

Metody inwersyjne w geofizyce

(9)

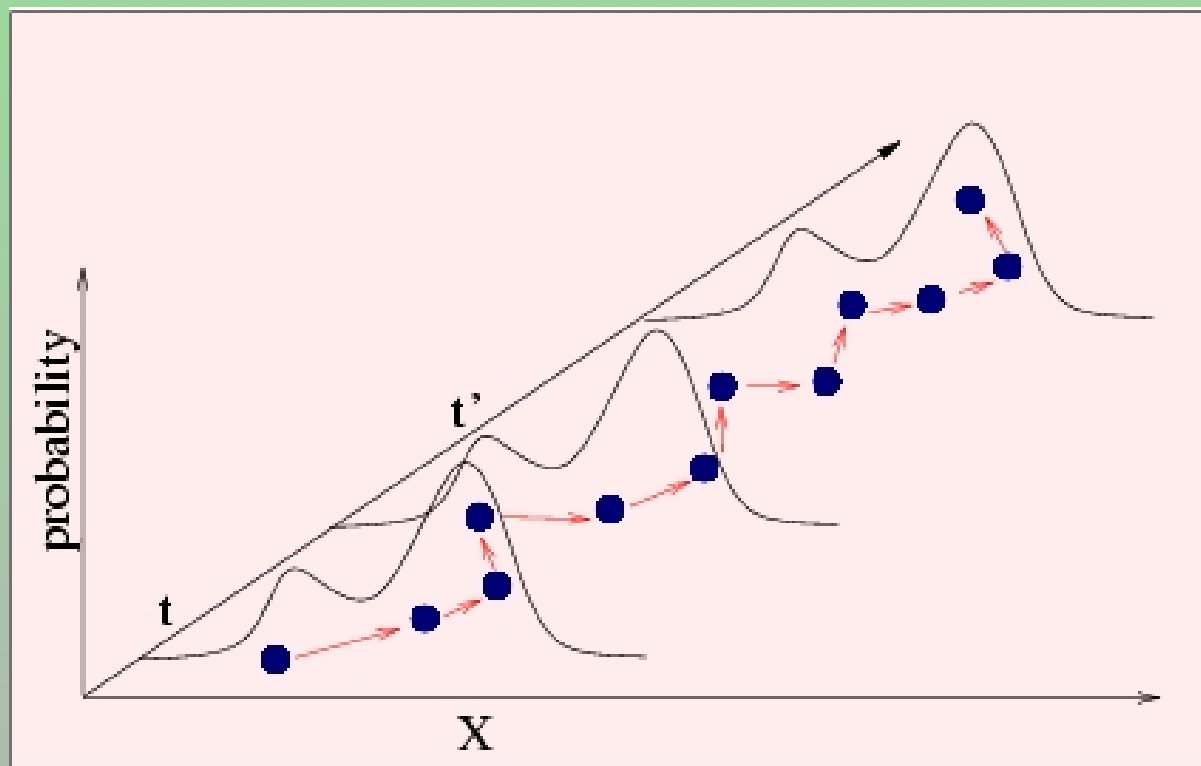
Badanie rozkładu *a posteriori*

1. szukanie modelu najbardziej prawdopodobnego
 2. estymatory punktowe
 3. próbkowanie rozkładu *a posteriori*
(rozkłady warunkowe i brzegowe)
-

