

Inverse Probleme in der Geophysik

Übung zur gleichnamigen Vorlesung, SS 2007

Institut für Geophysik, TU Bergakademie Freiberg

11. Juli 2007

Ziel der Übung

- ▶ Einführung in inverse Probleme, meist am Beispiel Geophysik
- ▶ Handwerkszeug zur Lösung inverser Aufgaben
- ▶ Überblick zu Inversionsverfahren
- ▶ Nutzung von A-Priori-Information
- ▶ Auswirkung von Datenfehlern

Nur mit Kenntnis von Grundlagen der Inversionsrechnung können Inversionsergebnisse petrophysikalisch und geologisch richtig interpretiert werden.

Inhalt

1. Einführung in inverse Probleme
2. Lineare Inversion
 - ▶ Methode der kleinsten Quadrate
 - ▶ Eigenwerte und Eigenvektoren
 - ▶ Singulärwertzerlegung
 - ▶ Regularisierung
 - ▶ Algebraische Rekonstruktion
3. Nichtlineare Inversion
 - ▶ Sensitivitäten

Anwendungsbeispiele

- ▶ Lösen von Gleichungssystemen
- ▶ Lineare Regression als inverses Problem
- ▶ Bildkomprimierung mittels Singulärwertzerlegung
- ▶ Laufzeit-Tomographie (lineares Problem, gerader Strahlenweg)
- ▶ 1D-Inversion von DC-Sondierungskurven

Einführung: Inverse Probleme

Ziel

Bestimme eine plausible Verteilung von Modellparametern \vec{m} , welche die gemessenen Daten \vec{d} für das Modell F erklären:

$$F(\vec{m}) = \vec{d}. \quad (1)$$

Dabei ist der Vorwärtsoperator F bekannt als partielle Differentialgleichung, die physikalische und geometrische Abhängigkeiten beschreibt.

Lineares Problem

F hängt selbst nicht von \vec{m} ab:

$$\tilde{F} \cdot \vec{m} = \vec{d}. \quad (2)$$

Beispiel: Gravimetrie, Magnetik, Tomographie mit linearem Strahlengang

Nichtlineares Problem

F hängt von \vec{m} ab:

$$\tilde{F}(\vec{m}) = \vec{d}. \quad (3)$$

Beispiel: Geoelektrik, elektromagnetische Methoden, Tomographie unter Berücksichtigung der Brechung

' $m=F \setminus d$ ' ergibt i. A. keine Lösung, weil ...

- ▶ ... F kein analytischer Ausdruck ist,
- ▶ ... F nicht invertierbar ist,
- ▶ ... die inverse Aufgabe nicht korrekt gestellt ist. Die Forderungen von Hadamard hinsichtlich
 1. Existenz einer Lösung,
 2. Eindeutigkeit der Lösung und
 3. Stetigkeit der Lösung bzgl. der Daten (Fehlerverhalten)

sind nicht erfüllt.

Aufgabentyp

Entscheidend für den Aufgabentyp sind die Anzahl unabhängiger Messungen N und die Anzahl der Modellparameter M .

Überbestimmtes Problem

$N > M$: Mittels Ausgleichsrechnung wird eine Lösung im Sinne kleinster Quadrate gesucht.

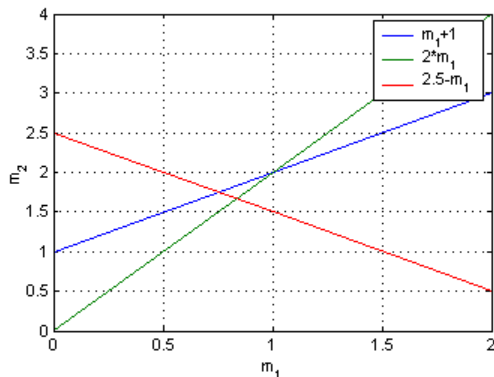
Unterbestimmtes Problem

$N < M$: Zusätzliche Forderungen an die Lösung führen zu Eindeutigkeit.

In vielen Fällen treten sowohl über- als auch unterbestimmte Parameter gleichzeitig auf.

Beispiel: Überbestimmtes Problem

$$\begin{array}{rcl}
 m_1 - m_2 & = & -1 \\
 2m_1 - m_2 & = & 0 \\
 m_1 + m_2 & = & 2.5
 \end{array} \quad (4)$$



Es gibt mehr unabhängige Gleichungen als Unbekannte. Die Lösung ergibt sich als Kompromiss zwischen allen Gleichungen.

Die Methode der kleinsten Quadrate

Ausgangspunkt ist die Minimierung der L_2 -Norm des Residuums:

$$\| \tilde{A}\vec{x} - \vec{y} \|_2 := \sqrt{\sum_{i,j} (A_{ij}x_j - y_i)^2}. \quad (5)$$

Notwendige Bedingung für das Auftreten eines Extremums ist das Verschwinden der ersten Ableitungen nach allen freien Parametern.

