimo global, de manera que ellos constituyeron buenos puntos de comienzo para el algoritmo Simplex. Se realizaron 100 pruebas independientes para el algoritmo genético combinado con Simplex para cada uno de los parámetros del algoritmo genético mostrado en la Tabla 3, y el mismo logró tener una alta efectividad al identificar los parámetros en 99 ve-

ces de 100 con 60 generaciones; sin embargo, la eficiencia del mismo, aunque mejor que la del algoritmo MSX, no es tan buena por la cantidad de evaluaciones de la función que debe realizar. Finalmente, se evaluó el procedimiento de optimización global de Evolución y Mezcla de Complejos, diseñado para calibrar modelos hidrológicos conceptuales (Duan, 1992; Sorooshian, 1993), el cual parece ser efectivo y eficiente en la identificación de los valores de los parámetros del modelo.

El SCE sólo requirió la tercera parte de las evaluaciones del método de MSX, y la mitad de las evaluaciones del método del GSX con la misma probabilidad de éxito (99 en 100).

CONCLUSIONES

La inversión de datos de campos potenciales, utilizando los procedimientos convencionales, tiene una baja probabilidad de éxito para obtener un único conjunto óptimo de los parámetros del modelo. Esta incertidumbre es trasladada cada vez que se quiera hacer cualquier pronóstico con el mismo. La razón por la cual no es posible estimar un único conjunto de parámetros óptimos es que los procedimientos típicamente utilizados no están diseñados para manejar las dificultades que se encuentran en este tipo de problemas inversos. Los resultados presentados en este trabajo muestran la ambigüedad existente en el proceso de inversión de datos de campos potenciales, con la presencia de múltiples óptimos locales, lo cual provoca que los procedimientos de búsqueda local alcancen su convergencia prematuramente (para el método Simplex, se encontró que la probabilidad de fallo fue del 55 % para el modelo de seis parámetros que utiliza los tres prismas horizontales de 4 lados en este estudio).

Los resultados indican que los tres procedimientos de optimización son capaces de identificar los parámetros óptimos globales durante el proceso de inversión de datos del campo gravimétrico: el MSX, un procedimiento de Multicomienzo basado en el algoritmo Simplex; el GSX y el algoritmo genético combinado con el Simplex. Se debe destacar que en las corridas efectuadas del algoritmo genético, en ninguno de los casos logró identificar los parámetros verdaderos; sin embargo, los resultados brindados por él, constituyeron “buenos” puntos de partida para el algoritmo Simplex. Por último el SCE, procedimiento de optimización global basado en la Evolución Competitiva y Mezcla de Complejos.

El MSX es un algoritmo que puede ser usado cuando la probabilidad de fallo no sea muy grande y cuando se disponga de un tiempo de máquina razonable.

Sin embargo, no es factible la utilización de la inversión de datos de campos potenciales cuando la dimensión del problema es alta, aunque la eficiencia del GSX es dos veces mayor que la del MSX, resulta el método SCE, tres veces más eficiente que MSX y dos veces más eficiente que GSX, además de su fácil programación.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AL-CHALABI, M.: "Interpretation of gravity anomalies by non-linear optimization", *Geophysical Prospecting* 20, 1-16, 1971a.

-----: Some studies relating to nonuniqueness in gravity and magnetic inverse problems *Geophysics* 36, 835-855, 1971b.

BOSCHETTI, F., M. C. DENTITH AND R. D. LIST: "Inversion of potential field data by genetic algorithms", *Geophysical Prospecting* 45:461-478, 1997.

DUAN, Q.: "Effective and efficient global optimization for conceptual rainfall-runoff models calibration", *Water Resour. Res.*, 28(4), 1015-1031, 1992.

FRANCHINI, M.: "Using a genetic algorithm combined with a local search method for the automatic calibration of conceptual rainfall - runoff models", *Hydrological Sciences Journal*, 41(1):21-40, 1996.

NELDER, J. A. AND A. MEAD: "Simplex method for function minimization", *Comput. J.*, 7(4), 308-313, 1965.

RINNOOY KAN, A. AND H. G. TIMMER: *Global optimization: A survey*, in *New Methods in Optimization and Their Industrial Uses*, edited by J.P. Penot, Birkuser Verlag, Basel, Switzerland, 1989.

SOROOSHIAN, S., Q. DUAN AND V. GUPTA: "Calibration of Rainfall-Runoff Models: Application of Global Optimization to the Sacramento Soil Moisture Accounting Model", *Water Resour. Res.*, 29 (4) : 1185-1194, 1993.

