

Inversion von Messdaten

Wintersemester 2001

Educational Material

Author(s):

Holliger, Klaus; Van der Lee, Suzan

Publication date:

2002

Permanent link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-004302548>

Rights / license:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#)

Wintersemester 2001

INVERSION VON MESSDATEN

**Manuskript zum Teil der Vorlesung Modellierung und
Inversionsverfahren in der Umweltphysik und
Geophysik**

PD Dr. Klaus Holliger

Die **Vorlesung** wird gehalten von

Dr. S. van der Lee

Institut für Geophysik, ETH-Hönggerberg, CH-8093 Zürich

HPP P2, Telefon 01/633 2907

INHALT

1. EINFÜHRUNG	4
2. EIN EINFACHES BEISPIEL	7
3. DIE LEAST-SQUARES METHODE FÜR ALLGEMEINE LINEARE INVERSIONSPROBLEME	14
4. WESHALB LEAST-SQUARES?	16
5. STELLUNG DES INVERSIONSPROBLEMS	21
5.1. Unterbestimmte Probleme	21
5.2. Exakt Bestimmte Probleme	21
5.3. überbestimmte Probleme	22
5.4. Gemischt Bestimmte Probleme	22
6. DEMPfung DER LEAST-SQUARES LÖSUNG	24
7. EINBEZUG VON A PRIORI INFORMATION	26
7.1. Erwartungswerte für Modellparameter	26
7.2. Selektive Gewichtung von Modellparametern und Daten	27
8. BEURTEILUNG DER LÖSUNG	29
8.1. Größe der Residuen	29
8.2. Unsicherheiten der geschätzten Parameter	30
8.3. Datenresolutionsmatrix	31
8.4. Modellresolutionsmatrix	32
9. LEAST-SQUARES INVERSION VON NICHTLINEAREN PROBLEMEN	33
9.1. Grundätzliches	33
9.2. Least-Squares Lösung von Nichtlinearen Inversionsproblemen	37
9.3. Konvergenz und Eindeutigkeit der Lösung	40
10. INVERSION STARK NICHTLINEARER PROBLEME	42

10.1. Grid Search	42
10.2. Monte Carlo Inversion	42
10.3. Simulated Annealing	47
10.4. Genetische Algorithmen	50
11. WEITERF HRENDE LITERATUR	53

1. EINFÜHRUNG

This model will be a simplification and an idealisation, and consequently a falsification.

It is to be hoped that the features retained for discussion are those of greatest importance in the present state of knowledge (Turing, 1952). Mit diesen treffenden Worten beschrieb der britische Mathematiker und Computerpionier Alan Turing (1912-1954) die eigentliche philosophische Grundlage von wissenschaftlichen Modellen und Modellierungsvorgängen:

- Ausgehend von bestimmten Beobachtungen entwickeln wir Hypothesen bezüglich der dafür verantwortlichen fundamentalen Prozesse.
- Diese Hypothesen übersetzen wir in vereinfachter Form in eine mathematische Beschreibung unseres Problems.
- Dann suchen wir spezielle, unserem Problem angepasste Lösungen dieser mathematischen Beschreibung.
- Schliesslich versuchen wir, die Ergebnisse dieser Modellrechnungen durch Variation der freien Modellparameter möglichst gut an unsere Beobachtungsdaten anzupassen.

Schematisch lässt sich der eigentliche Modellierungsvorgang so darstellen:

Modellparameter: \mathbf{m} → Modell: g → Vorhersage von Daten: \mathbf{d}^{syn}

Oder in Form einer mathematischen Gleichung ausgedrückt:

$$\mathbf{d}^{\text{syn}} = g(\mathbf{m}) \tag{1.1}$$

\mathbf{d}^{syn} und \mathbf{m} sind Vektoren und g ist eine mathematische Abbildungsvorschrift. Da wir direkt von Modellparametern ausgehen und damit Daten vorhersagen, wird dieses Vorgehen auch als *Vorwärtsmodellieren* oder als die *Lösung des Vorwärtsproblems* bezeichnet. Wir können das Problem aber auch so verstehen, dass wir auf Grund von

Beobachtungsdaten diejenigen Modellparameter suchen, die diese Daten am besten reproduzieren:

$$\text{Beobachtungsdaten: } \mathbf{d}^{\text{obs}} \rightarrow \text{Modell: } g \rightarrow \text{Geschätze Modellparameter: } \mathbf{m}^{\text{est}}$$

Oder in Form einer mathematischen Gleichung ausgedr ckt:

$$\mathbf{m}^{\text{est}} = g^{-1}(\mathbf{d}^{\text{obs}}) \quad (1.2)$$

Da wir hier im Vergleich zum Vorwärtsproblem den umgekehrten Weg beschreiten, wird dieses Vorgehen als Lösung des *inversen Problems* oder kurz als *Inversion* bezeichnet. Wie wir noch sehen werden ist die Unterscheidung zwischen Modellierung (Gleichung 1.1) und Inversion (Gleichung 1.2) bis zu einem gewissen Grad künstlich. Normalerweise lösen wir das Vorwärtsproblem nicht nur um synthetische Daten zu produzieren, sondern um diese mit Beobachtungsdaten zu vergleichen. Auf Grund dieses Vergleiches entscheidet man sich dann intuitiv, gewisse Modellparameter zu ändern und wiederholt den ganzen Vorgang bis eine befriedigende Übereinstimmung zwischen beobachteten und berechneten Daten erreicht ist. Am Schluss erhalten wir also auch so eine Schätzung der unsere Beobachtungen am besten reproduzierenden Modellparameter. Der Hauptunterschied zwischen Vorwärtsmodellierung und Inversion ist somit im wesentlichen, dass letztere die Suche nach den optimalen Modellparametern automatisiert und damit den gesamten mit der Modellierung und Inversion verbundenen Interpretationsvorgang in einem gewissen Sinne objektiviert.

Die Inversion von bestimmten geophysikalischen Beobachtungsgrößen (z.B. seismische Laufzeiten, Schwereanomalien, Wärmefluss) in räumliche Verteilungen bestimmter, erdwissenschaftlich relevanter Parameter im Untergrund (z.B. Verteilung seismischer Geschwindigkeiten, Dichteverteilung, Temperaturverteilung) ist eine der Hauptaufgaben der angewandten Geophysik. In diesem Kurs wollen wir uns hierfür die

Grundlagen aneignen. Inversion ist ein recht spezifisch geophysikalischer Begriff. Selbstverständlich sind aber die Methoden, die wir hier kennenlernen werden in ihrer Anwendung nicht auf die Geophysik beschränkt. Ausserhalb der Geophysik spricht dann oft von der *Optimierung* eines Modells in Bezug auf Beobachtungsdaten, von der *Maximierung* oder *Minimierung* von Modellfunktionen oder einfach auch nur von der *Modellierung* von Beobachtungsdaten.

Der grundlegende Vorgang, d.h. die Schätzung von Modellparametern durch möglichst optimale Anpassung des Modells an die Beobachtungen, ist bereits seit langer Zeit ein wichtiger Bestandteil aller Natur- und Ingenieurwissenschaften. So wurde die Methode der kleinsten Quadrate, die auch heute noch gebräuchlichste Inversionsmethode, bereits von Carl Friedrich Gauss (1777-1855) eingeführt, um Abschussfehler bei der Vermessung auszugleichen. Prominente Beispiele von Anwendungen der Inversionstheorie ausserhalb der Geophysik sind: Anpassen von Modellkurven an Beobachtungsdaten (engl.: curve fitting), Extrapolation von Beobachtungsdaten (Vorhersage), medizinische Tomographie.

2. EIN EINFACHES BEISPIEL

Ein praktisches Problem bei der Planung und Projektierung tiefliegender Tunnelbauten, wie z.B. der NEAT, ist die Abschätzung der Temperaturverteilung im Untergrund, da diese einen bestimmenden Einfluss auf die Planung des teuren Belüftungssystems hat. Eine offensichtliche Lösung dieses Problems wäre es, einfach ein Bohrloch auf das Tunnelniveau abzuteufen und die Temperatur dort *in situ* zu messen. Gerade bei tiefliegenden Tunnelbauten ist dieses Vorgehen aber zu teuer, und man muss sich daher mit auf Modellrechnungen basierenden Vorhersagen begnügen. Grundlagen für die entsprechenden Modellrechnungen sind in der Regel detaillierte Temperaturmessungen in un tiefen Bohrlöchern. Im folgenden wollen wir ein derartiges hypothetisches Beispiel durchrechnen, um Art und Nutzen der Inversion von geophysikalischen Messdaten zu veranschaulichen.

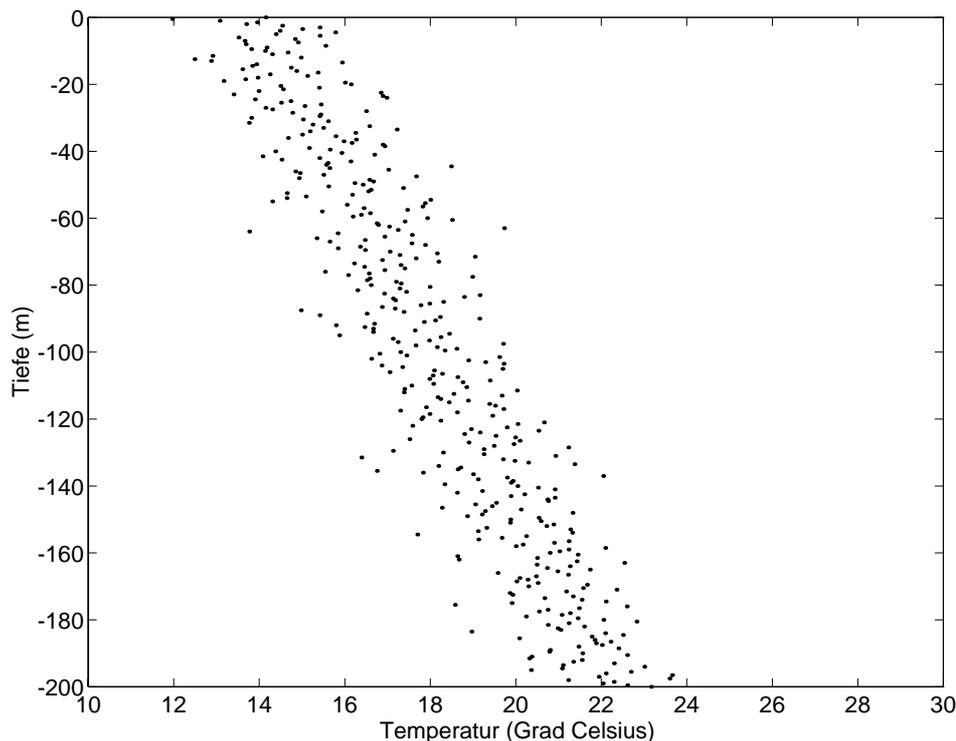


Abbildung 2.1. Hypothetische Temperaturmessungen in einem Bohrloch.

Abbildung 2.1 zeigt hypothetische Temperaturmessungen entlang eines Bohrlochs bis in eine Tiefe von etwa 200 m. Daraus wollen wir eine Vorhersage über die Temperatur auf

dem Tunnelniveau in 1000 m Tiefe herleiten. Zudem wollen wir quantitative Aussagen über die Unsicherheiten dieser Schätzung machen können. Trotz ihrer Streuung weisen die gemessenen Daten in Abbildung 2.1 auf eine lineare Zunahme der Temperatur mit der Tiefe hin. Als erstes müssen wir uns daher fragen, ob eine derartige Temperaturtiefenverteilung grundsätzlich Sinn macht, und ob wir eine Fortsetzung dieser Verteilung in grösseren Tiefen erwarten können. Wenn wir uns an die Grundzügevorlesung erinnern, erkennen wir, dass die theoretischen Voraussetzungen für eine lineare Zunahme der Temperatur mit der Tiefe bei konstantem Wärmeflusses und rein konduktiver Wärmeleitung erfüllt sind. Mit diesen Annahmen, sind wir somit in der Lage, die einzelnen Bestandteile unseres Inversionsproblems (Gleichung 1.2) zu identifizieren:

- Beobachtete Daten \mathbf{d}^{obs} : An bestimmten Tiefenpunkten gemessen Temperatur
- Modell $\mathbf{d}^{\text{syn}} = m_1 \mathbf{z} + m_2$: Lineare Temperaturzunahme mit der Tiefe
- Modellparameter \mathbf{m} : Konstanten m_1 und m_2 der obigen Geradengleichung

Sofern das obige Modell richtig ist, lassen sich also die beobachteten Daten bis auf den bei allen Beobachtungsdaten vorhandenen Messfehler berechnen. Zur Bestimmung der Modellparameter müssen wir die Differenz zwischen beobachteten und berechneten Daten minimieren. Dies kann dies grundsätzlich auf verschiedene Arten erreicht werden:

- Wir nehmen einen Lineal und legen “von Auge” die am besten angepasste Gerade durch die Datenwolke. Dies ist eine durchaus legitime Methode. Es gibt tatsächlich Optimierungsverfahren ("Neuronale Netzwerke", "Fuzzy Logic"), die die dabei im menschlichen Gehirn ablaufenden Entscheidungsprozesse nachzuvollziehen versuchen. Hauptproblem ist die Fehlerabschätzung.
- Wir programmieren die Geradengleichung und variieren deren Konstanten so lange bis wir mit dem “Fit” zufrieden sind. Dieser Vorgang entspricht einer Vorwärtsmodellierung *sensu strictu* (siehe Gleichung 1.1). Ein Hauptproblem ist

wiederum die Fehlerabschätzung. Zudem wird dieses Vorgehen bei komplizierteren Modellen mit vielen freien Parametern extrem aufwendig und langweilig.