Daraus folgt das System der Normalgleichungen

$$\tilde{A}^T \tilde{A} \vec{x} = \tilde{A}^T \vec{y} \quad (6)$$

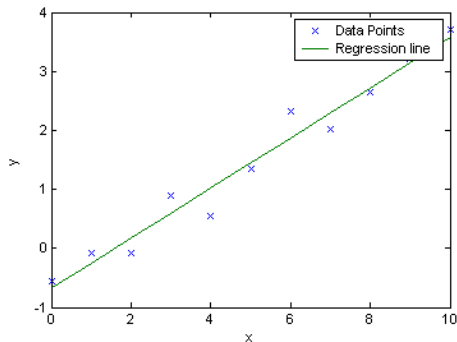
mit der Lösung im Sinne der kleinsten Quadrate („Least-Squares-Lösung“)

$$\vec{x}_{ls} = (\tilde{A}^T \tilde{A})^{-1} (\tilde{A}^T \vec{y}). \quad (7)$$

1. Aufgabe: Least-Squares-Ansatz

1. Lösen Sie das Gleichungssystem (4) mit Hilfe der Methode der kleinsten Quadrate!
2. Stellen Sie dazu die Normalgleichungen auf und lösen Sie diese nach Gleichung (7)!
3. Überprüfen Sie das Ergebnis mit Hilfe der Graphik auf S. 9!
4. Vergleichen Sie das Ergebnis mit der Lösung von 'A\y'! Was ist daraus zu schließen?

Lineare Regression



Ziel

Finde a, b , so dass $y = a + bx$ im Sinne kleinster Quadrate genähert wird. Mittels Ausgleichsrechnung wird eine Ausgleichsgerade durch die Punktschar gelegt.

2. Aufgabe: Lineare Regression

Gegeben seien die Daten y_i , die zugehörigen Koeffizienten x_i , die Modellparameter a, b und das Modell, die Abbildung $(a, b) \rightarrow (a + bx)$.

1. Wie muss die Abbildung aussehen? (Überlegung für je 1, dann je 2 x- und y-Werte)
2. Erzeugen Sie eine Funktion 'linreg.m'! (Bitte kommentieren!)
3. Berechnen Sie in dieser die Systemmatrix \tilde{A} und lösen Sie die Normalgleichungen $\tilde{A}^T \tilde{A} \vec{x} = \tilde{A}^T \vec{y}$.
4. Geben Sie a und b als Funktionswerte zurück.
5. Testen Sie die Funktion mit Daten (graphischer Vergleich)!

Zusatz: Berechnen Sie die Summe der Quadrate der Abweichungen der einzelnen Punkte von der Geraden (Fehlerquadratsumme)!

Singulärwertzerlegung

Eigenwerte und Eigenvektoren

Ein Vektor \vec{x} , multipliziert mit einer Matrix \tilde{A} , ändert i.A. seine Richtung - nicht aber Eigenvektoren (EV), welche die Gleichung

$$\tilde{A}\vec{x} = \lambda\vec{x} \quad (8)$$

erfüllen. Die Lösung der Gleichung

$$(\tilde{A} - \lambda\tilde{I})\vec{x} = 0 \quad (9)$$

führt zur Bestimmung der Eigenwerte (EW) λ über das charakteristische Polynom

$$\det(\tilde{A} - \lambda\tilde{I}) = 0. \quad (10)$$

Verschiedene Eigenwerte korrespondieren mit linear unabhängigen Eigenvektoren. Für symmetrische Matrizen existiert eine Faktorisierung mit den EV in \tilde{Q} und den EW in $\tilde{\Lambda}$:

$$\tilde{A} = \tilde{Q}\tilde{\Lambda}\tilde{Q}^T. \quad (11)$$

Singulärwertzerlegung (SVD)

Wir konstruieren aus einer Rechteckmatrix \tilde{A} eine symmetrische quadratische Matrix \tilde{S} :

$$\tilde{S} = \begin{pmatrix} 0 & \tilde{A} \\ \tilde{A}^T & 0 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Diese besitzt eine Eigenwertzerlegung der Form:

$$\tilde{S}\vec{w}_i = \lambda_i \vec{w}_i \quad \text{mit} \quad \vec{w}_i = \begin{pmatrix} \vec{u}_i \\ \vec{v}_i \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Wir erhalten zwei gekoppelte Eigenwertprobleme für \tilde{A} und \tilde{A}^T :

$$\tilde{A}^T \vec{u}_i = \lambda_i \vec{v}_i \quad \text{bzw.} \quad \tilde{A} \vec{v}_i = \lambda_i \vec{u}_i. \quad (14)$$

Modell- und Datenvektorraum

Durch Multiplikation mit $\tilde{\mathbf{A}}$ und $\tilde{\mathbf{A}}^T$ erhalten wir schließlich

$$\tilde{\mathbf{A}}^T \tilde{\mathbf{A}} \vec{v}_i = \lambda_i^2 \vec{v}_i \quad \text{und} \quad \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{A}}^T \vec{u}_i = \lambda_i^2 \vec{u}_i, \quad (15)$$

ein Eigenwertproblem im Modellvektorraum und eins im Datenvektorraum.