WANG, Q. J.: "The genetic algorithm and its application to calibrating conceptual rainfall-runoff models", *Water Resour. Res.*, 27 (9): 2467-2471, 1991.

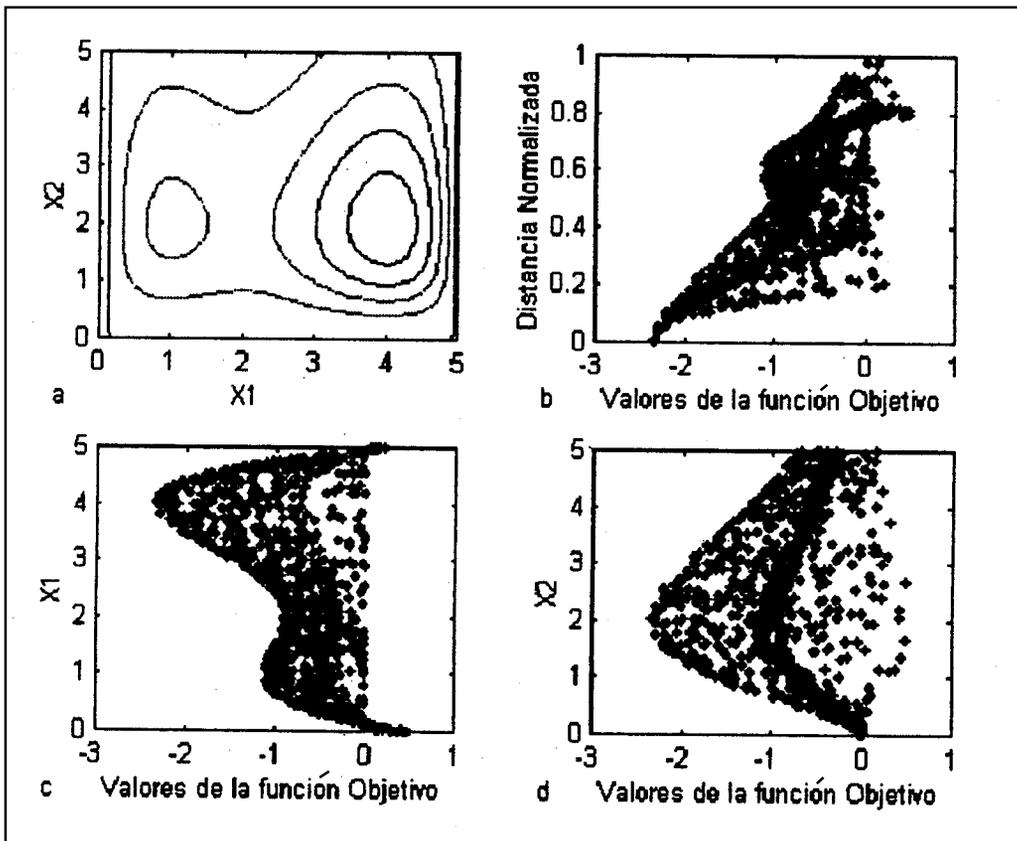


Figura 1. Método de Muestreo Uniforme aplicado a la función de Hosaki, (a) gráfico de las curvas de nivel para la función de Hosaki. (b) Gráfico DNORM para la función de Hosaki. (c) Gráfico X_1 VPAR de la función de Hosaki. (d) Gráfico X_2 VPAR de la función de Hosaki.