- Wir bestimmen die Geradenkonstanten durch formale mathematische Minimierung der Diskrepanz zwischen Beobachtung und Modell. Dies entspricht einer Inversion *sensu strictu* (Gleichung 1.2). Im folgenden wollen wir dieses Vorgehen an unserem einfachen Beispiel kennenlernen und illustrieren.

Auf Grund der einfachen linearen Beziehung zwischen Daten und Modellparametern vereinfacht sich die allgemeine Beziehung für das Vorwärtsproblem $\mathbf{d}^{\text{syn}} = g(\mathbf{m})$ zur Matrixgleichung $\mathbf{d}^{\text{syn}} = \mathbf{G}\mathbf{m}$. Hierbei sind \mathbf{d}^{syn} und \mathbf{m} Spaltenvektoren und \mathbf{G} eine Matrix. \mathbf{G} wird oft als Designmatrix oder Datenkern (engl.: data kernel) bezeichnet. Wären unsere Daten fehlerfrei und würde unser einfaches lineares Temperaturtiefenmodell vollkommen der Wirklichkeit entsprechen, d.h. $\mathbf{d}^{\text{obs}} = \mathbf{d}^{\text{syn}}$, so erhielten wir die Beziehung:

$$\mathbf{d}^{\text{obs}} = \mathbf{d}^{\text{syn}} = \mathbf{G}\mathbf{m} = m_1 + m_2\mathbf{z} \quad (2.1)$$

Die gesuchten Modellparameter m_1 und m_2 erhalte man dann durch die formale Inversion der oben Matrixgleichung:

$$\mathbf{m}^{\text{est}} = \mathbf{G}^{-1}\mathbf{d}^{\text{obs}} \quad (2.2)$$

Da aber, wie bereits erwähnt, Messdaten immer auch Fehler enthalten und zudem auch noch so raffinierte Modelle die Natur nie vollständig beschreiben können, kompliziert sich die Beziehung 2.1 zu:

$$\begin{aligned}
\mathbf{e} &= \mathbf{d}^{\text{obs}} - \mathbf{d}^{\text{syn}} \\
&= \mathbf{d}^{\text{obs}} - \mathbf{G}\mathbf{m} \\
&= \mathbf{d}^{\text{obs}} - m_2 \mathbf{z} - m_1
\end{aligned} \tag{2.3}$$

Mit anderen Worten wir können die Beobachtungsdaten nicht perfekt reproduzieren, und $\mathbf{e} = \mathbf{d}^{\text{obs}} - \mathbf{d}^{\text{syn}}$ stellt den Fehler, den "Misfit" oder das Residuum (d.h. die Diskrepanz zwischen den gemessenen und berechneten Daten) dar. Bitte beachten Sie, dass es sich bei \mathbf{e} ebenfalls um einen Vektor handelt, der gleich viele Zeilen wie \mathbf{d}^{obs} und \mathbf{d}^{syn} enthält. Ziel unserer Bemühungen muss es somit sein, diesen Fehler, respektive die Länge des Fehlervektors \mathbf{e} , nach gewissen Kriterien zu minimieren. Ein bekanntes und bewährtes Rezept hierzu ist die bereits von Carl Friedrich Gauss (1777-1855) eingeführte Methode der kleinsten Quadrate. Im folgenden werden wir dafür den mittlerweile auch im deutschen Sprachraum gebräuchlichen englischen Ausdruck "least-squares" benutzen. Hierbei wird versucht, die Summe der Fehlerquadrate zu minimieren. Wir suchen also das Minimum der Fehler- oder Objektfunktion:

$$\begin{aligned}
E(\mathbf{m}) &= \sum_{i=1}^n e_i^2 \\
&= \sum_{i=1}^n (d_i^{\text{obs}} - G_{ij} m_j)^2 \\
&= \sum_{i=1}^n (d_i^{\text{obs}} - m_2 z_i - m_1)^2
\end{aligned} \tag{2.4}$$

In der Analysis haben wir gelernt, wie man die Extrema (Minima und Maxima) von Funktionen bestimmt: man sucht die Stellen deren erste Ableitung gleich null ist. Da $E(\mathbf{m})$ die Form einer Parabel hat, entsprechen hier die Extrema immer einem wohldefinierten Minimum. Wir müssen also die beiden folgenden Gleichungen lösen:

$$\frac{\partial E}{\partial m_1} = -2 \sum_{i=1}^n (d_i^{\text{obs}} - m_2 z_i - m_1) = 0 \tag{2.5}$$

$$\frac{\partial E}{\partial m_2} = -2 \sum_{i=1}^n (d_i^{obs} - m_2 z_i - m_1) z_i = 0 \quad (2.6)$$

Für die gesuchten Modellparameter erhalten wir so:

$$m_1 = \frac{\sum_{i=1}^n z_i^2 \sum_{i=1}^n d_i^{obs} - \sum_{i=1}^n z_i \sum_{i=1}^n z_i d_i^{obs}}{n \sum_{i=1}^n z_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n z_i\right)^2} \quad (2.7)$$

$$m_2 = \frac{n \sum_{i=1}^n z_i d_i^{obs} - \sum_{i=1}^n z_i \sum_{i=1}^n d_i^{obs}}{n \sum_{i=1}^n z_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n z_i\right)^2} \quad (2.8)$$

Dies ergibt für das in Abbildung 2.1 dargestellte Temperaturtiefenprofile: $m_1 = 14.0 \text{ } ^\circ\text{C}$, $m_2 = 0.04 \text{ } ^\circ\text{C} / \text{m}$. In Abbildung 2.2 ist die entsprechende Gerade über die Beobachtungswerte geplottet und bis auf das Tunnelniveau in 1000 m Tiefe extrapoliert. Die so in dieser Tiefe vorhergesagte Temperatur beträgt $54.0 \text{ } ^\circ\text{C}$.

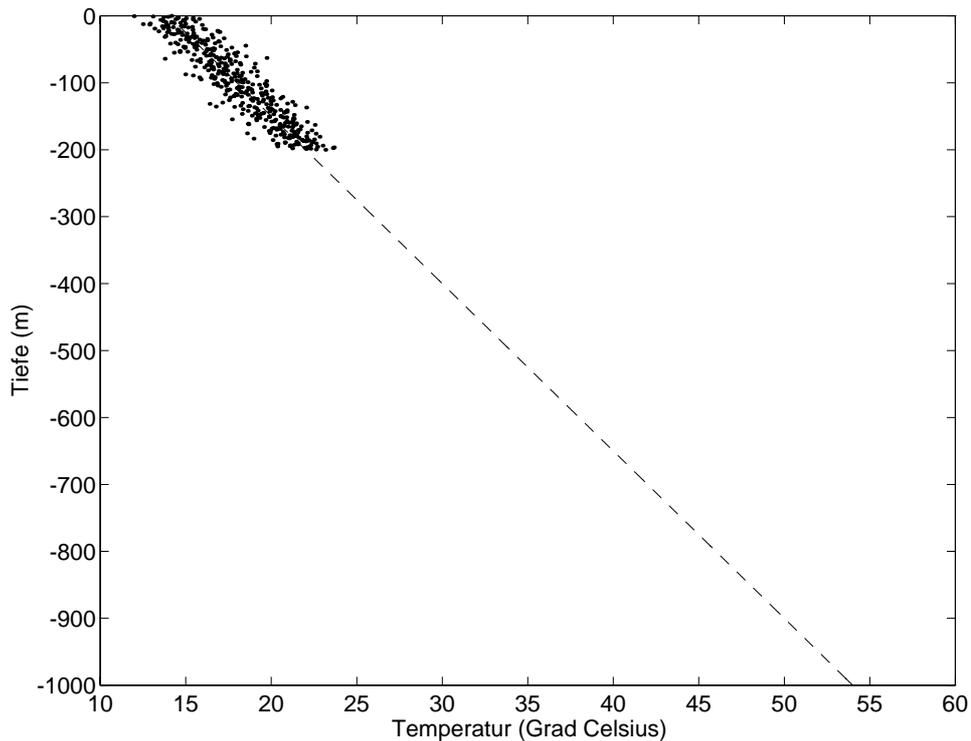


Abbildung 2.1. Hypothetische Temperaturmessungen und zugehörige bestangepasste Gerade basierend auf dem Ansatz der kleinsten Fehlerquadrate.

Wir erkennen, dass die ermittelten Geradenparameter tatsächlich den den Trend der Beobachtungsdaten gut reproduzieren. Noch wissen wir aber nicht, wie gross die Fehler der geschätzten Parameter sind und haben damit letztlich nichts gegenüber den beiden anderen oben beschriebenen Methoden gewonnen (graphische Anpassung "von Auge" und Vorwärtsmodellieren basierend auf Versuch und Irrtum). Sowohl m_1 als auch m_2 sind klar definierte Funktionen von \mathbf{d}^{obs} . Kennen wir daher den Messfehler in \mathbf{d}^{obs} (quantifiziert durch dessen Standardabweichung σ) und nehmen an, dass \mathbf{z} fehlerfrei gemessen wurde, dann können wir die daraus resultierenden Unsicherheiten unserer Schätzungen von m_1 und m_2 mit Hilfe der Methode der Fehlerausbreitung $y = f(x) \Leftrightarrow \sigma_y^2 = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2 \sigma_x^2$ berechnen. Dies ergibt für die Varianz (Quadrat der Standardabweichung) der geschätzten Parameter:

$$\sigma^2(m_1) = \frac{\sigma^2 \sum_{i=1}^n z_i^2}{n \sum_{i=1}^n z_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n z_i \right)^2} \quad (2.9)$$

$$\sigma^2(m_2) = \frac{n\sigma^2}{n \sum_{i=1}^n z_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n z_i \right)^2} \quad (2.10)$$

In unserem obigen Beispiel ist $\sigma = 1.0 \text{ }^\circ\text{C}$ und wir erhalten so für die entsprechenden Standardabweichungen $\sigma(m_1) = 0.1 \text{ }^\circ\text{C}$ und $\sigma(m_2) = 0.001 \text{ }^\circ\text{C} / \text{m}$. Somit können wir unsere Temperaturprognose auf dem Tunnelniveau in 1000 m Tiefe wie folgt präzisieren: $T(1000 \text{ m}) = 54.0 \pm 1.1 \text{ }^\circ\text{C}$.

3. DIE LEAST-SQUARES METHODE FÜR ALLGEMEINE LINEARE INVERSIONSPROBLEME

Stellen wir uns einmal vor, dass unser Temperaturtiefenprofil durch zirkulierende Wässer gestört wurde. Die resultierende Kurve wäre dann nicht mehr linear und kann am ehesten mit einem Polynom vom Grad $N > 2$ angepasst werden. Wir sehen nun aber, dass obwohl die eigentliche Messkurve nicht mehr linear verläuft, die Abhängigkeit unserer Modellkurve $d_i^{syn} = m_1 + m_2 z_i + m_3 z_i^2 + \dots + m_{N+1} z_i^N$ von den Parametern $\mathbf{m} = (m_1, m_2, \dots, m_N)^T$ nach wie vor linear ist. Wir können also auch dieses Vorwärtsproblem in der einfachen Matrixform $\mathbf{d}^{syn} = \mathbf{Gm}$ darstellen.

Da sich aber der Parametervektor \mathbf{m} vom obigen Problem unterscheidet, ist die in den Gleichungen 2.7 und 2.8 dargestellte Lösung nicht anwendbar. Das heisst, wir müssen nach einer allgemeinen Lösung des linearen Inversionsproblems $\mathbf{e} = \mathbf{d}^{obs} - \mathbf{d}^{syn} = \mathbf{d}^{obs} - \mathbf{Gm}$ suchen. Dabei wollen wir, wie wir es bereits im oben behandelten Spezialfall $\mathbf{d}^{syn} = m_1 + m_2 \mathbf{z}$ getan haben, die auf der Summe der Fehlerquadrate basierende Objektfunktion $E(\mathbf{m})$ minimieren:

$$E(\mathbf{m}) = \mathbf{e}^T \mathbf{e} = (\mathbf{d}^{obs} - \mathbf{Gm})^T (\mathbf{d}^{obs} - \mathbf{Gm}) \quad (3.1)$$

Wir sehen, dass auch in diesem allgemeinen Fall die Objektfunktion $E(\mathbf{m})$ immer ein Paraboloid beschreibt. Der Extremwert von $E(\mathbf{m})$ entspricht daher immer ihrem globalen Minimum und damit - gemäss dem least-squares Ansatz - der kleinsten Diskrepanz zwischen gemessenen und berechneten Daten. Die allgemeine Lösung des linearen least-squares Inversionsproblem (Gleichung 3.1) erhalten wir also wiederum, wenn wir die erste Ableitung von $E(\mathbf{m})$ nach \mathbf{m} berechnen, diese gleich null setzen und das resultierende Gleichungssystem auflösen:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E}{\partial \mathbf{m}} &= \frac{\partial(\mathbf{d}^{\text{obs}\text{T}} \mathbf{d}^{\text{obs}} - \mathbf{d}^{\text{obs}\text{T}} \mathbf{G} \mathbf{m} - \mathbf{m}^{\text{T}} \mathbf{G}^{\text{T}} \mathbf{d}^{\text{obs}} + \mathbf{m}^{\text{T}} \mathbf{G}^{\text{T}} \mathbf{G} \mathbf{m})}{\partial \mathbf{m}} \\
&= -\mathbf{d}^{\text{obs}\text{T}} \mathbf{G} - \mathbf{G}^{\text{T}} \mathbf{d}^{\text{obs}} + \mathbf{G}^{\text{T}} \mathbf{G} \mathbf{m} + \mathbf{m}^{\text{T}} \mathbf{G}^{\text{T}} \mathbf{G} \\
&= -2\mathbf{G}^{\text{T}} \mathbf{d}^{\text{obs}} + 2\mathbf{G}^{\text{T}} \mathbf{G} \mathbf{m} = 0
\end{aligned} \tag{3.2}$$