Für jede Matrix $\tilde{\mathbf{A}} \in n \times m$ gibt es daher eine Zerlegung der Gestalt $\tilde{\mathbf{A}} = \tilde{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{W}} \tilde{\mathbf{V}}^T$, wobei gilt

$$\tilde{\mathbf{U}}^{-1} = \tilde{\mathbf{U}}^T, \quad \tilde{\mathbf{V}}^{-1} = \tilde{\mathbf{V}}^T \quad \text{und} \quad \tilde{\mathbf{W}} = \text{diag}(s_i).$$

Dabei enthalten

- ▶ $\tilde{\mathbf{U}} \in n \times n$ den Datenvektorraum,
- ▶ $\tilde{\mathbf{V}} \in m \times m$ den Modellvektorraum und
- ▶ $\tilde{\mathbf{W}} \in n \times m$ die Singulärwerte.

Die verallgemeinerte Inverse

Die Singulärwerte s_i stellen Elemente einer Wichtungsmatrix für die einzelnen Daten- und Modellvektoren dar. Die zu verschwindenden Singulärwerten $s_i = 0$ gehörenden \vec{u}_i und \vec{v}_i spannen den Daten- bzw. den Modellnullvektorraum auf. Durch ausschließliche Betrachtung des Daten- und Modellvektorraums, also der r nichtverschwindenden Singulärwerte, erhalten wir einen für unser Problem äquivalenten Operator:

$$\tilde{A}_r = \tilde{U}_r \tilde{W}_r \tilde{V}_r^T. \quad (16)$$

Da \tilde{U} und \tilde{V} orthogonal sind, existiert eine sogenannte verallgemeinerte Inverse von \tilde{A}

$$\tilde{A}^\dagger = \tilde{V}_r \tilde{W}_r^{-1} \tilde{U}_r^T. \quad (17)$$

Für die meisten Probleme werden Singulärwerte nicht exakt Null, sondern sehr klein. Dann kann anstelle des Rangs r ein „Pseudorang“ bzgl. einer gewissen Genauigkeit für die Rekonstruktion der Matrix gewählt werden.

3. Aufgabe: SVD

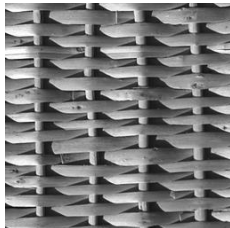
Betrachten wir die Matrix $\tilde{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$. Weder ihre

Spalten- noch ihre Zeilenvektoren sind linear unabhängig.

1. Berechnen Sie die Singulärwerte und Eigenvektoren von \tilde{A} mit Hilfe der Eigenwertzerlegung von $\tilde{A}^T \tilde{A}$ und $\tilde{A} \tilde{A}^T$! Vergleichen Sie das Ergebnis der Handrechnung mit den Resultaten der Funktion 'eig'!
2. Wo liegen der Datenvektorraum, der Modellvektorraum und die Nullvektorräume?
3. Vergleichen Sie mit dem Ergebnis der Funktion 'svd'!
4. Berechnen Sie die verallgemeinerte Inverse \tilde{A}^\dagger nach Gleichung (17) und lösen Sie $\tilde{A}\vec{x} = \vec{y}$ für $\vec{y} = (1, 2, 1)^T$!

4. Aufgabe: Bildkomprimierung mittels SVD

Die Idee der Bildkomprimierung mittels SVD besteht in der Zerlegung der Bildmatrix und dem Weglassen niedriger Singulärwerte.



Speichern Sie das Bild

`http://www.geophysik.tu-freiberg.de/assets/media/Personal/franke/uebungen/inv/basket.jpg` im Arbeitsverzeichnis, laden Sie es mit der Funktion `imread` und stellen Sie es mit der Funktion `'imagesc'` grau dar!

1. Zerlegen Sie die Matrix mit Hilfe der Funktion 'svd' in ihre Eigenvektoren im Datenraum, Eigenvektoren im Modellraum und Singulärwerte.
 $[U, S, V] = \text{svd}(A);$
2. Sehen Sie sich das Singulärwertspektrum ($\text{diag}(S)$) sowie die ersten Modellvektoren an!
`semilogy(diag(S))`
`plot(V(:,1)), plot(V(:,1:5))`
3. Nähern Sie jetzt die Matrix \tilde{A} durch Betrachtung der ersten n Singulärwerte an und bewerten Sie das Ergebnis optisch!
4. Ab welcher Zahl n ist die Näherung optisch gut genug?