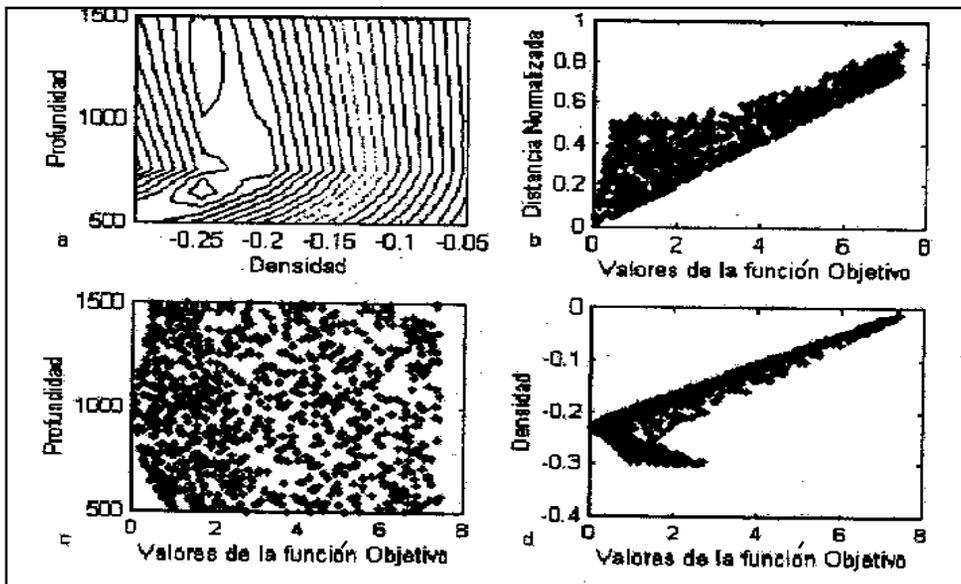


Figura 2. Método de Muestreo Uniforme aplicado al modelo del prisma con dos parámetros. (a) Gráfico de las curvas de nivel para la función de la superficie respuesta del modelo de dos parámetros. (b) Gráfico DNORM para la función de la superficie respuesta del modelo de dos parámetros. (c) Gráfico Z1 VPAR de la función de la superficie respuesta. (d) Gráfico P VPAR de la función de la superficie respuesta.

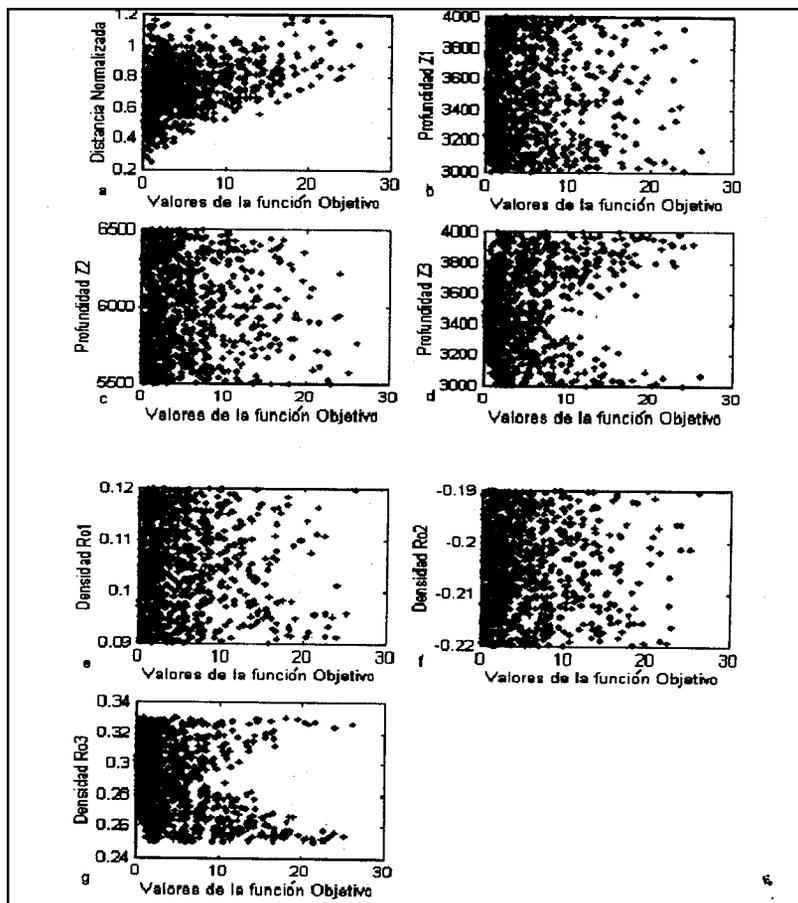


Figura 3. Método de Muestreo Uniforme aplicado al modelo de los tres prismas con seis parámetros. (a) Gráfico DNORM para la función de la superficie respuesta del modelo de seis parámetros. Gráficos VPAR para los parámetros: (b) Parámetro Z1; (c) Parámetro Z2; (d) Parámetro Z3; (e) Parámetro p_1 ; (f) Parámetro p_2 ; (g) Parámetro p_3 .