Somit erhalten wir für den gesuchten Modellparametervektor:

$$\mathbf{m} = (\mathbf{G}^{\text{T}} \mathbf{G})^{-1} \mathbf{G}^{\text{T}} \mathbf{d}^{\text{obs}} \tag{3.3}$$

4. WESHALB LEAST-SQUARES?

Obwohl die Definition der zu minimierenden Objektfunktion $E(\mathbf{m})$ als Summe der quadrierten Diskrepanzen zwischen gemessenen und berechneten Daten intuitiv vernünftig und einleuchtend ist, muss man sich dennoch fragen, warum man gerade diesen Ansatz verwendet, und was dessen spezielle Vorzüge gegenüber anderen denkbaren Ansätzen sind. Um dies zu veranschaulichen, definieren wir eine Reihe von modifizierten Objektfunktionen, die auf verschiedenen Normen für die Länge des eigentlichen Fehlervektors \mathbf{e} basieren:

$$L_1\text{-Norm: } \|\mathbf{e}\|_1 = \left(\sum_i |e_i|\right) \quad (4.1)$$

$$L_2\text{-Norm: } \|\mathbf{e}\|_2 = \left(\sum_i |e_i|^2\right)^{1/2} \quad (4.2)$$

•

•

•

$$L_n\text{-Norm: } \|\mathbf{e}\|_n = \left(\sum_i |e_i|^n\right)^{1/n} \quad (4.3)$$

Um die Bedeutung der verschiedenen Längennormen von \mathbf{e} zu veranschaulichen, kehren wir zu unserem Temperaturtiefenprofil zurück, nehmen aber an, dass einer der Messwerte, einen groben Ausreisser darstellt. Offenbar nimmt der Einfluss des Ausreissers mit zunehmender Ordnung n der Norm L_n zu, und die entsprechenden Geraden entfernen sich mehr und mehr vom allgemeinen Trend der Messpunkte. Am besten schneidet in diesem Fall ganz klar die L_1 -Norm ab. Die L_2 -Norm, die eine modifizierte Version des oben hergeleiteten least-squares Ansatzes darstellt, reproduziert den Trend der Beobachtungsdaten bereits wesentlich schlechter.

Da Ausreisser in Messdaten durchaus nichts ungewöhnliches sind, stellt sich also die Frage, weshalb der auf der L_2 -Norm basierende least-squares Ansatz für die Lösung von Inversionsproblemen denn so populär ist, und weshalb man nicht die L_1 -Norm (oder eine noch kleinere Norm) verwendet? Auf diese Frage gibt es zwei Antworten, eine pragmatische und eine theoretische.

Die pragmatische Antwort lautet: der least-squares Ansatz führt zu einer einfachen und relativ leicht zu implementierenden Lösung des Inversionsproblems (Gleichungen 3.1 bis 3.3), das in den meisten Fällen gut funktioniert. Die theoretische Antwort ist - wie nicht anders zu erwarten - etwas komplizierter. Hierzu betrachten wir einmal unser Inversionsproblem aus einer ganz anderen Perspektive, indem wir unsere Messdaten nicht als deterministische, sondern als statistische oder stochastische Größen behandeln. Eine wichtige Charakteristik von stochastischen Daten ist deren sogenannte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (engl.: probability density function), im folgenden als pdf bezeichnet. Diese ist ein Mass für die Wahrscheinlichkeit des Auftretens eines bestimmten Wertes. Das Integral über die pdf ist daher immer gleich 1. Nehmen wir einmal unsere Messwerte hätten eine Normalverteilung (Gauss'sche Glockenkurve) :

$$\begin{aligned} pdf(\mathbf{d}^{obs}) &\propto \exp\left(-\frac{(\mathbf{d}^{obs} - \langle \mathbf{d} \rangle)^T (\mathbf{d}^{obs} - \langle \mathbf{d} \rangle)}{2\sigma^2}\right) \\ &= \exp\left(-\frac{(\mathbf{d}^{obs} - \mathbf{Gm})^T (\mathbf{d}^{obs} - \mathbf{Gm})}{2\sigma^2}\right) \end{aligned} \quad (4.4)$$

Hierbei ist σ^2 Varianz jedes Messpunktes d_i um seinen Mittel- oder Erwartungswert $\langle d_i \rangle$. Bezogen auf unser Inversionsproblem entsprechen die Erwartungswerte den berechneten Daten, und es ergibt sich also $\mathbf{d}^{obs} - \langle \mathbf{d} \rangle = \mathbf{e} = \mathbf{d}^{obs} - \mathbf{Gm}$. Aus stochastischer Sicht lässt sich daher das Inversionsproblem lösen, indem man versucht, die obigen pdf zu maximieren, d.h. man sucht nach einer möglichst kleinen Differenz zwischen den Messwerten d_i^{obs} und deren erwarteten respektive berechneten Werten

$\langle d_i \rangle$. Die obige *pdf* hat ein Maximum wenn der Exponent $(\mathbf{d}^{\text{obs}} - \mathbf{Gm})^T (\mathbf{d}^{\text{obs}} - \mathbf{Gm})$ möglichst klein ist. Mit anderen Worten: wir suchen $\min((\mathbf{d}^{\text{obs}} - \mathbf{Gm})^T (\mathbf{d}^{\text{obs}} - \mathbf{Gm}))$. Ein Vergleich mit den Gleichungen 3.1 und 3.2 ergibt, dass dies genau dem allgemeinen least-squares Inversionsansatz entspricht. *Somit haben wir formal bewiesen, dass der least-squares Ansatz ideal für die Inversion von Messdaten mit normalverteilten Fehlern ist.*

Ein Hauptgrund für die Robustheit des least-squares Ansatzes ist, dass tatsächlich in sehr vielen praktisch relevanten Situationen die Messfehler in etwa eine Normalverteilung aufweisen. Theoretisch lässt sich dies mit dem sogenannten zentralen Grenzwertsatz (engl.: central limit theorem) begründen. Dieser besagt, dass sich der totale Messfehler einer Normalverteilung annähert, sofern er aus der *Summe vieler unabhängiger Fehlerkomponenten* aufgebaut ist. Eine additive Kummulation der einzelnen Fehlerkomponenten ist in der Tat der wohl gängigste Mechanismus.

In ganz analoger Weise lässt sich zeigen, dass ein auf der L_1 -Norm basierender Inversionsansatz ideal für Messdaten wäre, deren Fehlerverteilung einer exponentiellen *pdf* entspricht:

$$pdf(\mathbf{d}^{\text{obs}}) \propto \exp\left(-\frac{|\mathbf{d}^{\text{obs}} - \langle \mathbf{d} \rangle|}{\sigma}\right) = \exp\left(-\frac{|\mathbf{d}^{\text{obs}} - \mathbf{Gm}|}{\sigma}\right) \quad (4.5)$$

Zur stochastischen Lösung des entsprechenden Inversionsproblem versucht man wiederum diese *pdf* zu maximieren, d.h. man sucht nach einer möglichst kleinen Differenz zwischen den Messwerten d_i^{obs} und deren erwarteten respektive berechneten Werten $\langle d_i \rangle$. Die obige *pdf* hat ein Maximum wenn der Exponent $|\mathbf{d}^{\text{obs}} - \mathbf{Gm}|$ möglichst klein ist. Mit anderen Worten: wir suchen $\min(|\mathbf{d}^{\text{obs}} - \mathbf{Gm}|)$.

Vergleichen wir normal und exponentiell verteilte Daten mit gleichem Erwartungswert $\langle \mathbf{d} \rangle$ und Varianz σ^2 , so stellen wir fest, dass der Hauptunterschied darin

liegt, dass die "Schwänze" der exponentiellen Verteilung deutlich länger sind als diejenigen der Normalverteilung (Abbildung 4.1). Mit anderen Worten exponentiell verteilte Daten haben wesentlich mehr Ausreisser als normalverteilte Daten. Wir haben wir also ganz nebenbei die oben anschaulich dargestellte Eignung der L_1 -Norm für die Inversion von Daten mit Ausreissern, d.h. mit langschwänziger Verteilung, formal bewiesen (Gleichung 4.5). Die Lösung des Inversionsproblem basierend auf der L_1 -Norm wird allerdings wenig praktiziert, da dieser Ansatz einerseits umständlich ist, und andererseits der least-squares Ansatz erfahrungsmässig auch für nicht perfekte Normalverteilungen recht robust ist.

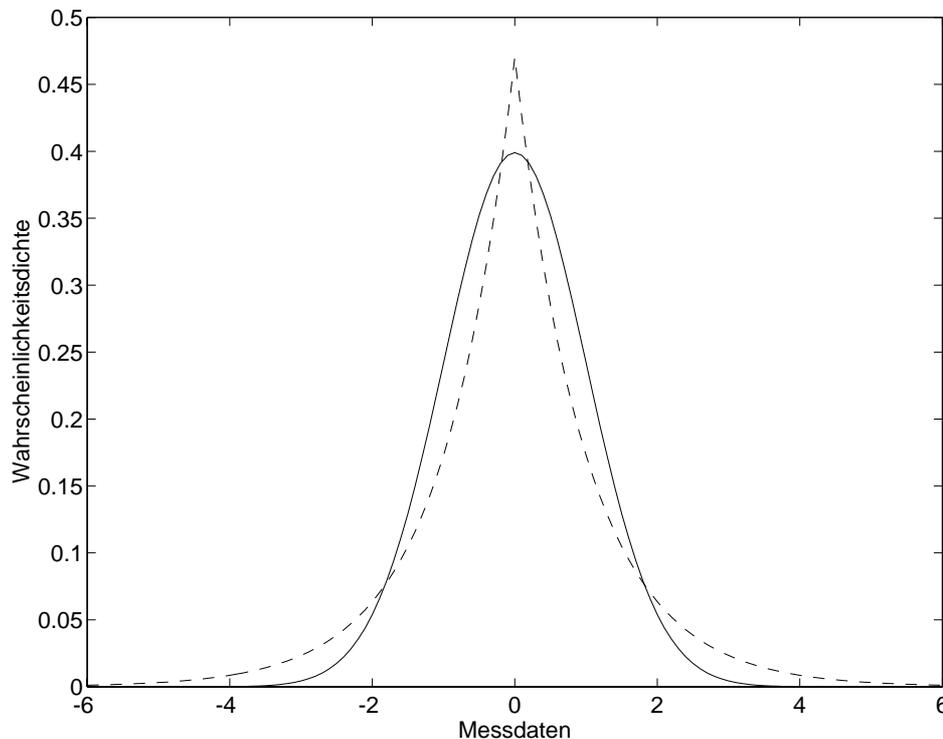


Abbildung 4.1. Vergleich von Gauss'scher (durchgezogen) und exponentieller (gestrichelt) Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion.

Auch langschwänzige Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (z.B. exponentiell, log-normal) treten in der Praxis recht häufig auf. In Analogie zum zentralen Grenzwertsatz für die Gauss'sche Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (Gleichung 4.4) lässt sich zeigen,

dass sich der totale Messfehler eine derartigen Verteilungen annähert, sofern er aus dem *Produkt vieler unabhängiger Fehlerkomponenten* aufgebaut ist. Diese Art der Fehlerkumulation ist besonders bei sehr komplexen Systemen von Bedeutung.

5. Stellung des Inversionsproblems

5.1. Unterbestimmte Probleme

Gehen wir zurück zum unserem einfach linearen Temperaturtiefenprofil und nehmen an, dass uns aus technischen oder finanziellen Gründen nur eine einzige Messung in einer bestimmten Tiefe zur Verfügung steht. Offensichtlich können wir so ohne zusätzliche Informationen nichts über den Temperaturverlauf mit der Tiefe aussagen. Dies findet seinen formalen mathematischen Ausdruck darin, dass die entsprechende least-squares Lösung singular wird (Gleichung 2.7) In solchen Fällen, d.h. man hat weniger Messwerte als unbekannte Modellparameter, spricht man von einem *unterbestimmten Problem*.

5.2. Exakt Bestimmte Probleme

Hier hat man genau so viel Information, wie man für die Lösung benötigt. Der Vorhersagefehler ist gleich null und die Designmatrix \mathbf{G} ist quadratisch (und somit invertierbar):

$$\mathbf{d}^{\text{obs}} = \mathbf{d}^{\text{syn}} = \mathbf{G}\mathbf{m} \quad (5.1)$$

Die Lösung des Problems reduziert sich also auf die formale Inversion der quadratischen Designmatrix \mathbf{G} :

$$\mathbf{m} = \mathbf{G}^{-1}\mathbf{d}^{\text{obs}} \quad (4.5)$$

Dies ist ein Spezialfall, der aus offensichtlichen Gründen für Messdaten kaum Bedeutung hat. Hätten wir nur zwei Temperaturmessung in zwei bestimmten Tiefen, so könnten wir das gestellte Problem zwar formal lösen (Gleichung 5.2), da eine Gerade durch zwei Punkte vollständig definiert ist. Wir hätten aber keine Ahnung über den Wert

dieser Lösung. Sofern einer oder beide Messpunkte grosse Fehler aufweisen, könnte unsere Schätzung des Temperaturverlaufs im Untergrund vollkommen falsch sein.