Auflösung der SVD

In der Annahme fehlerfreier Messungen ($\tilde{G} \cdot \vec{m} = \vec{d}$) gilt

$$\vec{m}^\dagger = \tilde{G}^\dagger \vec{d} = \tilde{G}^\dagger \tilde{G} \vec{m}. \quad (18)$$

Einsetzen der verallgemeinerten Inversen \tilde{G}^\dagger ergibt

$$\vec{m}^\dagger = \tilde{V}_r \tilde{W}_r^{-1} \tilde{U}_r^T \tilde{U}_r \tilde{W}_r \tilde{V}_r^T \vec{m} = \tilde{V}_r \tilde{V}_r^T \vec{m}. \quad (19)$$

Die Matrix $\tilde{V} \tilde{V}^T$ wird als Modellauflösungsmatrix beschrieben.
Auf gleiche Weise ergibt sich die Datenauflösungsmatrix $\tilde{U} \tilde{U}^T$:

$$\vec{d}^\dagger = \tilde{G} \vec{m}^\dagger = \tilde{G} \tilde{G}^\dagger \vec{d} = \tilde{U}_r \tilde{U}_r^T \vec{d}. \quad (20)$$

5. Aufgabe: Lösung überbestimmter Probleme mittels SVD

Betrachten wir wieder das Gleichungssystem (4) auf Seite 9.

1. Bestimmen Sie die Singulärwertzerlegung der Matrix!
2. Leiten Sie daraus die verallgemeinerte Inverse ab!
Dabei ist die Anzahl nichtverschwindender λ_i zu beachten.
3. Errechnen Sie die Lösung und vergleichen Sie diese mit dem Resultat aus dem Least-Squares-Ansatz!
4. Ermitteln Sie Modell- und Datenauflösungsmatrix!
Interpretieren Sie beide!

6. Aufgabe: Lösung unterbestimmter Probleme mittels SVD

Betrachten wir das System $\tilde{A} \cdot \vec{x} = \vec{y}$ mit $\tilde{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$.

Errechnen Sie wieder

1. die verallgemeinerte Inverse,
2. die Modell- und Datenauflösungsmatrix und
3. lösen Sie das Gleichungssystem für $\vec{y} = (1, 1)^T$!

Vergleichen Sie das Ergebnis mit dem Resultat für '\!'

Tomographie

Einführung

Angenommen werden gerade Strahlenwege zwischen Sender und Empfängern in einem zweidimensionalen Modellgebiet. Die Laufzeit t ergibt sich für den Laufweg l zu:

$$t = \int_l \frac{1}{v} \cdot dl = \int_l s \cdot dl \quad (21)$$

wobei v die Geschwindigkeit und s die Slowness sind. Durch Übergang zum diskreten Modell erhält man

$$t = \sum_i s_i l_i \quad (22)$$

Vorwärtsrechnung

Zur Vorwärtsrechnung müssen lediglich die Laufwege durch die einzelnen Zellen geometrisch bestimmt werden. In Matrixform lässt sich schreiben:

$$\vec{t} = \tilde{W}\vec{s} \quad (23)$$

mit den Gesamtlaufzeiten aller Strahlen in \vec{t} , den Slowness-Werten aller Zellen in \vec{s} und den Weglängen für jeden Strahl in jeder Zelle in \tilde{W} . Die Matrix \tilde{W} enthält pro Strahl eine Zeile und pro Modellzelle eine Spalte.

- ▶ Laden Sie die Funktion `wmatrix.m`
(<http://www.geophysik.tu-freiberg.de/assets/media/Personal/franke/uebungen/inv/wmatrix.m>)
herunter!
- ▶ Sehen Sie sich die Hilfe zu dieser Funktion an!

7. Aufgabe: a. Tomographie - Slownessfeld

1. Laden Sie `hv130.mat`
(<http://www.geophysik.tu-freiberg.de/assets/media/Personal/franke/uebungen/inv/hv130.mat>) in den Arbeitsspeicher! ((x_t, y_t) - Transmitter, (x_r, y_r) - Receiver)
2. Legen Sie x und y als Vektoren sowie ein Slownessfeld s an!
3. Stellen Sie es mit der Funktion `malen.m`
(<http://www.geophysik.tu-freiberg.de/assets/media/Personal/franke/uebungen/inv/malen.m>) mit und ohne Strahlen dar!

7. Aufgabe: b. Tomographie - Laufwege

1. Bestimmen Sie die Laufwegmatrix W mit `wmatrix.m!`
(`spy(W)`)
2. Setzen Sie s auf den Laufweg des Strahls Nr. 18 und malen Sie ihn!
`n=18;`
`s(:)=W(n,:);`
`malen(x,y,s,xt(n),yt(n),xr(n),yr(n));`
3. Stellen Sie auf gleiche Weise das Überdeckungsschema dar!
Nutzen Sie dafür die Summe der Laufwege über alle Zellen!