Stacjonarny łańcuch Markowa

$$p(x_i) = \sum_k p(x_k) K(x_i; x_k)$$

$$p(x) = \int_{x'} \pi(x') K(x; x') dx'$$

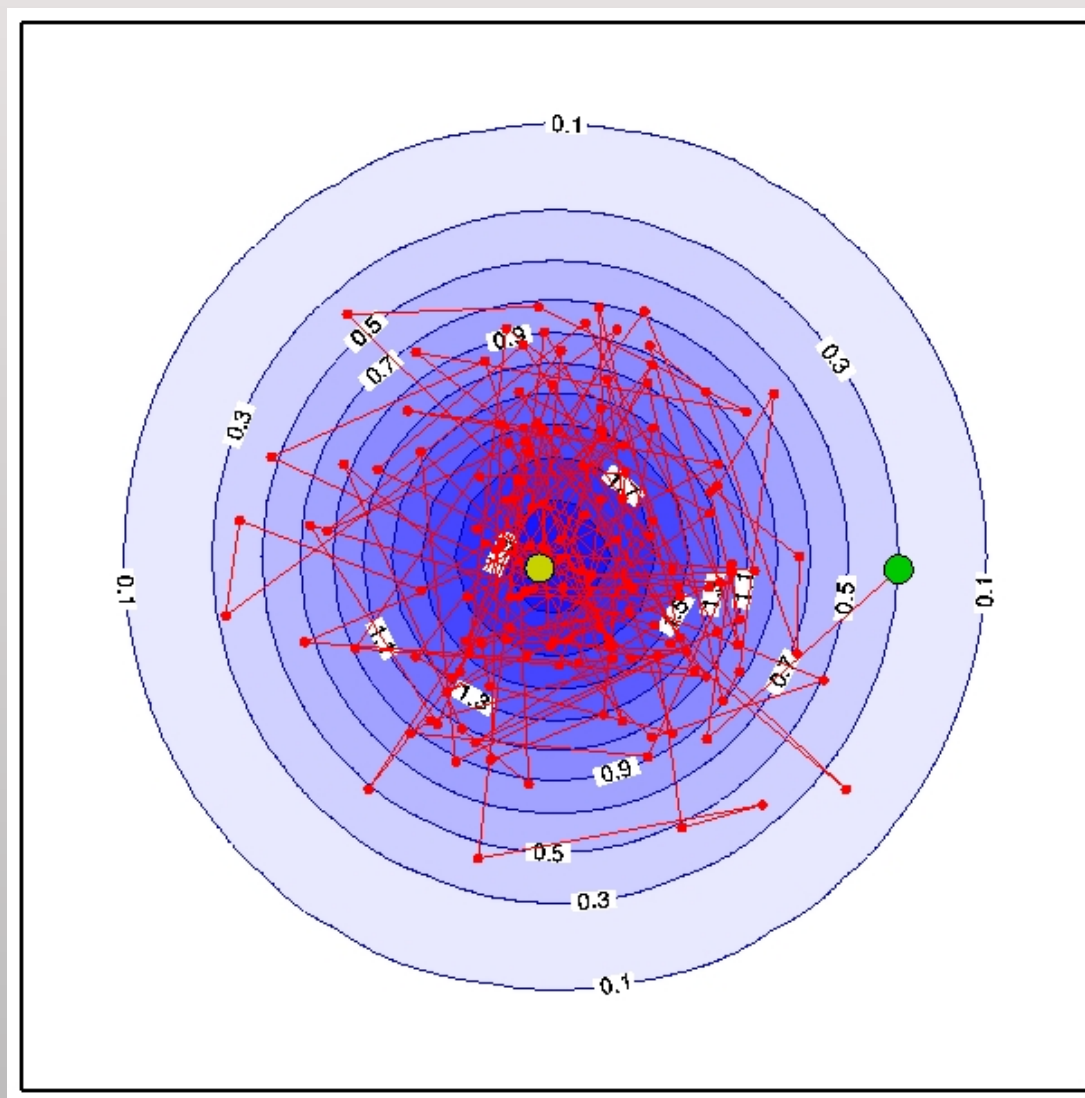


Algorytm Metropolisa-Hastinga

$$x_{i+1} = x_i + \delta x_i$$

$$K(x_{i+1}; x_i) = \min \left\{ 1, \frac{p(x_{i+1})}{p(x_i)} \right\}$$

Algorytm Metropolisa jako *Random Walk*



Model najbardziej prawdopodobny - optymalizacja

♦ szukanie modelu najbardziej prawdopodobnego

$$\mathbf{m}^{ml} : \quad \sigma(\mathbf{m}^{ml}) = \max$$

★ metody gradientowe

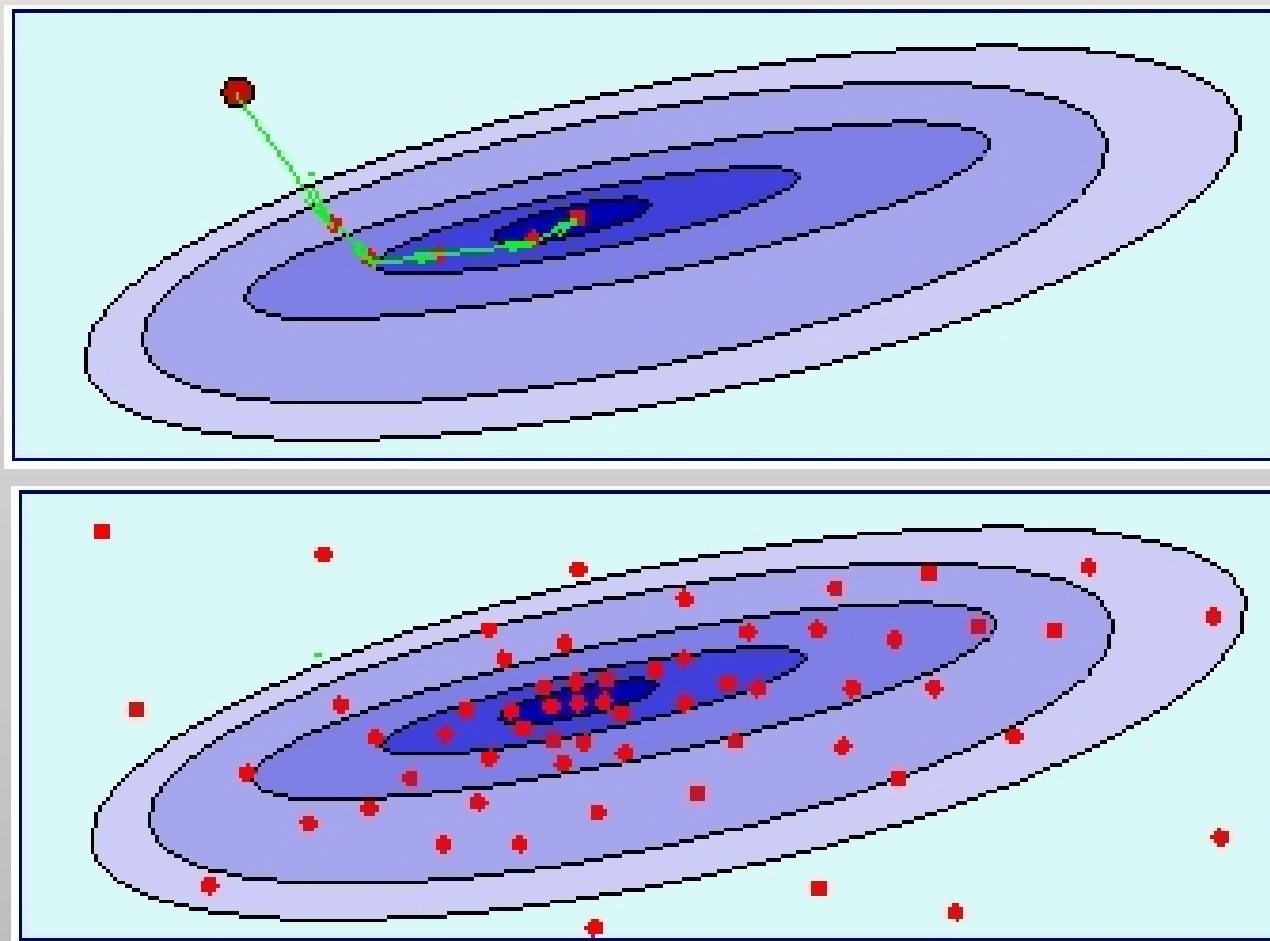
★ metody Monte Carlo

➡ Symulowane wyżarzanie

➡ Algorytm Genetyczny

technika równoważna podejściu optymalizacyjnemu