5.3. *berbestimmte Probleme*

Dies ist der Fall, wenn wir mehr Messwerte haben, als wir zur Lösung des Problems benötigen. Auf unser in Kapitel 2 behandeltes Temperturtiefenprofil bezogen bedeutet dies, dass wir es mit einem überbestimmten Problem zu tun haben, sofern wir über mehr als zwei unabhängige Messungen verfügen. In der Praxis sind leider überbestimmte Probleme selten und zudem meist auf einfache Situationen beschränkt. Für überbestimmte Probleme ist der Vorhersagefehler e ungleich null und die Designmatrix G nicht quadratisch. Somit ist die klassische least-squares Methode (Gleichungen 3.1, 3.2 und 3.3) ideal geeignet für die Lösung derartige Probleme.

5.4. *Gemischt Bestimmte Probleme*

In diesem Fall haben wir zwar mindestens gleich viele Messwerte wie unbekannte Parameter, dennoch sind auf Grund ungünstiger experimenteller Voraussetzungen Teile des Parameterraumes unterbestimmt. Um diese Situation zu veranschaulichen, betrachten wir das Beispiel der Röntgentomographie, eine wichtige Anwendung der Inversionstheorie in der Medizin. Hierbei wird der zu untersuchende Körperteil in N (meist quadratische) Teilvolumina unterteilt und anschliessend mit Röntgenstrahlen durchleuchtet. Ziel der Röntgentomographie ist es, Abweichungen vom Normalwert der Absorption der Röntgenstrahlen möglichst für alle Teilvolumina zu ermitteln, um so ein realistisches 3-dimensionales Abbild von allfälligen Gewebenanomalien zu erhalten. Gemessen wird daher immer so, dass der zu untersuchende Körperteil von viel mehr Strahlen durchdrungen wird als er Teilvolumina enthält. Werden auf Grund der geometrischen Anordnung von Röntgenstrahlquellen und -empfängern einzelne Teilvolumina von vielen anderen Teilvolumina aber nur von wenigen oder gar keinen Röntgenstrahlen durchdrungen, so lässt sich die Röntgenstrahlabsorption in den letzteren

Region nicht oder nur über mehrere Teilvolumina gemittelt bestimmen. Wir haben es hier also mit einem *gemischt bestimmten Problem* zu tun. Dies ist in der Praxis der weitaus häufigste Fall, und wir wollen im folgenden die Lösung derartiger Inversionsprobleme daher etwas genauer betrachten.

6. DÄMPFUNG DER LEAST-SQUARES LÖSUNG

Bei gemischt bestimmten Problemen können die unterbestimmten Teile des Problems zu Artefakten in der Lösung führen, die sich über den gesamten Modellarameterraum "verschmieren". Wir müssen daher zusätzliche Kriterien respektive *a priori* Informationen bezüglich der Lösung einführen, um diese Effekte zu "dämpfen". Dazu nimmt man gemeinhin an, dass nicht nur die Residuen zwischen beobachteten und berechneten Daten minimal sein sollen, sondern auch die Variabilität der invertierten Modellparameter \mathbf{m} , und somit "die Länge der Lösung"

$$L(\mathbf{m}) = \mathbf{m}^T \mathbf{m} \quad (6.1)$$

nicht zu gross sein soll. Anstelle von $E(\mathbf{m}) = \mathbf{e}^T \mathbf{e}$ minimieren wir daher die modifizierte Objektfunktion:

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{m}) &= E(\mathbf{m}) + \varepsilon^2 L(\mathbf{m}) \\ &= \mathbf{e}^T \mathbf{e} + \varepsilon^2 \mathbf{m}^T \mathbf{m} \\ &= (\mathbf{d}^{\text{obs}} - \mathbf{G}\mathbf{m})^T (\mathbf{d}^{\text{obs}} - \mathbf{G}\mathbf{m}) + \varepsilon^2 \mathbf{m}^T \mathbf{m} \end{aligned} \quad (6.2)$$

Dies ergibt:

$$\frac{\partial \Phi(\mathbf{m})}{\partial \mathbf{m}} = 2\mathbf{G}^T \mathbf{G}\mathbf{m} - 2\mathbf{G}^T \mathbf{d}^{\text{obs}} + 2\varepsilon^2 \mathbf{m} = 0 \quad (6.3)$$

$$(\mathbf{G}^T \mathbf{G}\mathbf{m} + \varepsilon^2 \mathbf{m}) = (\mathbf{G}^T \mathbf{G} + \varepsilon^2 \mathbf{I})\mathbf{m} = \mathbf{G}^T \mathbf{d}^{\text{obs}} \quad (6.4)$$

$$\mathbf{m} = (\mathbf{G}^T \mathbf{G} + \varepsilon^2 \mathbf{I})^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{d}^{\text{obs}} \quad (6.5)$$

Die so erhaltene Lösung (Gleichung 6.5) bezeichnet man als *gedämpfte least-squares Lösung*. Gedämpft daher, weil unterbestimmte Teile des Problems nicht zu Instabilitäten

oder "Überschwingungen" in der Schätzung der Modellparameter führen sollen, da die interne Variabilität der Modellparameter durch den Lösungsansatz selber beschränkt ist (Gleichungen 6.1 und 6.2). Der Parameter ε wird als Dämpfungsparameter bezeichnet. Offensichtlich nimmt die Dämpfung der Lösung mit ε zu. Für $\varepsilon = 0$ entspricht die Lösung der gewöhnlichen ungedämpften least-squares Lösung, wie sie für das überbestimmte Problem gedacht ist (Gleichung 3.3). Die Wahl des Dämpfungsparameters ε muss im wesentlichen empirisch erfolgen. Als Faustregel lässt sich nur festhalten, dass ε umso grösser gewählt werden muss, je grösser der Anteil des unterbestimmten Teils am total zu invertierenden Modellparameterraum \mathbf{m} ist.

7. EINBEZUG VON A PRIORI INFORMATION

7.1. Erwartungswerte für Modellparameter

Im vorhergehenden Kapitel haben wir für die Lösung des gemischt bestimmten Problems bereits *a priori* Information benutzt, indem wir die totale Variabilität der Modellparameter eingeschränkt haben. Dieses Kriterium ist aber nur dann vernünftig, wenn sich die Mittel- oder Erwartungswerte $\langle \mathbf{m} \rangle$ der einzelnen Modellparameter \mathbf{m} nicht allzu sehr unterscheiden. Kennen wir die ungefähren Erwartungswerte der gesuchten Modellparameter, so können wir die obige auf der Kombination von Fehlervektorlänge $E(\mathbf{m})$ und Parametervektorlänge $L(\mathbf{m})$ basierende Objektfunktion (Gleichung 6.2) wie folgt modifizieren:

$$\Phi(\mathbf{m}) = E(\mathbf{m}) + \varepsilon^2 L(\mathbf{m}) = \mathbf{e}^T \mathbf{e} + \varepsilon^2 (\mathbf{m} - \langle \mathbf{m} \rangle)^T (\mathbf{m} - \langle \mathbf{m} \rangle) \quad (7.1)$$

Somit:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi(\mathbf{m})}{\partial \mathbf{m}} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{m}} (\mathbf{d}^{\text{obs}} - \mathbf{G}\mathbf{m})^T (\mathbf{d}^{\text{obs}} - \mathbf{G}\mathbf{m}) + \varepsilon^2 (\mathbf{m} - \langle \mathbf{m} \rangle)^T (\mathbf{m} - \langle \mathbf{m} \rangle) \\ &= 2\mathbf{G}^T \mathbf{G}\mathbf{m} - 2\mathbf{G}^T \mathbf{d}^{\text{obs}} + 2\varepsilon^2 \mathbf{m} - 2\varepsilon^2 \langle \mathbf{m} \rangle = 0 \end{aligned} \quad (7.2)$$

$$(\mathbf{G}^T \mathbf{G} + \varepsilon^2 \mathbf{I})\mathbf{m} = \mathbf{G}^T \mathbf{d}^{\text{obs}} + \varepsilon^2 \langle \mathbf{m} \rangle \quad (7.3)$$

Auflösen nach dem Modellparametervektor \mathbf{m} ergibt für die Lösung des modifizierten gemischten least-squares Inversionsproblems:

$$\begin{aligned} \mathbf{m} &= (\mathbf{G}^T \mathbf{G} + \varepsilon^2 \mathbf{I})^{-1} (\mathbf{G}^T \mathbf{d}^{\text{obs}} + \varepsilon^2 \langle \mathbf{m} \rangle) \\ &= (\mathbf{G}^T \mathbf{G} + \varepsilon^2 \mathbf{I})^{-1} (\mathbf{G}^T \mathbf{d}^{\text{obs}} + \mathbf{G}^T \mathbf{G} \langle \mathbf{m} \rangle - \mathbf{G}^T \mathbf{G} \langle \mathbf{m} \rangle + \varepsilon^2 \langle \mathbf{m} \rangle) \\ &= \langle \mathbf{m} \rangle + (\mathbf{G}^T \mathbf{G} + \varepsilon^2 \mathbf{I})^{-1} \mathbf{G}^T (\mathbf{d}^{\text{obs}} - \mathbf{G} \langle \mathbf{m} \rangle) \end{aligned} \quad (7.4)$$

7.2. Selektive Gewichtung von Modellparametern und Daten

Zusätzlich kann man nun die obige Methode des Einbezugs von *a priori* Information in die gedämpfte least-squares Lösung verfeinern, indem man die gut aufgelösten Parameter stärker gewichtet als die schlecht aufgelösten. Dies führt zu folgender Modifikation des Lösungslängenkriteriums (Gleichungen 6.1, 6.2 und 7.1):

$$L(\mathbf{m}) = (\mathbf{m} - \langle \mathbf{m} \rangle)^T \mathbf{W}_m (\mathbf{m} - \langle \mathbf{m} \rangle) \quad (7.5)$$

Oft kommt es auch vor, dass nicht alle Messdaten gleich verlässlich sind. In diesem Falle liegt es also nahe, die guten Messwerte stärker zu gewichten als die zweifelhafteren. Dazu definieren wir unsere Fehlerfunktion wie folgt:

$$E(\mathbf{m}) = \mathbf{e}^T \mathbf{W}_e \mathbf{e} = (\mathbf{d}^{\text{obs}} - \mathbf{G}\mathbf{m})^T \mathbf{W}_e (\mathbf{d}^{\text{obs}} - \mathbf{G}\mathbf{m}) \quad (7.6)$$

Hierbei sind \mathbf{W}_m und \mathbf{W}_e Diagonalmatrizen. Zum Beispiel bedeutet $\text{diag}\mathbf{W}_e = (1, 0, 2, 1, 1)^T$, dass der zweite Datenpunkt ignoriert wird, der dritte Datenpunkt doppeltes Gewicht erhält, die übrigen Datenpunkte aber normal gewichtet werden. Die Gewichtung von Daten kann also auch dazu verwendet werden, um die Lösung des Inversionsproblem möglichst genau an gewisse Messwerte anzunähern, oder aber um gewisse Messwerte nahezu oder ganz vom Inversionsverfahren auszuschliessen. Ein derartiges Vorgehen ist durchaus vernünftig und legitim, sofern sich die unterschiedlichen Gewichtungen von Messpunkten und/oder Modellparametern stichhaltig begründen lassen.

Gewichten wir sowohl die Modellparameter als auch die Daten (Gleichungen 7.5 und 7.6), so verallgemeinert sich die Objektfunktion des gedämpften least-squares Problems zu:

$$\begin{aligned}
\Phi(\mathbf{m}) &= E(\mathbf{m}) + \varepsilon^2 L(\mathbf{m}) \\
&= \mathbf{e}^T \mathbf{W}_e \mathbf{e} + \varepsilon^2 (\mathbf{m} - \langle \mathbf{m} \rangle)^T \mathbf{W}_m (\mathbf{m} - \langle \mathbf{m} \rangle) \\
&= (\mathbf{d}^{\text{obs}} - \mathbf{G}\mathbf{m})^T \mathbf{W}_e (\mathbf{d}^{\text{obs}} - \mathbf{G}\mathbf{m}) + \varepsilon^2 (\mathbf{m} - \langle \mathbf{m} \rangle)^T \mathbf{W}_m (\mathbf{m} - \langle \mathbf{m} \rangle)
\end{aligned} \tag{7.7}$$

Die Minimierung dieser Objektfunktion führt gemäss dem in den Gleichungen 7.2 bis 7.4 vorgeführten Muster zur Lösung:

$$\mathbf{m} = \langle \mathbf{m} \rangle + (\mathbf{G}^T \mathbf{W}_e \mathbf{G} + \varepsilon^2 \mathbf{W}_m)^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{W}_e (\mathbf{d}^{\text{obs}} - \mathbf{G}\langle \mathbf{m} \rangle) \tag{7.8}$$

8. BEURTEILUNG DER LÖSUNG

8.1. Grösse der Residuen

Ein offensichtliches Kriterium zur Beurteilung der Güte der Lösung, sind die Diskrepanzen oder Residuen \mathbf{e} zwischen beobachteten und berechneten Daten. Die Grösse der Residuen hängt einerseits von den in den Beobachtungsdaten vorhandenen Messfehlern ab und andererseits davon, wie realistisch unser Modell die unseren Beobachtungen zu Grunde liegenden Prozesse beschreibt. Sofern wir die Standardabweichung σ unserer Messfehler kennen, kann uns die Grösse der Residuen also gewisse Hinweise darüber geben, wie realistisch unser Modell tatsächlich ist.