8. Aufgabe: Tomographie - SVD

1. Führen Sie eine Singulärwertzerlegung der Matrix \tilde{W} durch!
2. Betrachten Sie das Singulärwertspektrum! (semilogy)
3. Sehen Sie sich einige Modellvektoren an!

`s(:)=V(:,n);`

`ma1en(x,y,s); % oder als Schleife`

4. Errechnen Sie Modell- und Datenauflösungsmatrix
 - ▶ mit Vollrang ($n=\text{rank}(\text{full}(W))$),
 - ▶ mit eingeschränktem Rang!

Stellen Sie die Hauptdiagonalen der Matrizen dar und interpretieren Sie!

9. Aufgabe: Tomographie - synthetische Daten

1. Legen Sie einen anomalen Bereich im Modell fest!
2. Errechnen Sie die Modellantwort!
3. Stellen Sie die Strahlen im Modell dar, die eine veränderte Laufzeit aufweisen!

Inversion synthetischer Daten

Im Folgenden versuchen wir, aus der synthetischen Modellantwort das Modell zu rekonstruieren.

- ▶ Zunächst muss die Überbestimmtheit sichergestellt sein.
- ▶ Invertieren Sie mit dem Least-Squares-Verfahren!

10. Aufgabe: Tomographie - SVD-Inversion

1. Konstruieren Sie die verallgemeinerte Inverse mit $r = \text{rank}(\text{full}(W))!$
2. Errechnen Sie daraus die verallgemeinerte Lösung!
3. Variieren Sie den Pseudorang r und betrachten Sie das Modell! Welches r erscheint am günstigsten?
4. Wiederholen Sie die Schritte 1. bis 3. mit verrauschten Daten (Gauß-Verteilung)!

```
help randn
```

```
noise=0.03; % relativer Datenfehler, hier: 3 %  
t=t.*(1+noise*randn(size(t)));
```

5. Schreiben Sie eine Funktion 'svdinv.m', in der r gerade so gewählt wird, dass die Daten im Rahmen des Rauschlevels erklärt werden!

Regularisierung

Das Occam-Prinzip

William v. Occam, Schottland 14. Jh.:

„Pluralitas non est ponenda sine neccesitate!“

Freie Übersetzung aus der Vorlesung:

„Wähle von allen Lösungen die einfachste!“

Doch wie können wir „einfach“ mathematisch definieren?

- ▶ Große Glattheit
- ▶ Möglichst geringe Kontraste
- ▶ Möglichst wenige Kontraste

Regularisierung

Aus der Informationstheorie ist bekannt, dass zusätzliche Forderungen an die Lösung als Minimierungsproblem für eine Norm:

$$\|\tilde{C}\vec{m} - \vec{h}\|$$

formuliert werden können. Gleichzeitiges Minimieren zweier Normen, verknüpft über den Lagrange-Parameter λ ,

$$\|\tilde{G}\vec{m} - \vec{d}\|_2^2 + \lambda\|\tilde{C}\vec{m} - \vec{h}\|_2^2 \rightarrow \min! \quad (24)$$

führt zu regularisierten Normalgleichungen

$$(\tilde{G}^T \tilde{G} + \lambda \tilde{C}^T \tilde{C})\vec{m} = \tilde{G}^T \vec{d} + \lambda \tilde{C}^T \vec{h}. \quad (25)$$

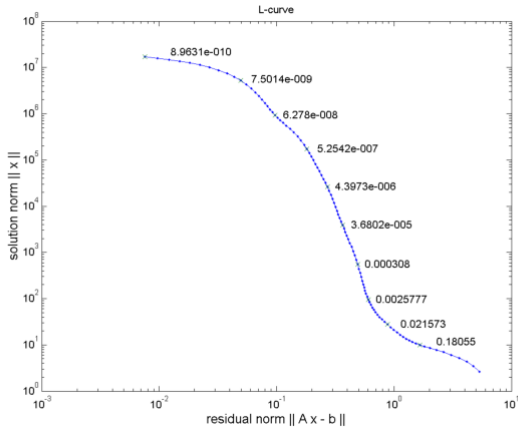
Im einfachsten Fall fordern wir Glattheit für das Modell: $\vec{h} = \vec{0}$.
Man wählt außerdem für \tilde{C} die Einheitsmatrix \tilde{I}
(Marquardt-Levenberg-Verfahren), d.h. die Norm des Modells wird bestraft und man erhält eine gedämpfte Least-Squares-Lösung:

$$(\tilde{G}^T \tilde{G} + \lambda \tilde{I}) \vec{m} = \tilde{G}^T \vec{d} \quad (26)$$