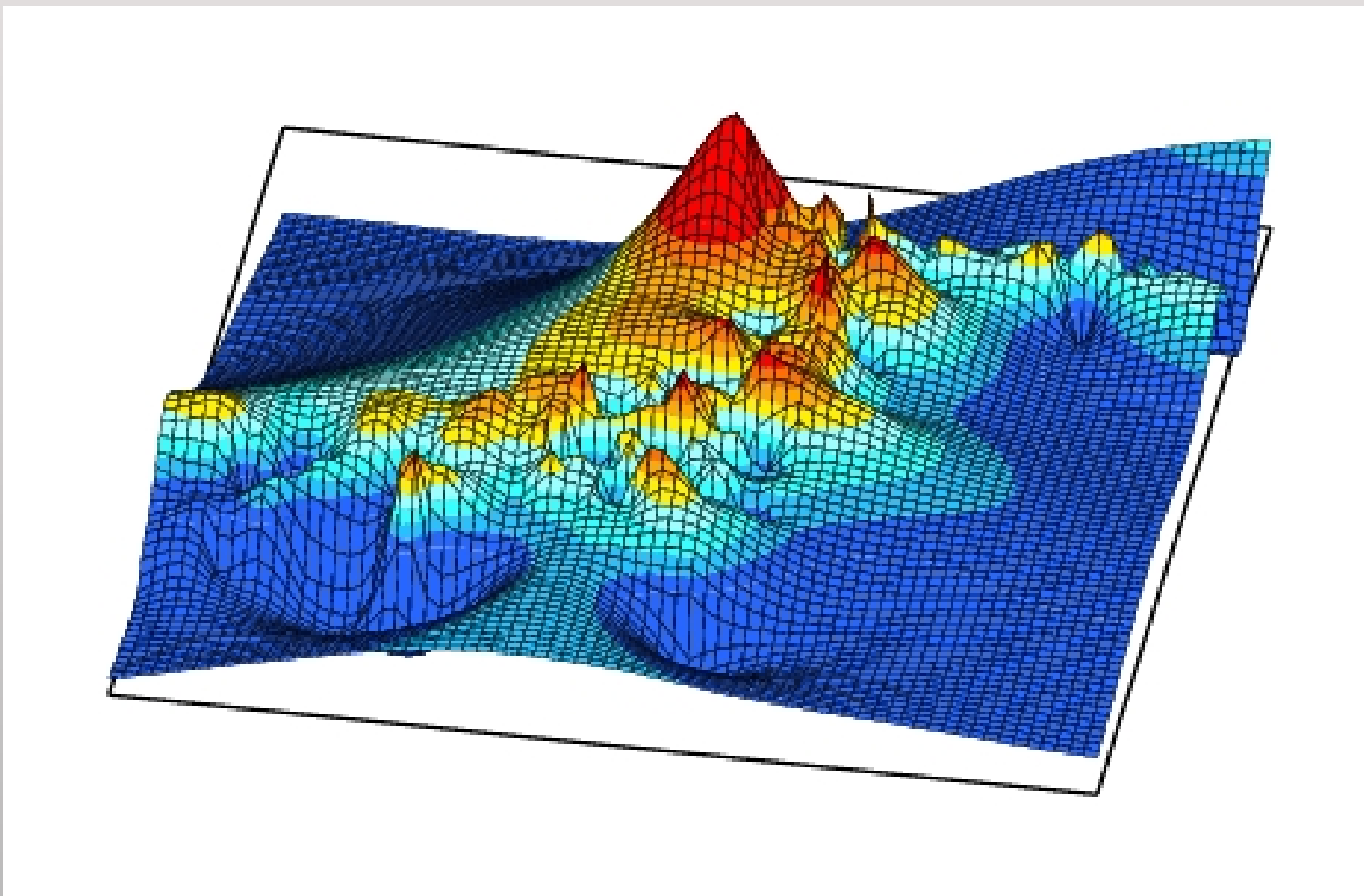
Optymalizacja gradientowa i Monte Carlo



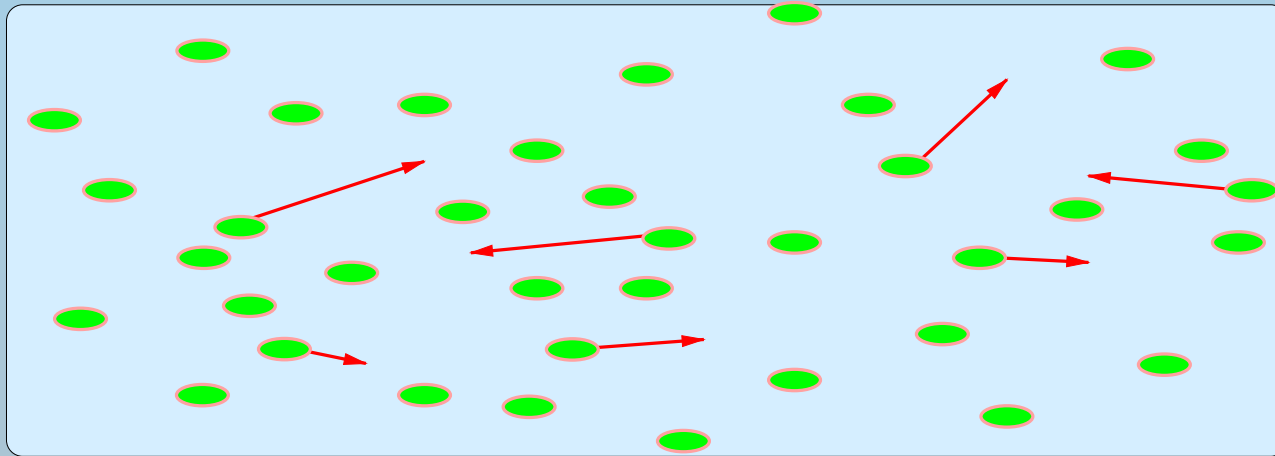
Metoda: preconditioned steepest descent

1. $\mathbf{m}_0$ - dowolny, $\hat{\mathbf{S}}_0 \approx (\mathbf{I} + \mathbf{C}_M \mathbf{G}^t \mathbf{C}_D^{-1} \mathbf{G})^{-1}$
 2. $\gamma_n = \mathbf{C}_M \mathbf{G}^t \mathbf{C}_D^{-1} (G \mathbf{m}_n - \mathbf{d}^{obs}) + (\mathbf{m}_n - \mathbf{m}^{apr})$
 3. $\phi_n = \hat{\mathbf{S}}_0 \gamma_n$
 4. $\mathbf{b}_n = \mathbf{G} \phi_n$
 5. $\mu_n = \frac{\gamma_n^t \mathbf{C}_M^{-1} \phi_n}{\phi_n^t \mathbf{C}_M^{-1} \phi_n + \mathbf{b}_n^t \mathbf{C}_D \mathbf{b}_n}$
 6. $\mathbf{m}_{n+1} = \mathbf{m}_n - \mu_n \phi_n$
-

Optymalizacja gradientowa - ograniczenia



System z wieloma stopniami swobody



Roztopiony metal, skały, itp:

$$1\text{m}^3 : N \approx 10^{21}$$

Jak opisać taki układ ??? ($\vec{r}_i, \vec{v}_i$)

Podójście statystyczne

- ♦ Interesują nas na ogół *makroskopiczne* wielkości: temperatura, gęstość, lepkość, itp.
- ♦ Wiele różnych *mikroskopowych* stanów odpowiada tej samej wielkości makroskopowej
- ♦ Równowaga termodynamiczna: *stan makroskopowy nie zmienia się w czasie* jednakże stany mikroskopowe - *tak*

Termodynamika równowagowa

Rozkład Boltzmana (kanoniczny)