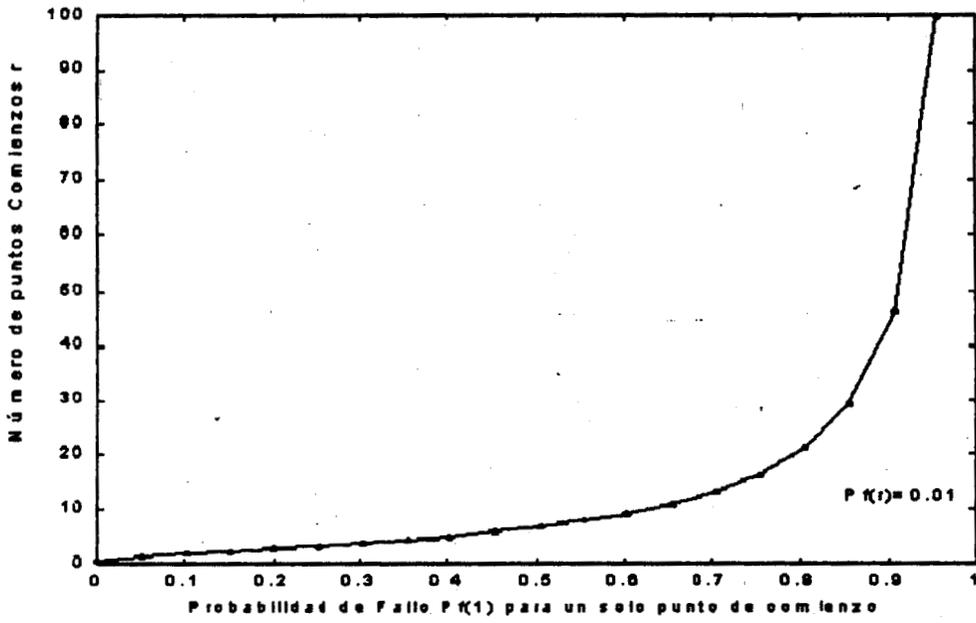


Figura 4. Curva de representación teórica para algún algoritmo de multicomenzo.

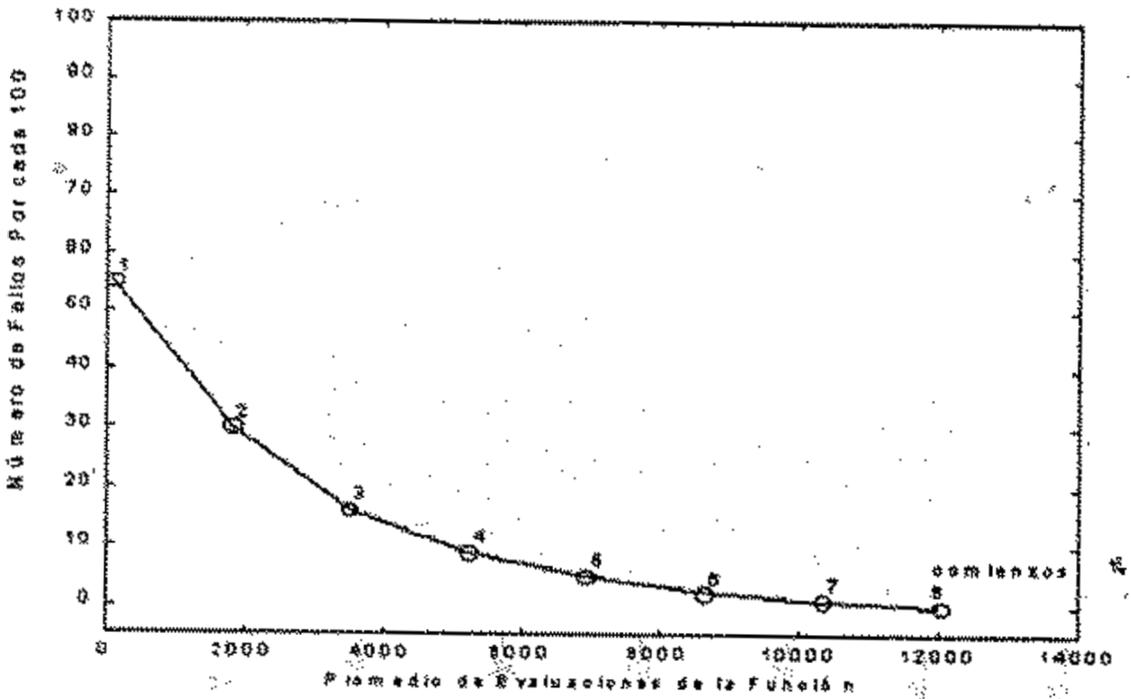


Figura 5. Gráfico de efectividad v.s eficiencia para el algoritmo MSX.