Alternativ zu den Modellparametern \vec{m} kann man auch den Unterschied $\Delta \vec{m}$ zu einem Referenzmodell \vec{m}^0 betrachten:

$$\vec{m} = \vec{m}^0 + \Delta \vec{m}, \quad (\tilde{G}^T \tilde{G} + \lambda \tilde{I}) \Delta \vec{m} = \tilde{G}^T (\vec{d} - \tilde{G} \vec{m}^0) - \lambda \tilde{I} \vec{m}^0. \quad (27)$$

Die L-Kurve

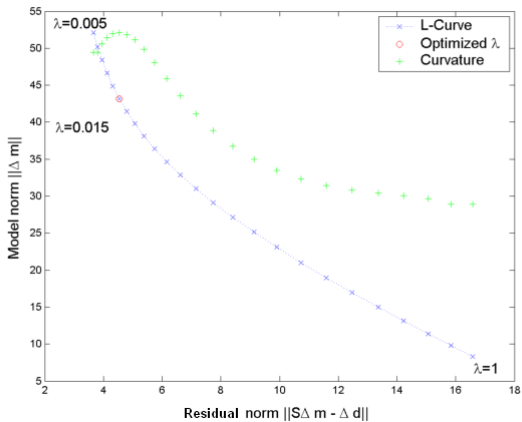


Wahl des Regularisierungsparameters

Kriterien zur Wahl des Regularisierungsparameters:

- ▶ Erfahrungswerte,
- ▶ optisches Auswählen einer Lösung,
- ▶ bei bekanntem Fehler - Diskrepanzprinzip: Gesucht ist die Lösung mit minimaler Modellnorm, welche die Daten im Rahmen des Fehlers erklärt,
- ▶ optische Betrachtung der L-Kurve,
- ▶ Bestimmung der maximalen Krümmung der L-Kurve und
- ▶ GCV - Generalized Cross-Validation: Die Inversionslösung soll möglichst wenig abhängig sein von jedem einzelnen Datum.

Das L-Kurven-Kriterium



11. Aufgabe: Regularisierung

1. Schreiben Sie eine Funktion `solvereg.m`, die für gegebene \tilde{G} , \vec{d} und λ eine regularisierte Lösung berechnet!
2. Bestimmen Sie intuitiv ein gutes Slowness-Modell, indem Sie λ variieren und die Lösung betrachten!
3. Errechnen Sie systematisch für viele λ die Lösung und speichern Sie die Normen des Residuums und der Lösung. Stellen Sie beide dann in einem Plot dar!
4. Welches λ muss nach dem Diskrepanzprinzip gewählt werden?
5. Bestimmen Sie die Krümmung der Kurve mit der Funktion `curvature.m`
(<http://www.geophysik.tu-freiberg.de/assets/media/Personal/franke/uebungen/inv/curvature.m>)
und aus deren Maximum das optimale λ !
6. Bewerten Sie die drei Parameter und Modelle!

Andere Nebenbedingungen

- ▶ Wichtung der Modellparameter mit Überdeckungsgrad, Tiefenfunktion oder A-priori-Modellkovarianzen
- ▶ Minimale Anzahl Sprünge (Focused Inversion)
- ▶ Smoothness Constraints (\tilde{C} = Ableitungsoperator)
 - ▶ Laden Sie die Funktion `smooth2d2nd`
(<http://www.geophysik.tu-freiberg.de/assets/media/Personal/franke/uebungen/inv/smooth2d2nd.m>)
herunter!
 - ▶ Erweitern Sie Ihre Funktion zur Inversion mit Regularisierung um die Verwendung von \tilde{C} statt \tilde{I} !
 - ▶ Führen Sie die letzten Berechnung noch einmal mit Smoothness Constraints aus!

Algebraische Rekonstruktion

Idee

Die Lösung großer Probleme ist bei Verwendung des Least-Squares-Ansatzes oder der Singulärwertzerlegung mit riesigem Rechenaufwand verbunden. Es bieten sich iterative Lösungsmethoden an. Grundlegende Idee hinter der algebraischen Rekonstruktionstechnik ist die iterative Verkleinerung des Residuums.

Jede Zeile des Gleichungssystems

$$\tilde{A}\vec{x} = \vec{y}$$

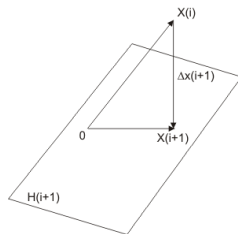
repräsentiert eine Hyperebenengleichung. Beginnend mit einem Startmodell \vec{x}^0 werden alle Modelle \vec{x}^i in die Ebene mit der $(i+1)$ -ten Gleichung $\sum_j a_{i+1,j} x_j = y_{i+1}$ projiziert, wobei $a_{i+1,j}$ die Elemente der $(i+1)$ -ten Zeile in der Matrix \tilde{A} meinen. Idealerweise schneiden sich alle Ebenen in einem Punkt, der als Lösung des Gleichungssystems gilt. Ist die Lösung des Systems nicht eindeutig, konvergiert der Algorithmus gegen die dem Startmodell nächstgelegene.