$$p(C) = \frac{1}{Z} \exp \left(-\frac{E(C)}{kT} \right)$$

E - energy of a given state

T - temperature

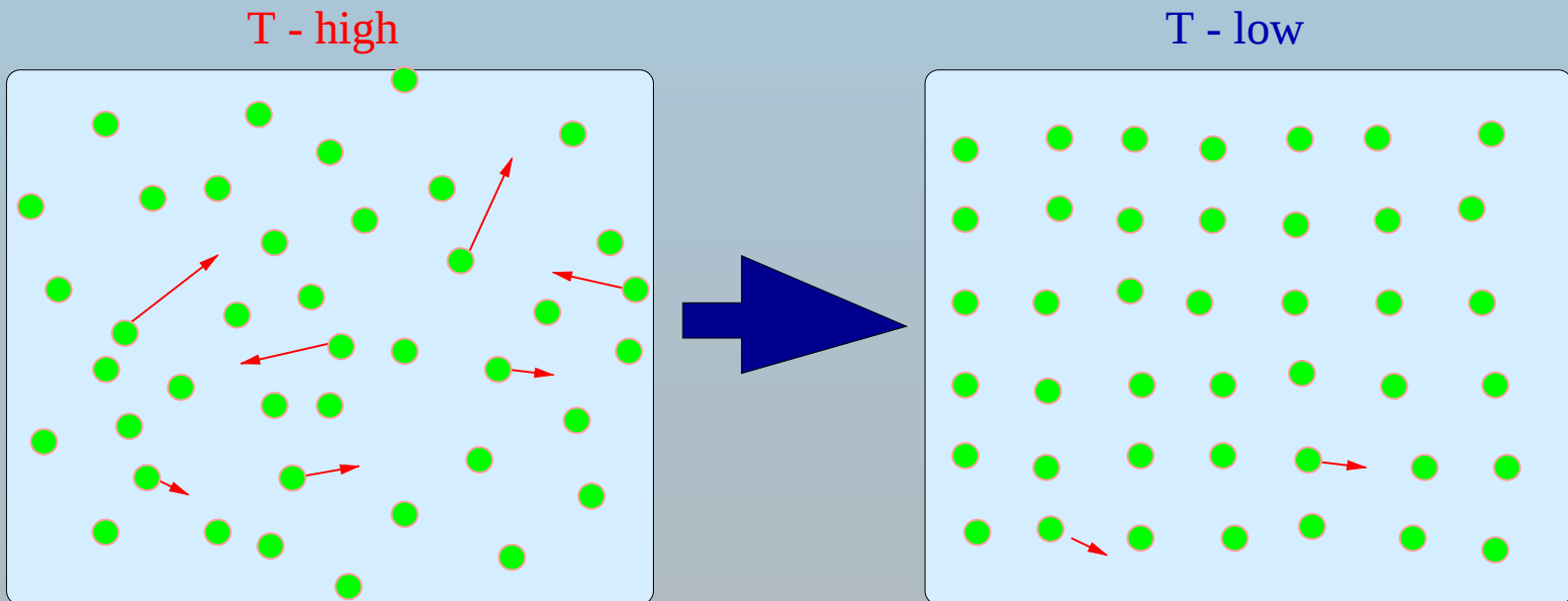
$$Z(T, M, \dots) = \sum_C \exp \left(-\frac{E_i}{kT} \right)$$

prawdopodobieństwo realizacji stanu makroskopowego
przez dany stan mikroskopowy C

Proces schładzania

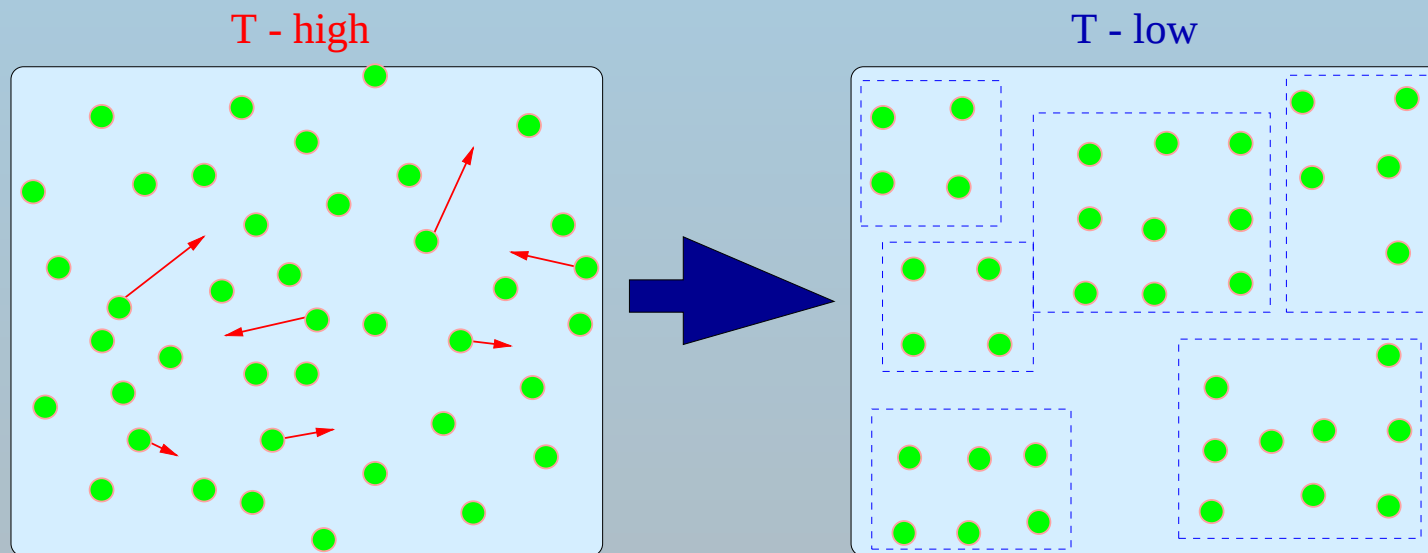
schładzanie powolne

Proces schładzania - system zdąża do stanu o minimum energii wewnętrznej
- ruchy termiczne zostają “zamrożone”