Die Grösse der Residuen zwischen beobachteten und berechneten Daten lässt sich mit Hilfe des sogenannten “*root-mean-square*“- oder “*rms*“-Fehler quantifizieren:

$$rms(e_i) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (d_i^{obs} - d_i^{syn})^2}{n\sigma^2}} \quad (8.1)$$

Eine auf Grund dieses Kriteriums unakzeptable Lösung liegt also vor, wenn $rms(\mathbf{e}) \gg 1$ und somit die Standardabweichung der Residuen wesentlich grösser als diejenige der Messfehler ist. Andererseits sind auch Lösungen mit $rms(\mathbf{e}) \ll 1$ unsinnig, da wir in diesem Fall die Daten über ihre Messgenauigkeit hinaus interpretiert haben.

Wir müssen uns vergegenwärtigen, dass eine vernünftige Grösse der Residuen allein noch kein Garant dafür ist, dass wir unsere Messdaten realistisch modelliert haben. Gerade bei komplexeren Modellen mit vielen freien Parametern, kann es leicht zu einer guten, aber dennoch zufälligen Übereinstimmung zwischen berechneten und beobachteten Daten kommen.

8.2. Unsicherheiten der Geschätzten Parameter

Hat die obige Analyse, eine befriedigende Übereinstimmung zwischen beobachteten und berechneten Daten ergeben, so möchten wir nun die Unsicherheiten der invertierten Modellparameter bestimmen. Wir suchen also die Varianz respektive die Standardabweichung $\sigma(\mathbf{m}) = \sigma_{\mathbf{m}}$ unseres Modellparametervektors \mathbf{m} .

Wie wir bereits in Kapitel 2 im speziellen Fall der Inversion für eine Gerade gesehen haben, breiten sich die in den Beobachtungsdaten vorhandenen Messfehler in die Schätzung der Modellparameter aus. Im allgemeinen Fall, kann die Fehlerausbreitung mit Hilfe der sogenannten Modellkovarianzmatrix $\text{cov}(\mathbf{m})$ quantifiziert werden. Die Diagonale dieser Matrix enthält die Varianzen des Modellparametervektors \mathbf{m} . Voraussetzung für die Berechnung der Modellkovarianzmatrix ist die Kenntnis der Varianz des Messfehlers in den Beobachtungsdaten σ^2 sowie die Annahme, dass - statistisch betrachtet - der Messfehler für alle Daten derselbe ist. Erinnern wir uns anhand des Beispiels einer Funktion von zwei Variablen $z = f(x, y)$ an das Prinzip der Fehlerausbreitung:

$$\sigma_z^2 = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2 \sigma_x^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2 \sigma_y^2 + 2 \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial y} \sigma_{xy} \quad (8.2)$$

Hierbei ist:

$$\sigma_{xy} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \langle x \rangle)(y_i - \langle y \rangle) \quad (8.3)$$

die sogenannte Kovarianz von x und y . Falls die Fehler in den beiden Variablen unabhängig sind, so ist die Kovarianz offensichtlich gleich null. Angewandt auf das klassische least-squares Problem erhalten wird somit:

$$\mathbf{m} = (\mathbf{G}^T \mathbf{G})^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{d} = \mathbf{A} \mathbf{d} \quad (8.4)$$

$$\begin{aligned}
\text{cov}(\mathbf{m}) &= \mathbf{A} \text{cov}(\mathbf{d}) \mathbf{A}^T \\
&= ((\mathbf{G}^T \mathbf{G})^{-1} \mathbf{G}^T) \sigma^2 \mathbf{I} ((\mathbf{G}^T \mathbf{G})^{-1} \mathbf{G}^T)^T \\
&= \sigma^2 (\mathbf{G}^T \mathbf{G})^{-1}
\end{aligned} \tag{8.5}$$

Daraus geht hervor, dass die Unsicherheit der geschätzten Modellparameter \mathbf{m} einerseits natürlich vom Messfehler abhängt, andererseits aber auch ganz wesentlich durch die Designmatrix \mathbf{G} , mit Hilfe derer die Beobachtungsdaten modelliert werden, beeinflusst wird.

Hat die resultierende Objektfunktion $E(\mathbf{m})$ ein schmales gut definiertes Minimum, so führen kleine Messfehler auch nur zu kleinen Fehlern in den geschätzten Modellparametern. Ist das Minimum $E(\mathbf{m})$ dagegen breit, so führen bereits recht kleine Messfehler zu grossen Unsicherheiten in den geschätzten Parametern. Dies lässt wie folgt quantifizieren:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial \mathbf{m}^2} = \mathbf{G}^T \mathbf{G} \tag{8.6}$$

$$\text{cov}(\mathbf{m}) = \sigma^2 (\mathbf{G}^T \mathbf{G})^{-1} = \sigma^2 \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial \mathbf{m}^2} \right)^{-1} \tag{8.7}$$

8.3. Datenresolutionsmatrix

Die Datenresolutionsmatrix \mathbf{N} ist ein allgemeines Mass dafür, wie gut die berechneten mit den beobachteten Daten übereinstimmen:

$$\mathbf{d}^{\text{syn}} = \mathbf{N} \mathbf{d}^{\text{obs}} \tag{8.8}$$

Die tatsächliche Berechnung von \mathbf{N} soll uns hier nicht weiter beschäftigen. Ist die Datenresolutionsmatrix eine Einheitsmatrix, also $\mathbf{N}=\mathbf{I}$, so gilt offenbar $\mathbf{d}^{\text{syn}} = \mathbf{d}^{\text{obs}}$ und

$\mathbf{e}=0$, und wir haben es mit dem seltenen Idealfall eines exakt bestimmten Problems zu tun. Im Normalfall $\mathbf{N} \neq \mathbf{I}$ ist der Vorhersagefehler \mathbf{e} nicht gleich null und \mathbf{N} ist nicht eine Diagonalmatrix, und somit hängt die Vorhersage jedes Beobachtungswertes auch von dessen Nachbarn ab. Je schärfter die Werteverteilung um die Diagonale von \mathbf{N} ist, um so unabhängiger lassen sich unsere Beobachtungswerte voneinander vorhersagen, und umso besser ist die Auflösung unseres Modells in Bezug auf die modellierten Daten. Die Struktur von \mathbf{N} gibt uns somit Hinweise darauf, wie die berechneten von den beobachteten Daten abhängen, respektive wie unabhängig sich benachbarten Beobachtungswerte modellieren lassen.

8.4. Modellresolutionsmatrix

Schliesslich müssen wir uns fragen, wie unabhängig die einzelnen Modellparameter, nach denen wir invertiert haben, von einander sind. Darüber gibt - in ähnlicher Weise wie die oben behandelte Datenresolutionsmatrix \mathbf{N} - die Modellresolutionsmatrix \mathbf{R} Auskunft:

$$\mathbf{m}^{\text{est}} = \mathbf{R}\mathbf{m}^{\text{true}} \quad (8.9)$$

Auch hier sollen uns die Details der Berechnung von \mathbf{R} nicht weiter kümmern. Hierbei entspricht \mathbf{m}^{true} der tatsächlichen Lösung unseres Inversionsproblems, und \mathbf{m}^{est} unserer angenäherten Lösung.

Im Idealfall ist wiederum $\mathbf{R}=\mathbf{I}$, d.h. jeder Parameter ist eindeutig und unabhängig von seinen Nachbarn bestimmt. Je stärker \mathbf{R} von einer Diagonalmatrix abweicht, umso schlechter ist die Auflösung der wahren Parameter, d.h. jeder angenähert berechnete Modellparameter ist ein gewichtetes Mittel mehrerer benachbarter wahrer Parameter.

9. LEAST-SQUARES INVERSION VON NICHTLINEAREN PROBLEMEN

9.1. Grundätzliches

Nehmen wir einmal an, wir möchten die Temperatur im Umfeld einer magmatischen Intrusion studieren. Abbildung 9.1 stelle ein auf Grund von kontaktmetamorphen Mineralparagenesen bestimmtes hypothetisches Profil der maximal erreichten Temperatur als Funktion der Distanz zum Rand der Intrusion dar. Wir sehen, dass diese Kurve stark nichtlinear ist, und vermutlich exponentiell oder hyperbolisch mit der Distanz abfällt. Tatsächlich haben elementare Lösungen der Wärmeleitungsgleichung für derartige Probleme in etwa die Form:

$$T_{\max}(x) \sim m_1 \exp(-m_2 x) . \quad (9.1)$$

Die beiden Konstanten m_1 und m_2 hängen von der Temperatur des Magmas, der Grösse der Intrusion, dem latenten Wärmegehalt, und der Wärmeleitfähigkeit des Umgebungsgesteins ab.

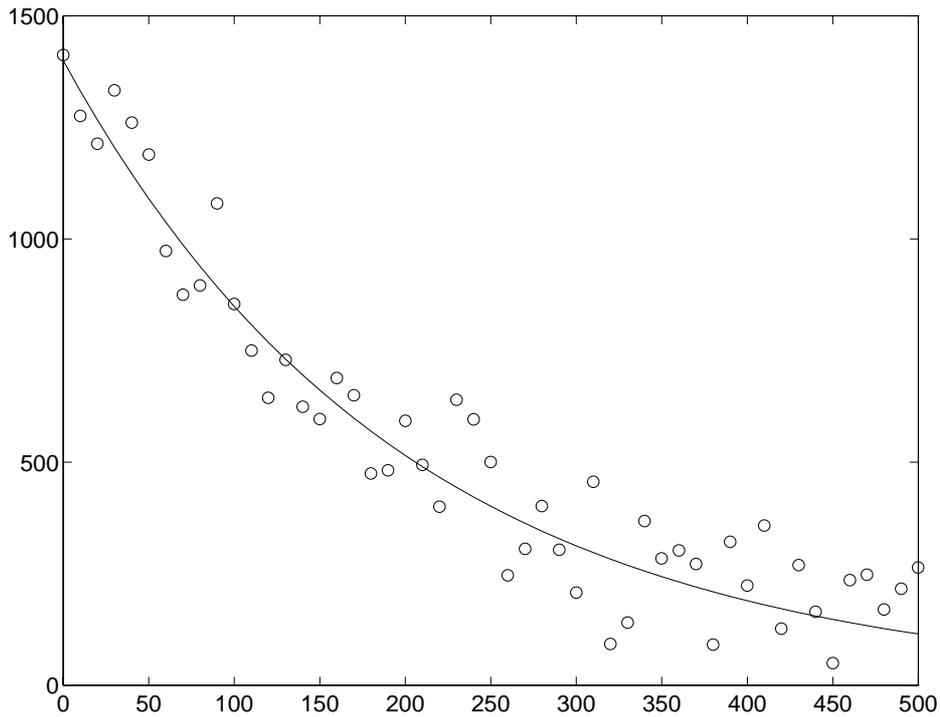


Abbildung 9.1. Maximal erreichte Temperatur im Umfeld einer magmatischen Intrusion. Offene Punkte: Beobachtungswerte; durchgezogene Linie: gemäss Gleichung 9.1 bestangepasste Kurve (vorweggenommene Lösung des nichtlinearen Inversionsproblem).

Wir wollen nun das in Abbildung 9.1 dargestellte Temperaturprofil nach diesen beiden Konstanten invertieren. Wir stellen fest, dass hier das Vorwärtsproblem nicht mehr linear ist, und daher in der allgemeinen Form $\mathbf{d}^{\text{syn}} = g(\mathbf{m})$ (anstelle der Matrixform $\mathbf{d}^{\text{syn}} = \mathbf{G}\mathbf{m}$ für den linearen Fall) geschrieben werden muss. In Abbildung 9.1 haben wir das Endresultat der nichtlinearen Inversion $\mathbf{m} = g^{-1}(\mathbf{d}^{\text{obs}})$ bereits vorweggenommen und die durch die beiden Konstanten $m_1 = 1400$, $m_2 = 0.005$ definierte bestangepasste Kurve (Gleichung 9.1) zusammen mit den Beobachtungsdaten dargestellt.

Mittels Logarithmieren kann dieses an sich nichtlineare Problem in ein lineares übergeführt werden:

$$\log(T_{\max}) \sim \log(m_1) - m_2 x \quad (9.2)$$

Dies scheint ein attraktiver Weg zu sein, da sich ja viele Modelle in den Ingenieur- und Naturwissenschaften auf Exponential-, Logarithmen-, oder Potenzfunktionen zurückführen und somit in ähnlicher Weise linearisieren lassen.

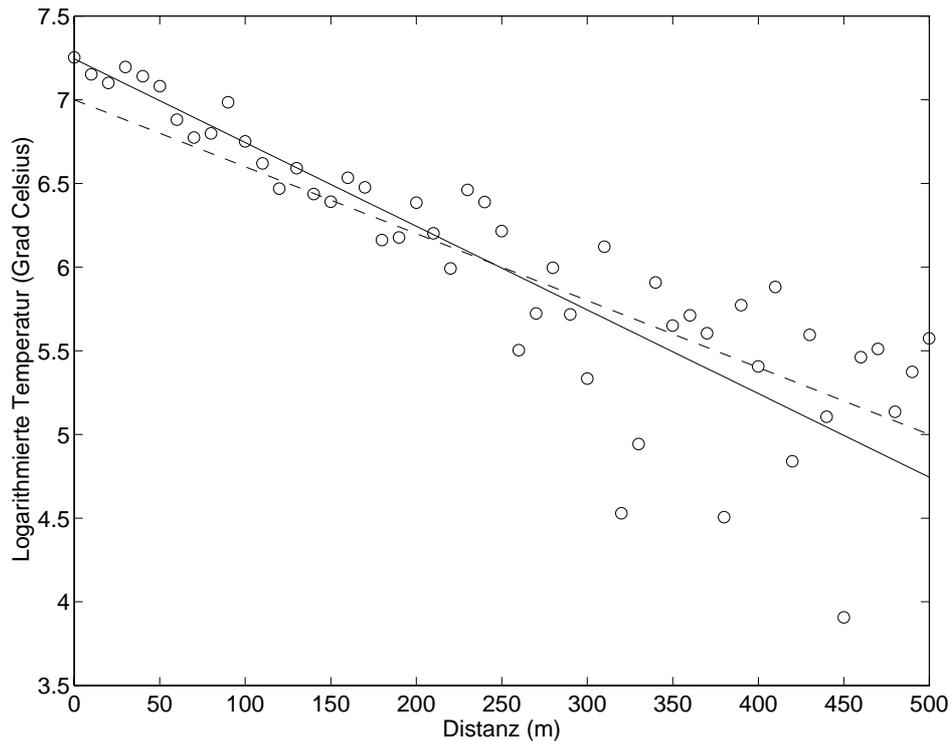


Abbildung 9.2. Offene Punkte: Logarithmierte Temperaturwerte im Umfeld einer Intrusion (Abbildung 9.1); durchgezogen: logarithmierte Lösung des entsprechenden nichtlinearen Inversionsproblem; gestrichelt: bestangepasste least-squares Gerade nach Logarithmierung.