Kaczmarz-Algorithmus

Die Projektion der i -ten Inversionslösung \vec{x}^i in die $(i+1)$ -te Ebene lässt sich formulieren als:

$$\Delta \vec{x}^{i+1} = \frac{-\vec{a}_{i+1}^T \vec{x}^i + y_{i+1}}{\vec{a}_{i+1}^T \vec{a}_{i+1}} \vec{a}_{i+1}, \quad (28)$$

wobei $\vec{a}_{i+1}^T = \tilde{A}_{(i+1,:)}$ die $(i+1)$ -te Zeile der Matrix \tilde{A} ist.



ART-Algorithmus

Der ART (Algebraic Reconstruction Technique)-Algorithmus ist eine Variante des Kaczmarz-Algorithmus, die speziell für Tomographie entwickelt wurde. Unter der Annahme, dass in allen Modellzellen ein Weg der Länge 1 zurückgelegt wird, ergibt sich die Summe aller Slownesswerte im Modell \vec{x}^i entlang des Weges $i+1$ gerade zu $\vec{a}_{i+1}^T \vec{x}^i = q_{i+1}$. Damit gibt die Differenz $q_{i+1} - y_{i+1}$ den Fehler der Laufzeit des $(i+1)$ -ten Strahls an, $\vec{a}_{i+1}^T \vec{a}_{i+1}$ wird zur Anzahl der durchlaufenen Zellen bzw. der Nicht-Nulleninträge in \tilde{A} :

$$\vec{x}^{i+1} = \vec{x}^i + \Delta \vec{x}^{i+1} = \vec{x}^i - \frac{q_{i+1} - y_{i+1}}{N_{i+1}}. \quad (29)$$

Der Fehler in der Gesamtlaufzeit wird also gleichmäßig auf alle getroffenen Zellen verteilt. Bessere Ergebnisse erreicht man durch Einführung einer Wichtung, z.B. anhand von Laufweglängen L_{i+1} :

$$\Delta x_j^{i+1} = \frac{y_{i+1}}{L_{i+1}} - \frac{q_{i+1}}{N_{i+1}}. \quad (30)$$

- ▶ ART-Algorithmus ohne Wichtung zum Herunterladen:
<http://www.geophysik.tu-freiberg.de/assets/media/Personal/franke/uebungen/inv/art2.m>

Der SIRT-Algorithmus

Der SIRT (Simultaneous Iterative Reconstruction Technique)-Algorithmus ist eine Verbesserung des ART-Algorithmus, die genauere Ergebnisse unter größerem Rechenaufwand liefert. Es werden alle Daten gleichzeitig abgearbeitet, die einzelnen Updates werden pro Modellparameter gemittelt:

$$\Delta x_j = \frac{1}{N_j} \sum_i \frac{y_i}{L_i} - \frac{q_i}{N_j}. \quad (31)$$

- ▶ SIRT-Algorithmus ohne Wichtung zum Herunterladen:
<http://www.geophysik.tu-freiberg.de/assets/media/Personal/franke/uebungen/inv/sirt2.m>

Aufgabe:

- ▶ Invertieren Sie die synthetischen Tomographiedaten aus Aufgabe 9 mittels ART- und SIRT-Algorithmus!
- ▶ Benutzen Sie die Algorithmen mit und ohne Wichtung!

Zusammenfassung lineare Probleme

Lineare Probleme lassen sich darstellen als $\tilde{F} \cdot \vec{m} = \vec{d}$. Ansatz für eine Inversionsrechnung ist die Minimierung des Residuums, daraus folgen die Normalgleichungen. Folgende Lösungsansätze sind möglich:

- ▶ Least-Squares-Lösungen der Normalgleichungen neigen zu Oszillationen, die durch Regularisierung gedämpft werden können.
- ▶ Mittels Singulärwertzerlegung können eine verallgemeinerte Inverse, Modell- und Datenauflosungsmatrizen formuliert werden.
- ▶ ART- und SIRT-Algorithmen sparen bei großen Problemen erheblich Rechenaufwand.

Aber: Nur wenige Probleme sind wirklich linear!