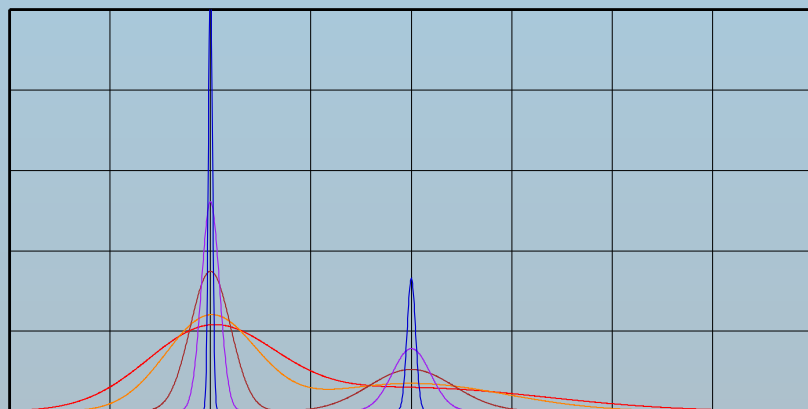
Proces schładzania

szybkie schładzanie



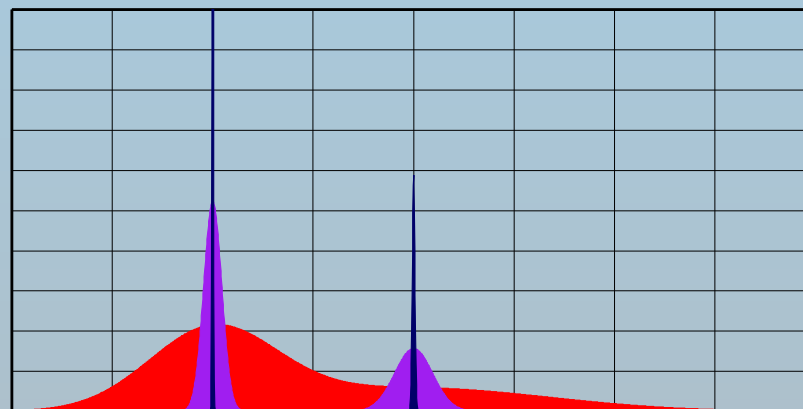
Proces schładzania - zmiany w rozkładzie Boltzmannna