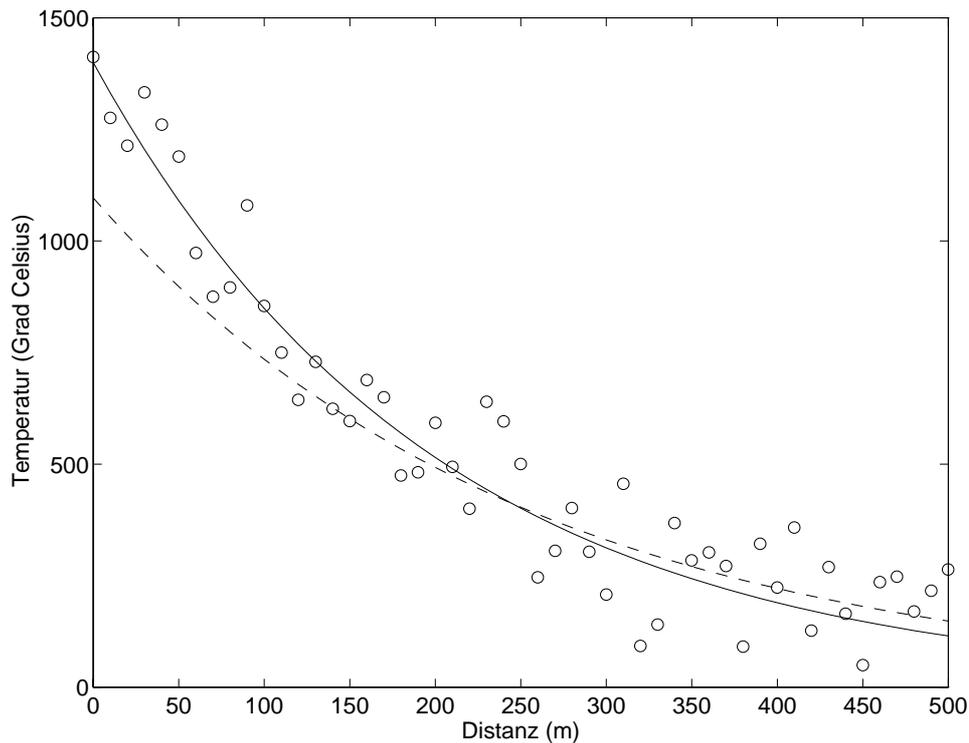


Abbildung 9.3. Abbildung 9.2 mit linearer Temperaturskala.

In den Abbildungen 9.2 und 9.3 sehen wir das Resultat der Inversion des mittels Logarithmierung linearisierten Problems. Für die beiden Konstanten erhalten wir so: $m'_1 = 1100, m'_2 = 0.0042$. Ebenfalls dargestellt ist die bestangepasste Kurve aus Abbildung 9.1 mit den Konstanten $m_1 = 1400, m_2 = 0.005$ (siehe oben). Wir sehen, dass in Abbildung 9.2 die Streuung der Messwerte nicht gleichmässig ist, sondern mit x zunimmt. Zudem sind, im Gegensatz zur vorweggenommenen nichtlinearen Lösung (Abbildungen 9.1, 9.2 und 9.3), die Residuen ganz klar nicht normalverteilt (Abbildung 9.4). Dies verletzt die der least-squares Methode zu Grunde liegenden Annahmen, dass die Messfehler (i) normalverteilt sind und (ii) alle Messfehler dieselbe Varianz haben.

Obwohl die least-squares Methode grundsätzlich recht robust ist, ist dies offenbar keine ideale Situation. Da zufällige Messfehlerverteilungen nach Linearisierungen mittels Logarithmierung oder Koordinatentransformation in aller Regel weder normalverteilt sind, noch konstante Varianzen aufweisen, ist somit aus rein methodischer Sicht der

zweite Ansatz, d.h. die Inversion des ursprünglichen nichtlinearen Problems, grundsätzlich vorzuziehen. Zudem lassen sich längst nicht alle nichtlinearen Probleme durch einfache Tricks wie Logarithmieren oder Parametertransformation linearisieren. Im folgenden wollen wir uns daher um eine grundlegende Lösung des nichtlinearen Inversionsproblem $\mathbf{m} = g^{-1}(\mathbf{d}^{\text{obs}})$ bemühen.

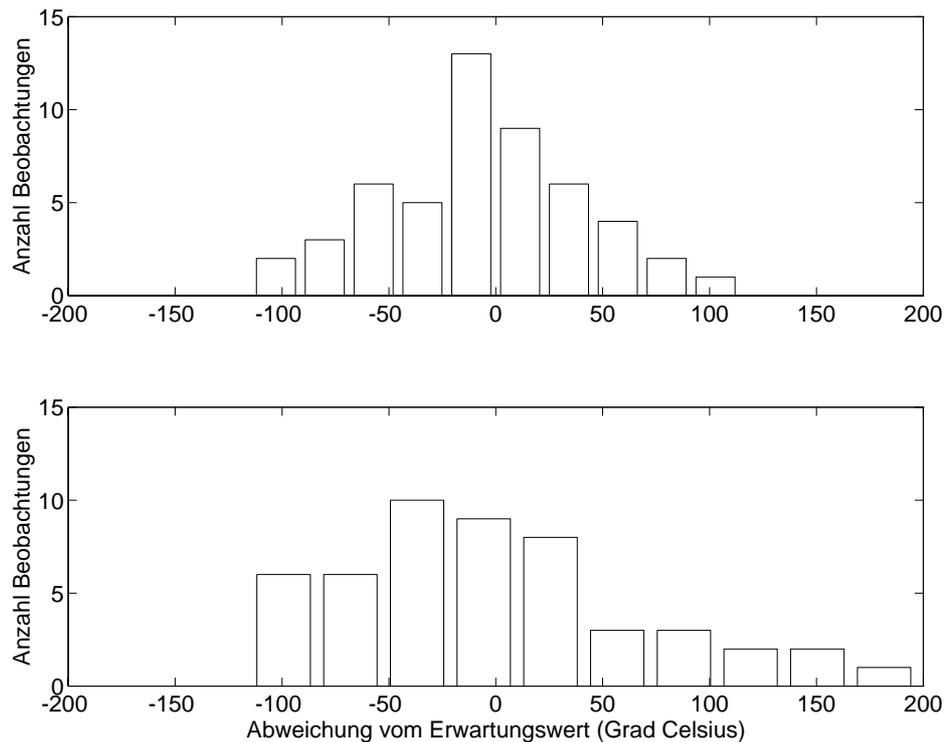


Abbildung 9.4. Verteilung der Residuen des nichtlinearen (oben) und des mittels Logarithmierung linearisierten Inversionsproblems (siehe auch Abbildungen 9.1, 9.2 und 9.3).

9.2. Least-Squares Lösung von Nichtlinearen Inversionsproblemen

Aus der Analysis wissen wir, dass wir eine nichtlineare Funktion $y = f(x)$ lokal “zwangslinearisieren” können, indem wir sie durch ihre Tangente approximieren. Hierzu entwickeln wir die Funktion um einen bestimmten Wert x_0 herum in eine Taylorreihe und brechen nach dem ersten Glied ab:

$$f(x) \approx f(x_0) + \frac{df(x_0)}{dx}(x - x_0) = f(x_0) + \frac{df(x_0)}{dx} \Delta x \quad (9.3)$$

Bezogen auf unsere allgemeine nichtlineare Modellfunktion $\mathbf{d}^{\text{syn}} = g(\mathbf{m})$ ergibt dies:

$$\mathbf{g}(\mathbf{m}) \approx \mathbf{g}(\mathbf{m}_0) + \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{m}_0)}{\partial \mathbf{m}}(\mathbf{m} - \mathbf{m}_0) = \mathbf{g}(\mathbf{m}_0) + \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{m}_0)}{\partial \mathbf{m}} \Delta \mathbf{m} \quad (9.4)$$

Und somit erhalten wir für das linearisierte Vorwärtsproblem:

$$\mathbf{g}(\mathbf{m}) - \mathbf{g}(\mathbf{m}_0) = \mathbf{d}^{\text{syn}} - \mathbf{d}_0^{\text{syn}} = \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{m}_0)}{\partial \mathbf{m}} \Delta \mathbf{m} \quad (9.5)$$

$$\Delta \mathbf{d}^{\text{syn}} = \mathbf{G} \Delta \mathbf{m} \quad (9.6)$$

Im Gegensatz zum linearen Problem enthält die Designmatrix \mathbf{G} nun nicht mehr den linearen Operator auf den Modellparametervektor \mathbf{m} , sondern die Ableitungen des entsprechenden nichtlinearen Operators g nach \mathbf{m} um dem Referenzwert \mathbf{m}_0 . Für das so linearisierte Inversionsproblem erhalten wir somit:

$$\Delta \mathbf{m} = \mathbf{G}^{-1} \Delta \mathbf{d}^{\text{obs}} \quad (9.7)$$

Die Gleichungen 9.6 und 9.7 für das linearisierte Vorwärts- respektive Inversionsproblems sind in ihrer allgemeine Form sehr ähnlich zu denjenigen des entsprechenden linearen Problems. Allerdings ist unsere unbekannte Grösse nun nicht mehr der Modellparametervektor \mathbf{m} sondern dessen Abweichung $\Delta \mathbf{m}$ in Bezug auf einen Referenzwert \mathbf{m}_0 . Ausgehend von einem geschätzten Referenzwert \mathbf{m}_0 gelangen wir somit durch wiederholte Berechnung dieser Modellparameterinkremente $\Delta \mathbf{m}$

(Gleichung 9.7) zu stetig verbesserten, approximativen Lösungen des nichtlinearen Inversionsproblems (Lösung mittels Iteration):

$$\begin{aligned}\Delta \mathbf{m}_{n+1} &= \mathbf{G}_n^{-1} \Delta \mathbf{d}^{\text{obs}} = \mathbf{G}_n^{-1} (\mathbf{d}^{\text{obs}} - g(\mathbf{m}_n)) \\ \mathbf{m}_{n+1} &= \mathbf{m}_n + \Delta \mathbf{m}_{n+1}\end{aligned}\tag{9.8}$$

Der inverse Operator \mathbf{G}^{-1} wird hierbei mittels der least-squares Methode (Gleichung 3.1, 3.2 und 3.3), die wir für lineare Probleme kennengelernt haben, berechnet:

$$\begin{aligned}\mathbf{d}^{\text{obs}} - g(\mathbf{m}) &\approx \mathbf{d}^{\text{obs}} - g(\mathbf{m}_n) - \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{m}} \Delta \mathbf{m} \\ &= \Delta \mathbf{d} - \mathbf{G} \Delta \mathbf{m}\end{aligned}\tag{9.9}$$

$$\begin{aligned}E(\mathbf{m}) &= (\mathbf{d}^{\text{obs}} - g(\mathbf{m}))^T (\mathbf{d}^{\text{obs}} - g(\mathbf{m})) \\ &\approx (\Delta \mathbf{d} - \mathbf{G} \Delta \mathbf{m})^T (\Delta \mathbf{d} - \mathbf{G} \Delta \mathbf{m})\end{aligned}\tag{9.10}$$

$$\frac{\partial E}{\partial \mathbf{m}} \approx 2 \mathbf{G}^T \mathbf{G} \Delta \mathbf{m} - 2 \mathbf{G}^T \Delta \mathbf{d} = 0\tag{9.11}$$

$$\begin{aligned}\Delta \mathbf{m} &= (\mathbf{G}^T \mathbf{G})^{-1} \mathbf{G}^T \Delta \mathbf{d} \\ \mathbf{m}_{n+1} - \mathbf{m}_n &= (\mathbf{G}^T \mathbf{G})^{-1} \mathbf{G}^T (\mathbf{d}^{\text{obs}} - g(\mathbf{m}_n)) \\ \mathbf{m}_{n+1} &= \mathbf{m}_n + (\mathbf{G}^T \mathbf{G})^{-1} \mathbf{G}^T (\mathbf{d}^{\text{obs}} - g(\mathbf{m}_n))\end{aligned}\tag{9.12}$$

In analoger Weise ergeben sich die entsprechenden Gleichungen für die verschiedenen gedämpften least-squares Lösungen des linearisierten Problems mit *a priori* Information (siehe Kapitel 6 und 7).