Nichtlineare Inversion

Taylorreihenentwicklung

Wir erinnern uns an die allgemeine Formulierung inverser Probleme:

$$F(\vec{m}) = \vec{d}. \quad (32)$$

Mittels Taylorreihenentwicklung lassen sich nicht-lineare Probleme linearisieren:

$$F(\vec{m} + \Delta\vec{m}) = F(\vec{m}) + \frac{\partial F(\vec{m})}{\partial \vec{m}} \Delta\vec{m} + \dots, \quad (33)$$

wobei $\tilde{J} = \frac{\partial F(\vec{m})}{\partial \vec{m}}$ die Jacobi-Matrix ist. Üblich ist auch die Bezeichnung Sensitivitätsmatrix \tilde{S} : $\tilde{S} = \tilde{J}$.

Für das Modell $\vec{m}^{k+1} = \vec{m}^k + \Delta \vec{m}^k$ und $F(\vec{m}^{k+1}) = \vec{d}$ lässt sich Gleichung (33) wie folgt formulieren:

$$\tilde{S}^k \Delta \vec{m}^k = \vec{d} - F(\vec{m}^k). \quad (34)$$

Berechnung der Sensitivitäten

- ▶ Analytisch (nur für einfache Modellgeometrien möglich)
- ▶ DC-Vorwärtsmodellierung (Sensitivitätstheorem)
- ▶ Modellierung der Sensitivitäten
- ▶ Update-Mechanismen (z.B. Broyden)
- ▶ Perturbationsmethode

$$F(\vec{m}), F(\vec{m} + \Delta\vec{m}) \Rightarrow S = \frac{F(\vec{m} + \Delta\vec{m}) - F(\vec{m})}{\Delta\vec{m}} \quad (35)$$

12. Aufgabe: Widerstandstiefensondierung

1. Laden Sie die Funktion `dcfwdf.m` (<http://www.geophysik.tu-freiberg.de/assets/media/Personal/franke/uebungen/inv/dcfwdf.m>) zur geoelektrischen 1D-Vorwärtsrechnung herunter!
2. Erzeugen Sie das Modell eines beliebigen 3-Schichtfalls! Berechnen Sie die Modellantwort für die Elektrodenabstände $AB/2 = (1, 1.3, 1.8, 2.4, 3.2, 4.2, 5.6, 7.5, 10, 13, 18, 24, 32, 42, 56, 75)$ m und versehen Sie die Daten mit zufälligem Rauschen!
3. Berechnen Sie die Sensitivitätsmatrix \tilde{S} spaltenweise über die Änderung jedes einzelnen Modellparameters aus ungestörter Antwort und Änderung der Modellantwort!
4. Stellen Sie die Sensitivitätsmatrix dar und diskutieren Sie diese!

13. Aufgabe: DC-1D-Inversion

1. Errechnen Sie das erste Modellupdate mit Ihrer bereits vorhandenen Funktion zur regularisierten Inversion und aktualisieren Sie das Modell! Optimieren Sie den Regularisierungsparameter per Intuition oder mittels L-Kurven-Kriterium!
2. Beschreiben Sie das Modell, stellen Sie berechnete und gemessene Sondierungskurve dar!
3. Bestimmen Sie dafür die Sensitivitäten, vergleichen Sie mit denen aus Aufgabe 12!
4. Wiederholen Sie die Schritte 1-4!

Belegaufgaben: Lineare Inversion

1. Laden Sie sich die Daten der seismischen Tomographie des Untertagepraktikums 2006 herunter (<http://www.geophysik.tu-freiberg.de/assets/media/Personal/franke/uebungen/inv/tomodata.mat>)!
2. Stellen Sie das Parametermodell und das Überdeckungsschema dar!
3. Berechnen Sie eine mittlere Slowness und nutzen Sie diese als Hintergrundwert und für iterative Verfahren als Startmodell!
4. Erzeugen Sie eine Pseudoinverse mit Rang r und stellen Sie die Modellauflösung dar! Begründen Sie Ihre Wahl von r !
5. Berechnen Sie je ein Modell mit dem Marquardt-Verfahren ($C=I$) und mit Smoothness Constraints! Testen Sie verschiedene Kriterien zur Wahl von λ !
6. Berechnen Sie eine Lösung mittels SIRT-Algorithmus!

Belegaufgaben: Nichtlineare Inversion

1. Laden Sie die im geophysikalischen Praktikum gemessene Sondierungskurve
<http://www.geophysik.tu-freiberg.de/assets/media/Personal/franke/uebungen/inv/sond.dat>)!
2. Stellen Sie die Messwerte graphisch dar und erzeugen Sie ein Modell aus vier Widerständen und drei Schichtmächtigkeiten!
3. Wählen Sie ρ_{oa} , ρ und thk als logarithmierte Werte!
4. Berechnen Sie die Sensitivitätsmatrix für ein homogenes Startmodell und interpretieren Sie diese!
5. Berechnen Sie die Singulärwertzerlegung von S ! Wählen Sie einen Pseudorangang und berechnen Sie die zugehörige Lösung! Iterieren Sie, bis der RMS-Fehler stagniert!
6. Stellen Sie die entsprechende Modellauflösungsmatrix dar!