Cooling system



States C

Cooling system

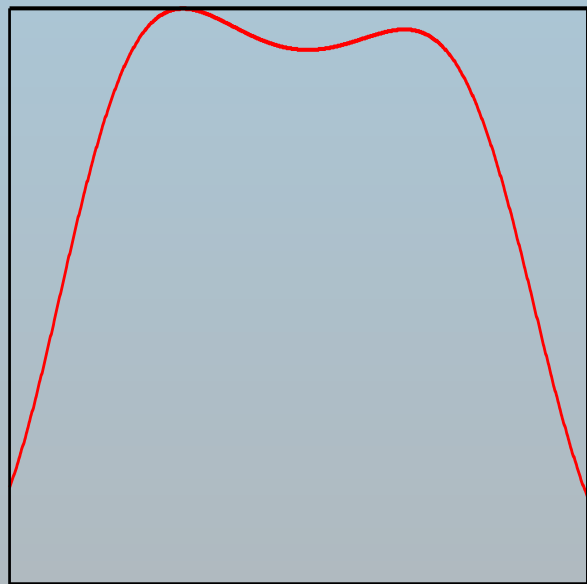


States C

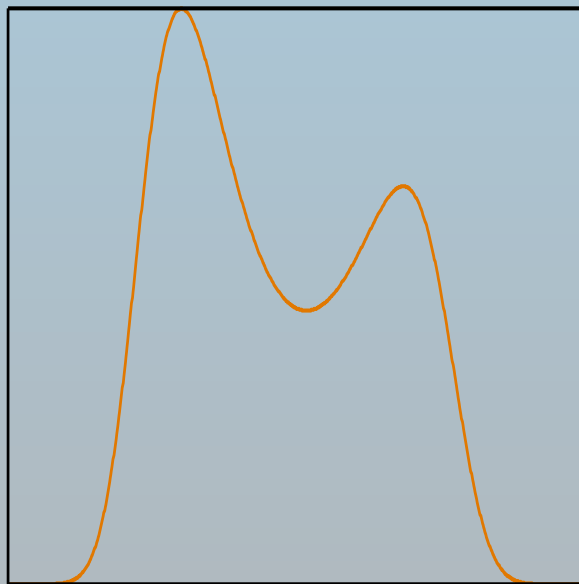
Proces schładzania

ewolucja rozkładu Boltzmana

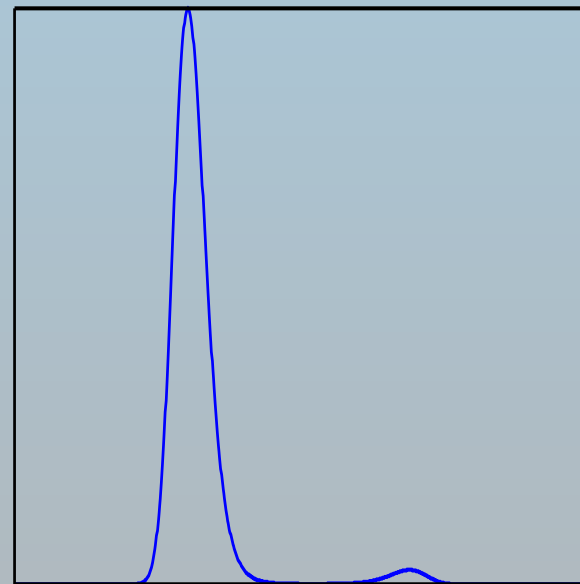
$T=10$



$T=1$

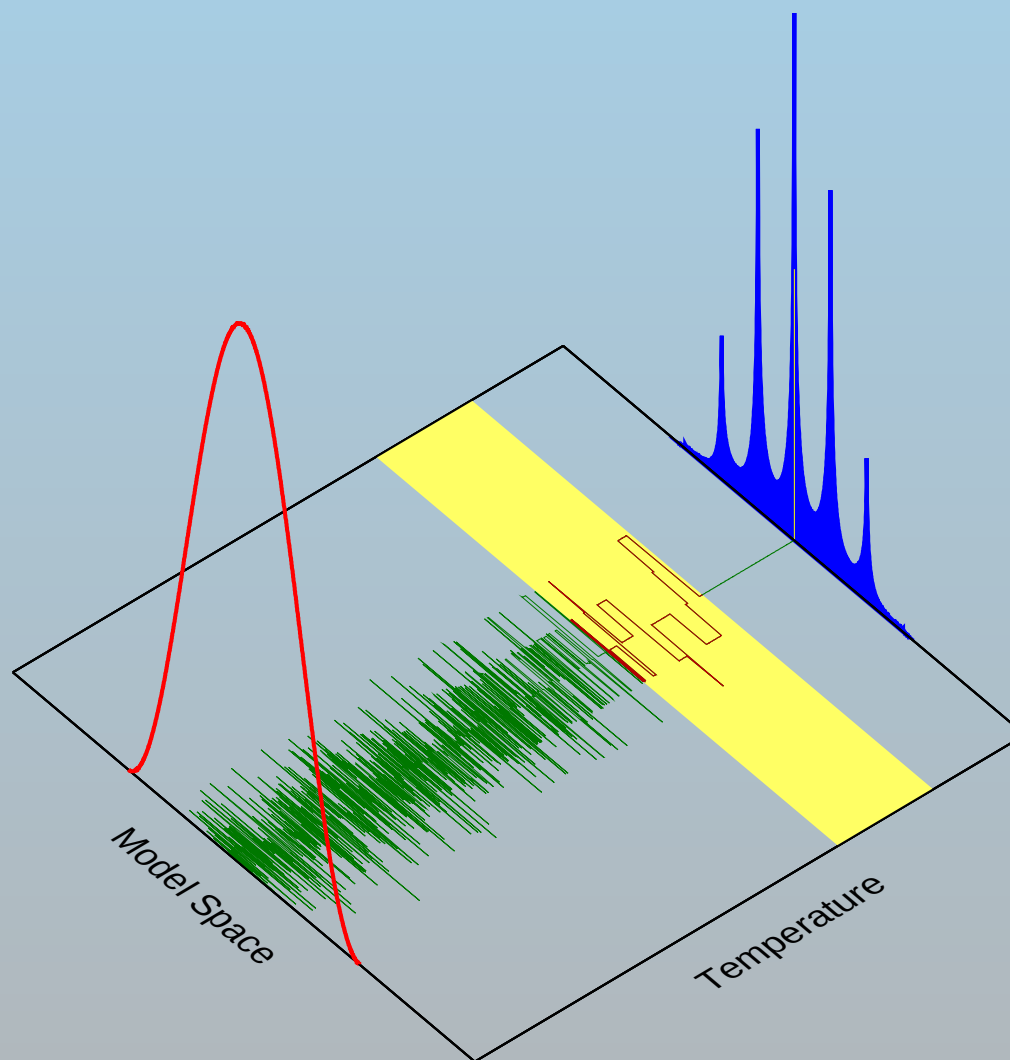


$T=0.1$



Proces schładzania:

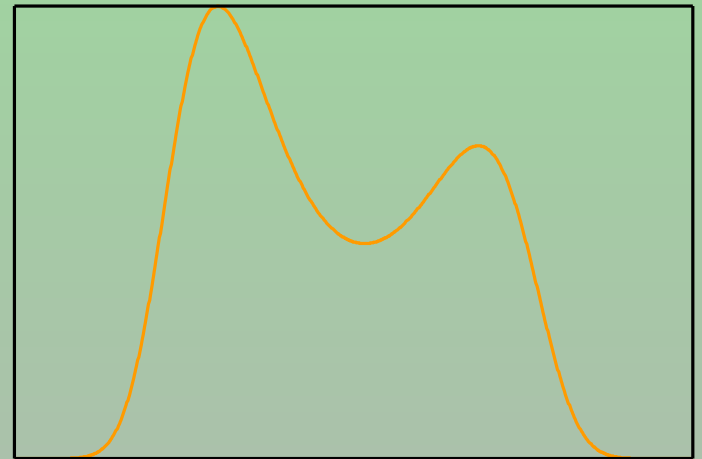
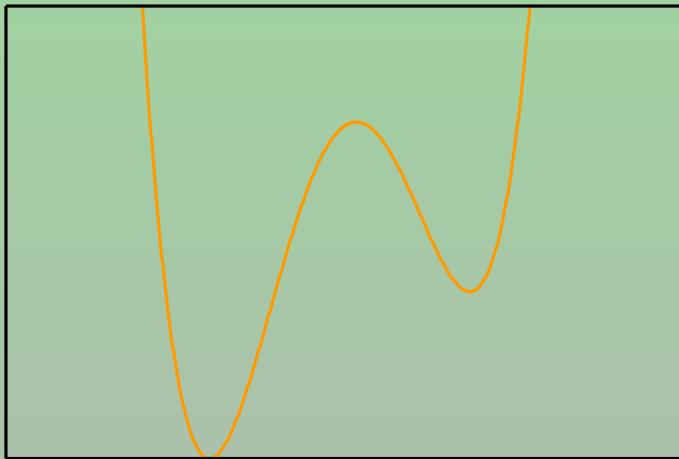
krystalizacja