9.3. Konvergenz und Eindeutigkeit der Lösung

Wir haben gesehen, dass die Objektfunktion $E(\mathbf{m})$ für das lineare least-squares Inversionsproblem mit normalverteilten Messfehlern immer einem Paraboloid ist und somit ein wohldefiniertes Minimum hat. Für derartige inverse Probleme gibt es eine eindeutige Lösung im Sinne des least-squares Ansatzes, immer vorausgesetzt natürlich, der zu invertierende Modellparameterraum ist durch die verfügbaren Messdaten ausreichend aufgelöst (siehe Kapitel 5). Für das hier betrachtete nichtlineare Inversionsproblem, das mittels lokaler "Zwanglinearisierung" iterativ gelöst wird, ist dies nicht mehr der Fall. Betrachten wir hierzu die Funktion $d_i = m_1^2 + m_1 m_2 z_i$. Ist \mathbf{m}_{n+1} die nach dem oben beschriebenen Verfahren (Gleichungen 9.8 und 9.12) geschätzte Lösung, die den Vorhersagefehler minimiert, so ist auch $-\mathbf{m}_{n+1}$ eine Lösung mit demselben Vorhersagefehler. Die Objektfunktion ist hier also kein Paraboloid mehr sondern enthält zwei gleichwertige Minima.

Im allgemeinen nichtlinearen Fall enthält die Objektfunktion also neben dem (hoffentlich eindeutigen) Hauptminimum, das der gesuchten Lösung unseres Problems entspricht, immer auch Nebenminima. Die oben beschriebene iterative Lösung des linearisierten Problems wird somit nicht notwendigerweise das Hauptminimum von $E(\mathbf{m})$ finden, sondern vielmehr, den am nächsten beim Startpunkt \mathbf{m}_0 gelegenen Ort, wo die Steigung von $E(\mathbf{m})$ gleich null ist. Dabei kann es sich entweder um das Hauptminimum von $E(\mathbf{m})$ oder aber um eines der Nebenminima handeln. Dieses Problem entsteht dadurch, dass das linearisierte Inversionsverfahren (Gleichung 9.12) immer nur einen Teil der Objektfunktion in der Umgebung des gegenwärtigen Referenzwertes \mathbf{m}_n "sieht". Den Rest der Objektfunktion wird dann als ein an diesen Punkt von $E(\mathbf{m})$ tangentiales Paraboloid approximiert. Die mittels Iteration erhaltene neue Parameterschätzung \mathbf{m}_{n+1} entspricht dann dem Minimum dieses Paraboloids.

Im Gegensatz zur Lösung des linearen least-squares Problem, ist die entsprechende approximative Lösung des nichtlinearen Problems also nicht eindeutig und die Konvergenz der iterativen Lösung (Gleichungen 9.8 und 9.12) hängt sowohl vom

Ausgangspunkt \mathbf{m}_0 als auch von der Zerklüftung von $E(\mathbf{m})$ ab. Bei Kenntnis der Topographie von $E(\mathbf{m})$ könnte der Ausgangspunkt \mathbf{m}_0 der iterativen Lösung so gewählt werden, dass die Konvergenz in das Hauptminimum von $E(\mathbf{m})$ einigermassen sichergestellt wäre. Allerdings muss die Topographie von $E(\mathbf{m})$ weitgehend empirisch, d.h. mittels Berechnung und graphischer Darstellung, ermittelt werden, und dies ist nur für Probleme mit maximal drei freien Modellparametern möglich. In vielen praktischen Situationen haben wir aber entweder mehr als drei freien Modellparameter oder aber der Parameterraum ist so umfangreich, dass eine detaillierte Abtastung desselben nicht möglich ist.

Oft lässt sich die erwartete Lösung auf Grund von unabhängigen *a priori* Informationen stark eingrenzen und somit ein geeigneter Ausgangspunkt \mathbf{m}_0 für die iterative Lösung des linearisierten Problems festlegen (Gleichungen 9.8 und 9.12). Ist dies nicht der Fall oder ist das Problem $\mathbf{d}=g(\mathbf{m})$ sehr stark nichtlinear, d.h. eine lineare Approximation ist nur über sehr enge Parameterbereiche zulässig, dann liefert eine iterative least-squares Lösung des linearisierten Inversionsproblems in der Regel keine zuverlässigen Resultate. In diesem Fall müssen wir Methoden verwenden, die der Nichtlinearität des Problems voll Rechnung tragen, und die, zumindest aus theoretischer Sicht, unabhängig von der Anzahl Nebenminima und dem Ausgangspunkt \mathbf{m}_0 , die Tendenz haben, ins Hauptminimum von $E(\mathbf{m})$ zu konvergieren. Die in gebräuchlichsten derartigen nichtlinearen Inversionsmethoden wollen wir im folgenden kennenlernen.

10. INVERSION STARK NICHTLINEARER PROBLEME

10.1. Grid Search

Dies ist eine "Brechstangenmethode", die den zerklüfteten Lösungsraum systematisch abtastet:

1. Für jeden Modellparameter m_i bestimmt man den minimalen m_i^{\min} und maximalen m_i^{\max} Wert sowie die gewünschte respektive erreichte Auflösung Δm_i .
2. Man berechnet die Objektfunktion $E(\mathbf{m})$ für alle möglichen Parameterkombinationen.
3. Wenn das Vorwärtsproblem für alle möglichen Parameterkombinationen gelöst ist, entspricht diejenige Parameterkombination mit dem geringsten Residuum der approximativen globalen Lösung des Problems.

Mit der Grid Search Methode sucht man also den gesamten diskretisierten Parameterraum systematisch ab (daher der Name "grid search"). Bei dieser, und auch bei den im folgenden beschriebenen Methoden, wird die Objektfunktion $E(\mathbf{m})$ in geeigneter Weise definiert und entspricht also nicht notwendigerweise der Summe der quadrierten Residuen. Innerhalb der Auflösung des so diskretisierten Parameterraumes findet man mit Hilfe dieser Methode bestimmt das globale Minimum des Problems. Allerdings ist diese Methode offensichtlich ineffizient, und zudem sind die Modellparameterräume meist zu gross, um diese einfache und sichere Methode anwenden zu können: bei m Parametern, die alle n mögliche Werte haben können, muss das Vorwärtsproblem $\mathbf{d}=g(\mathbf{m})$ n^m -mal gelöst werden. Bei typischen nichtlinearen Problem in der Geophysik ist häufig $n>10$ und $m>50$.

10.2. Monte Carlo Inversion

Offenbar kann der Aufwand zum Aufspüren der globale Lösung eines nichtlinearen Inversionsproblems signifikant verringert werden, wenn wir den Lösungsraum nicht deterministisch (wie im oben im Falle des Grid Search), sondern stochastisch absuchen.

Die Chance, die exakte globale Lösung zu finden, verringert sich dann zwar indirekt proportional zur Anzahl Lösungen des Vorwärtsproblems, andererseits verschwenden wir auch weniger Rechenaufwand in den weit von der optimalen Lösung entfernten Regionen des Modellparameterraumes.

Dieser Unterschied zwischen stochastischer und deterministischer Durchkämmung des Lösungsraum lässt sich durch Vergleich von deterministischer und stochastischer numerischer Integration veranschaulichen. Nehmen wir einmal an wir wollen die Funktion $f(x) = \sin x$ von 0 bis π integrieren. Die analytische Lösung lautet offensichtlich $I = \int_0^\pi \sin x dx = 2$. Die einfachste deterministische numerische Lösung dieses Problems erfolgt durch einfache Diskretisierung des kontinuierlichen Integrals, d.h. wir ersetzen das Integral mit einer Summation: $I \approx \sum_i \sin x_i \Delta x$. Die Genauigkeit dieser deterministischen Lösung hängt offenbar davon ab, wie klein wir Δx wählen (Abbildung 10.1).

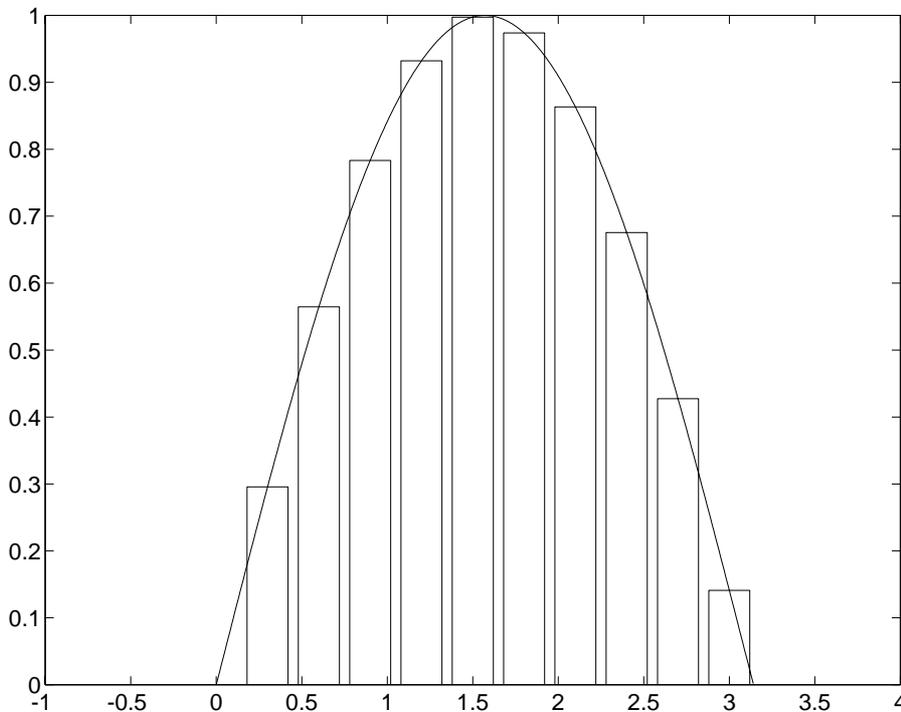


Abbildung 10.1. Approximation des bestimmten Integrals $I = \int_0^\pi \sin x dx = 2$ durch die diskrete Summe $I \approx \sum_i \sin x_i \Delta x$. Für $\Delta x = 0.3$ erhalten wir so $I \approx 1.99$.

Für die stochastische Lösung des Problems, überdecken wir den gesamten in Frage kommenden Lösungsraum, d.h. $[0 \leq x \leq \pi; 0 \leq y \leq 1]$, mit zufallsverteilten Punkten und bestimmen danach das Verhältnis der unterhalb der Funktion $f(x) = \sin x$ liegenden Punkte in Bezug auf die totale Anzahl Punkte. Multipliziert man dieses Verhältnis mit der Fläche des gesamten Lösungsraumes, d.h. mit π , so erhält man eine stochastische Schätzung für den Wert des bestimmten Integrals (Abbildung 10.2).

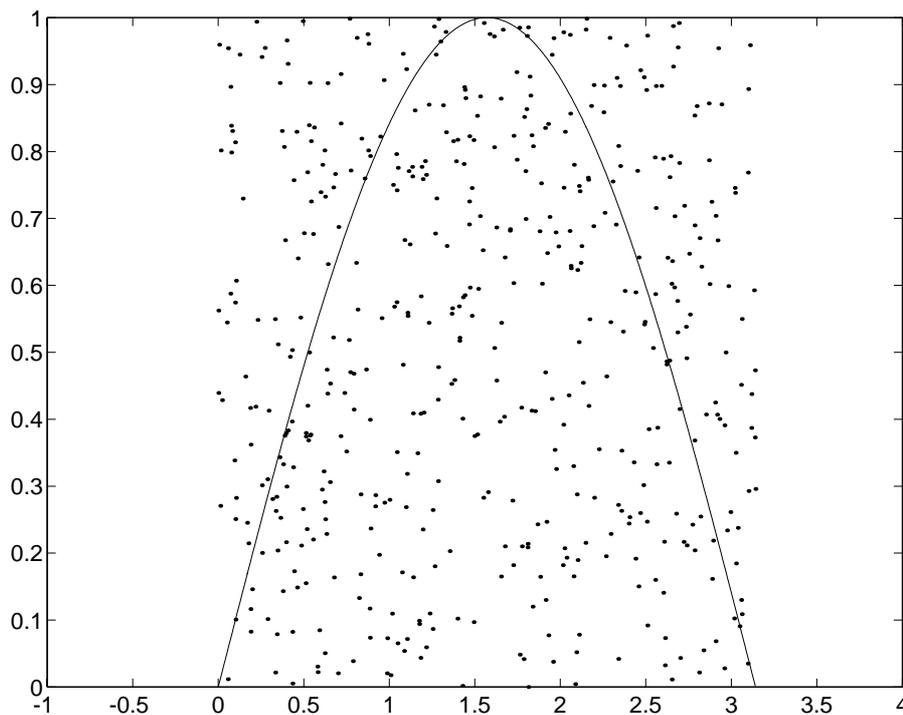


Abbildung 10.2. Approximation des bestimmten Integrals $I = \int_0^\pi \sin x dx = 2$ durch das Verhältnis der unterhalb von $f(x) = \sin(x)$ liegenden Anzahl Punkte zur total vorhandenen Anzahl zufallsverteilter Punkte: "Monte Carlo Integration". Für 500

zufallsverteilte Punkte innerhalb der Fläche $[0 \leq x \leq \pi; 0 \leq y \leq 1]$ erhalten wir so $I \approx 2.01$.

Offenbar nimmt die *Wahrscheinlichkeit* einer genauen Schätzung des Integralwertes mit der Anzahl Zufallspunkte zu. Diese stochastische und somit zufallsbasierte Integrationsmethode bezeichnet man nach dem Eldorado des Glücksspiels als "Monte Carlo Integration".