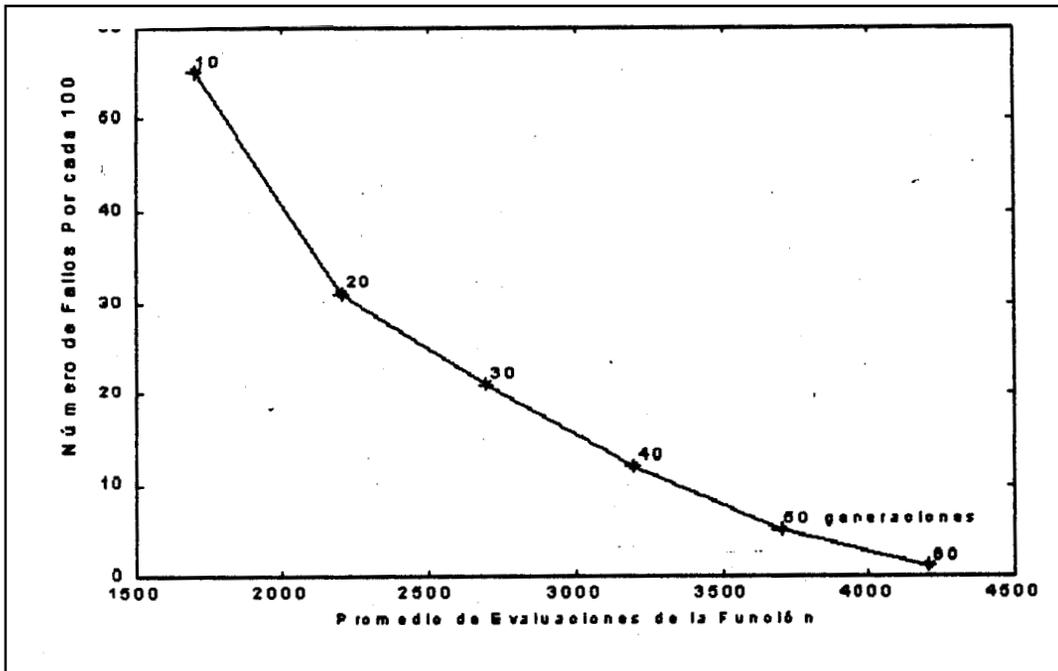


Figura 6. Gráfico de efectividad v.s eficiencia para el algoritmo GSX.

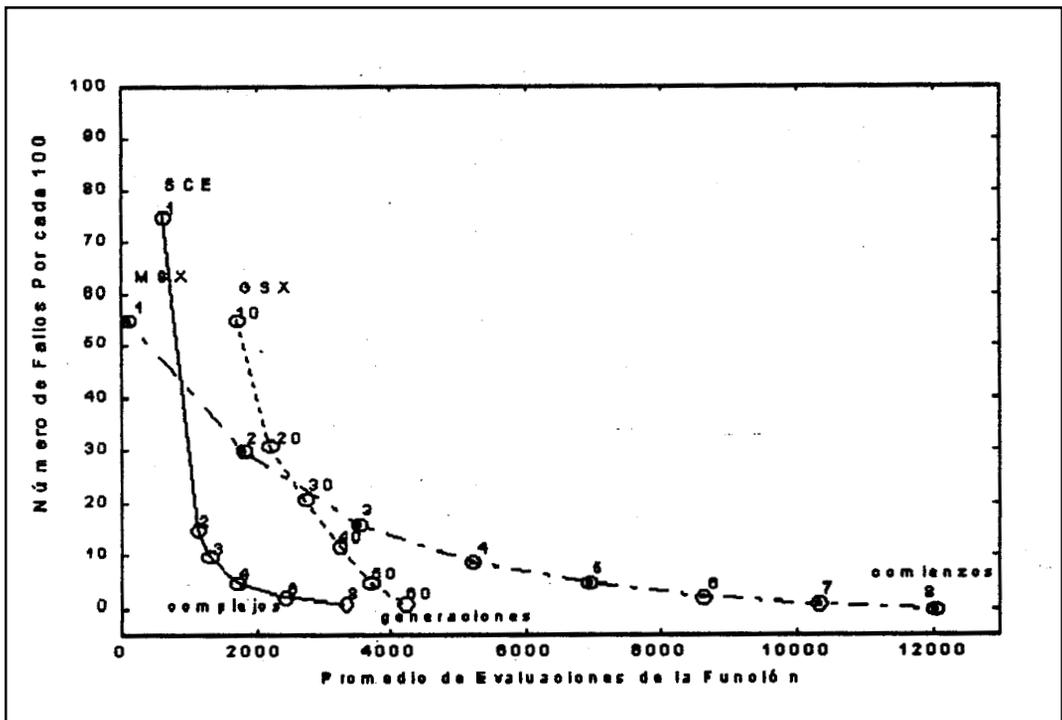


Figura 7. Gráfico de efectividad v.s eficiencia para el algoritmo SCE, el algoritmo GSX y el algoritmo MSX.