Ganz analog wie im obigen Beispiel der Integration lässt sich die Monte Carlo Methode auch auf die Inversion von stark nichtlinearen Problemen, d.h. zur Erkundung eines stark zerklüfteten Lösungsraumes nach dessen globalem Minimum anwenden. Man geht hierzu wie folgt vor:

1. Man bestimmt die totale Anzahl zu berechnender Lösungen M des Vorwärtsproblems.
2. Man bestimmt die Grenzen für jeden zu invertierenden Parameter $m_i^{\min} \leq m_i \leq m_i^{\max}$ sowie dessen Auflösung Δm_i . Dies ergibt die theoretische benötigte Anzahl Lösungen $N_i = (m_i^{\max} - m_i^{\min}) / \Delta m_i$ des Vorwärtsproblems für diesen Modellparameter.
3. Für jede Lösung des Vorwärtsproblems bestimmt man für jeden zu invertierenden Modellparameter eine ganzzahlige Zufallszahl $0 \leq iran \leq N_i$.
4. Wir berechnen die Lösung des Vorwärtsproblems für die wie folgt zufällig bestimmten Modellparameter: $m_i = m_i^{\min} + iran \cdot \Delta m_i$
5. Man wiederholt die Schritte 3 und 4 bis das Vorwärtsproblem M -mal gelöst wurde.
6. Schliesslich suchen wir unter den durchgerechneten Modellen dasjenige mit dem kleinsten Residuum.

Obwohl sich mit der Monte Carlo Inversion gegenüber dem Grid Search der Aufwand deutlich reduzieren lässt, ist dieser für viele - wenn nicht die meisten - interessanten Probleme immer noch zu gross. Effizienzmässig die grösste Schwäche der Monte Carlo

und der Grid Search Inversion ist es, dass sie total ungerichtet sind, und somit nicht davon profitieren, wenn sie in vielversprechenden Teil des Lösungsraumes "hineingefallen" sind: jede Lösung des Vorwärtsproblems erfolgt total zufällig und ignoriert jegliche Information aus vorgängigen Lösungen. Im folgenden betrachten wir zwei gerichtete Modifikationen der Monte Carlo Inversion, die versuchen, das Prinzip der Zufälligkeit mit Informationen aus vorhergegangenen Lösungen des Vorwärtsproblems zu kombinieren.

10.3. Simulated Annealing

Die Methode des "Simulated Annealing" basiert auf den Gesetzen der statistischen Mechanik und der Thermodynamik, die das Abkühlen und Auskristallisieren von Festkörperschmelzen beschreiben. Aus der Petrologie wissen wir, dass die Art und Weise wie eine Gesteinsschmelze abgekühlt wird, einen entscheidenden Einfluss auf die Zusammensetzung und Textur der daraus hervorgehenden magmatischen Gesteine hat. Als Faustregel gilt, dass je langsamer sich die Schmelze abkühlt, d.h. je gemächlicher sie die Kristallisationstemperatur der einzelnen Mineralkomponenten erreicht und durchschreitet, umso grösser sind die dabei ausgeschiedenen Kristalle und umso idealer deren Form. Die regelmässige Anordnung von Atomen in einem Kristallgitter stellt den energetisch günstigsten Zustand des Systems dar, d.h. Kristalle bilden sich, wenn das System ein Energieminimum erreicht. Wird die Schmelze zu schnell abgekühlt, so verpasst sie die Energieminima der verschiedenen Mineralphasen und deren Auskristallisation erfolgt unvollständig: es entstehen nur kleine Kristalle und Glas.

Die statistische Wahrscheinlichkeit eines bestimmten Energiezustandes als Funktion der Temperatur wird mit Hilfe der Boltzmann'schen Wahrscheinlichkeitsverteilung beschrieben. Diese besagt, dass mit sinkender Temperatur die Wahrscheinlichkeit für ein tiefes - also günstiges - Energieniveau immer grösser wird:

$$P(E) \sim \exp(-E/kT) \quad (10.1)$$

Hierbei ist E der Energiezustand, k die Boltzmann'sche Konstante und T die Temperatur.

Offenbar bestehen weitreichende Analogien zwischen dem oben beschriebenen Kristallisationsvorgang und der Lösung des stark nichtlinearen Inversionsproblems. Die Objektfunktion $E(\mathbf{m})$ entspricht dem Energiezustand unseres Systems, und die Konfiguration der Modellparameter \mathbf{m} entspricht der Anordnung der Atome. Wie im obigen Fall suchen wir diejenige Anordnung der Modellparameter, die dem tiefstmöglichen Energiezustand des Systems entspricht. Dazu muss das System langsam genug abkühlt werden, sodass es sich in allen lokalen Minimas (Kristallisation einzelner Mineralphasen) equilibrieren kann, um diese anschliessend in Richtung des globalen Minimum (vollkommen auskristallisierte Schmelze) zu durchschreiten. Für die Inversion stark nichtlinearer Probleme kann dies wie folgt erreicht werden:

1. Wir modifizieren die Boltzmann'sche Wahrscheinlichkeitsfunktion zu $P(\Delta E_{ij}) \sim \exp(-\Delta E_{ij}/T) = \exp(-(E_i - E_j)/kT)$. Hierbei sind E_i und E_j Energiezustände, die den Werten der Objektfunktion $E(\mathbf{m})$ für zwei bestimmte Modellparameterkonfigurationen entsprechen.
2. Startwert für die Temperatur T , das Dekrement derselben ΔT sowie die Anzahl zu testenden Modellparameterkonfigurationen N pro Temperatur festlegen.
3. Wertebereich $m_i^{\min} \leq m_i \leq m_i^{\max}$ und Auflösung Δm_i der Modellparameter festlegen.
4. Eine Modellparameterkonfigurationen \mathbf{m}_0 zufällig auswählen und deren Energiezustand $E(\mathbf{m}_0)$ bestimmen.
5. Eine weitere Modellparameterkonfigurationen \mathbf{m}_1 zufällig auswählen und deren Energiezustand $E(\mathbf{m}_1)$ bestimmen.
6. Die Wahrscheinlichkeit, dass das System seinen Energiezustand von $E(\mathbf{m}_0)$ nach $E(\mathbf{m}_1)$ ist nun gegeben durch $P(\Delta E) = \exp(-(E(\mathbf{m}_1) - E(\mathbf{m}_0))/kT)$. Wenn

$E(\mathbf{m}_1) < E(\mathbf{m}_0)$ dann wird $P=1$ gesetzt. Die zu $E(\mathbf{m}_1)$ gehrige Modellparameterkonfiguration \mathbf{m}_1 wird dann als erfolgreich eingestuft (relative zu derjenigen von $E(\mathbf{m}_0)$). In diesem werden $\mathbf{m}_0 = \mathbf{m}_1$ und $E(\mathbf{m}_0) = E(\mathbf{m}_1)$ gesetzt. Falls dagegen $E(\mathbf{m}_1) > E(\mathbf{m}_0)$ dann ist die zu $E(\mathbf{m}_1)$ gehrige Modellparameterkonfiguration \mathbf{m}_1 nur mit der bedingten Wahrscheinlichkeit $P(\Delta E) = \exp(-(E(\mathbf{m}_1) - E(\mathbf{m}_0))/kT) \leq 1$ erfolgreich. Wir bestimmen dann eine Zufallszahl $0 \leq ran \leq 1$. Falls $P(\Delta E) > ran$ dann ist die zu $E(\mathbf{m}_1)$ gehrige Modellparameterkonfiguration \mathbf{m}_1 erfolgreich, und wir setzen wiederum $\mathbf{m}_0 = \mathbf{m}_1$ und $E(\mathbf{m}_0) = E(\mathbf{m}_1)$.

\Rightarrow *Auch eine grundsätzliche und instabile Modellparameterkonfiguration hat gewisse Erfolgchancen, was erlaubt, aus lokalen Minima wieder herauszufinden.*

7. Schritt 6 wiederholen bis N Modellparameterkonfigurationen durchprobiert wurden.
8. Eine neue Modellparameterkonfiguration \mathbf{m}_1 zufällig auswählen und deren Energiezustand $E(\mathbf{m}_1)$ bestimmen.
9. Temperatur um ΔT erniedrigen und Schritte 6 bis 8 wiederholen.

Im Gegensatz zur Monte Carlo Methode profitiert diese Methode also von bereits gefundenen vielversprechenden Modellparameterkonstellationen, indem sie deren Umfeld stochastisch nach noch besseren Konstellationen absucht. Dies ist effizienter als die Grid Search und Monte Carlo Methoden und erlaubt zudem - im Gegensatz zum least-squares

Ansatz - aus lokalen Minima wieder herauszufinden. Allerdings hängt der Erfolg der Inversion mittels Simulated Annealing stark vom Verlauf des Abkühlungswegs, und somit von der Wahl der Anfangstemperatur und der Anzahl zufälliger Modellparameterkonstellationen N pro Temperaturschritt ΔT ab. Zudem wird mit sinkender Temperatur die Wahrscheinlichkeit, dass ein höherer Energiezustand in Frage kommt immer kleiner (Gleichung 10.1). Damit nimmt dann natürlich auch die Wahrscheinlichkeit ab, aus lokalen Minima wieder herauszufinden.

10.4. Genetische Algorithmen

Bei genetischen Algorithmen werden die Grundregeln der Darwin'schen Evolutions- und Vererbungslehre (survival of the fittest) auf stark nichtlineare Inversionsprobleme angewandt. Im Gegensatz zu allen anderen Inversionschemen arbeiten genetische Algorithmen also immer mit Modellpopulationen, und die Modellparameterkonfigurationen (d.h. die genetischen Informationen) sind in geeigneter Weise (meist binär) kodiert. Die Elemente der Evolutions- und Vererbungslehre, auf denen die Inversion mittels genetischer Algorithmen basiert, sind (1) Kodierung der Erbinformation, (2) Selektion, (3) Paarung, (4) Austausch der Erbinformation und (5) Mutation derselben.

1. Kodierung

- Für jeden zu invertierenden Modellparameter legt man die obere und untere Grenze des Wertebereichs $m_i^{\min} \leq m_i \leq m_i^{\max}$ sowie die gewünschte respektive erreichbare Auflösung Δm_i fest.

- Für jeden zu invertierenden Modellparameter kodiert man dessen mögliche Werte. Diese Kodierung erfolgt meist nach binärem Muster. Hierbei entspricht ein einzelnes Bit einem *Gen*. Eine bestimmte Modellparameterkonfiguration ist definiert durch die Aneinanderreihung der die einzelnen Parameter definierenden binären Sequenzen. Dies entspricht einem *Chromosom*. Jedes Modell innerhalb der gesamten Modellpopulation ist somit durch sein Chromosom eindeutig definiert.

2. Selektion und Paarung

- Aus der globalen Modellpopulation (d.h. aus allen theoretisch möglichen Modellparameterkonfigurationen) werden nun zufällig eine gewisse Anzahl Modelle ausgewählt und auf ihre "Fitness" getestet. Die Fitness eines Modells ist letztlich wiederum gegeben durch eine geeignet definierte Objektfunktion $E(\mathbf{m})$. Die Länge der Chromosomen einer Modellpopulation ist ein Maß für die Anzahl der auszuwählenden und zu testenden Modelle.
- Aus dieser ursprünglichen, durch zufällige Auswahl entstandenen Modellpopulation generiert man nun durch das Darwinsche Prinzip ("survival of the fittest") eine neue Modellpopulation, in der die Häufigkeitsverteilung der Modelle proportional zu ihrer Fitness ist.
- Bei der nachfolgenden Paarung sind die Chancen eines Modells einen fitten Partner zu finden wiederum proportional zur eigenen Fitness.

3. Austausch der Genetischen Information

- Mit einer vorher definierten Wahrscheinlichkeit werden einzelne Bits aus den Chromosomen der beiden Partner ausgetauscht.

4. Mutation der Genetischen Information

- Mit einer ebenfalls vorher definierten Wahrscheinlichkeit werden einzelne Bits aus den Chromosomen aller in der Population vorhandenen Modelle umgetauscht, d.h. von 0 auf 1 gesetzt oder umgekehrt.

Danach beginnt der Prozess mit Selektion und Paarung von vorne. Nach einer bestimmten Anzahl Modellgenerationen bricht man den Vorgang ab und wählt das fitteste Modelle aus. Wiederholt man den gesamten Vorgang (Schritte 2 bis 4) oft genug, so werden die fitten Modellparameterkonfigurationen progressiv angereichert, und die gesamte Modellpopulation nähert sich langsam dem globalen Minimum des Inversionsproblems. Wie beim Simulated Annealing - und im Gegensatz zum least-squares Ansatz - haben auch hier relativ unfitte Modelle eine gewisse Überlebenschance, was verhindern soll, dass der Inversionsprozess in Nebenminima steckenbleibt. Allerdings garantieren auch die Mechanismen der Evolution nicht notwendigerweise die Konvergenz zum globalen Minimum des Inversionsproblems. Es ist zum Beispiel anzunehmen, dass die Entwicklung der Reptilien mit den Sauriern in einem Nebenminimum steckenblieb.

11. Weiterführende Literatur

- Menke, W., 1989. *Geophysical Data Analysis: Discrete Inverse Theory*. 2nd revised edition, Academic Press, San Diego, California.
Das Standardwerk zur Einführung in die Inversionstheorie. Das Schwergewicht liegt auf den verschiedenen Formen der least-squares und verwandter Methoden.
- Sen, M. and Stoffa, P.L., 1995. *Global Optimization Methods in Geophysical Inversion*. Elsevier, Amsterdam, The Netherlands.
Ein sehr gutes modernes Textbuch, das der Inversion von stark nichtlinearen Problemen gewidmet ist.
- Taylor, J.R., 1982. *An Introduction to Error Analysis - The Study of Uncertainties in Physical Measurements*. University Science Books, Mill Valley, California.
Eine gute Einführung in die statistische Fehleranalyse und Fehlerrechnung.