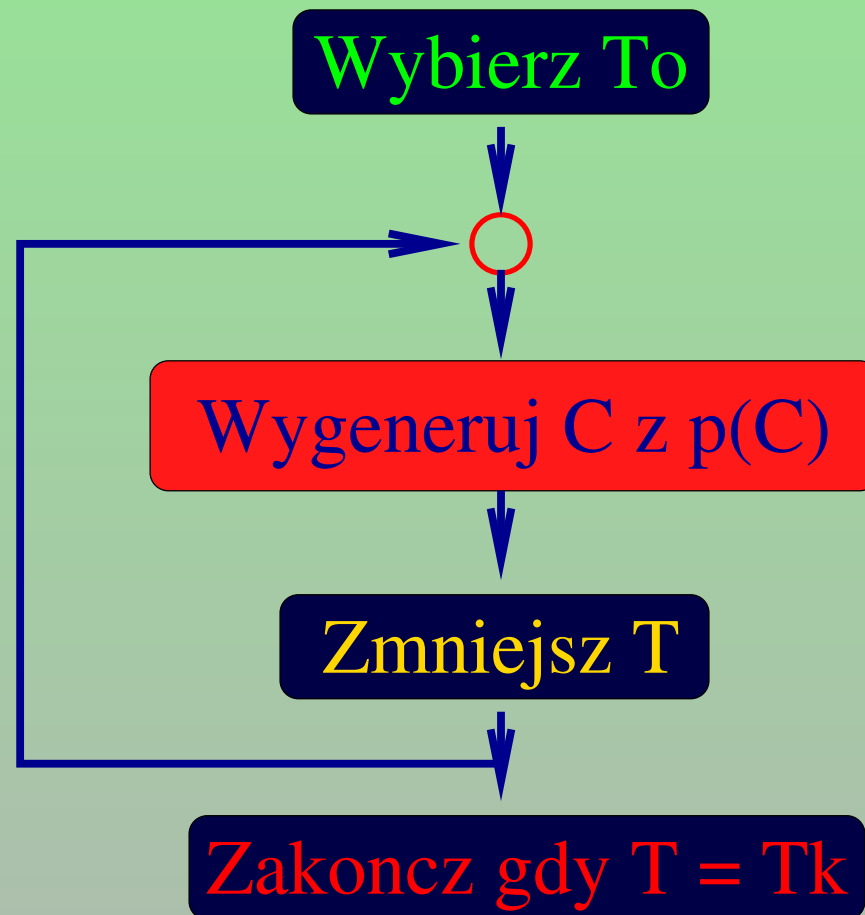
Symulowane schładzanie - optymalizacja

Szukamy absolutnego minimum dodatniej funkcji $S(\mathbf{m}) > 0$

$$S(\mathbf{m}) \implies e^{-\frac{S(\mathbf{m})}{T}}$$

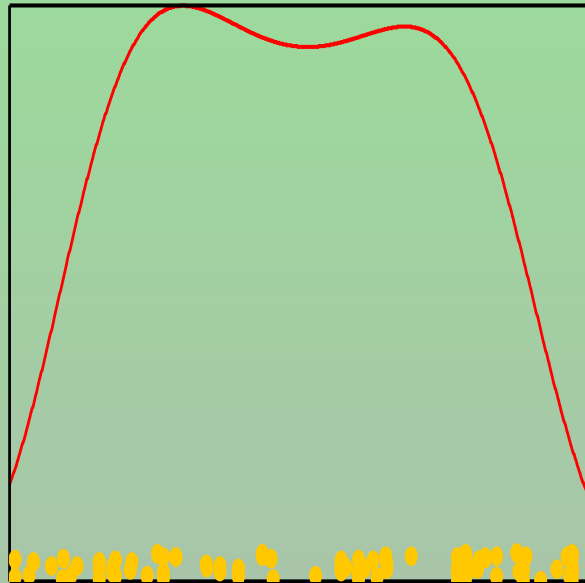


Algorytmy typu **Simulated Annealing**

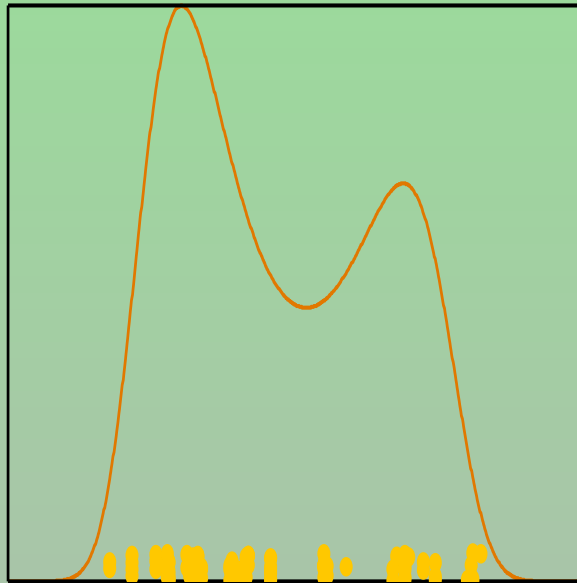


Generowane próbki

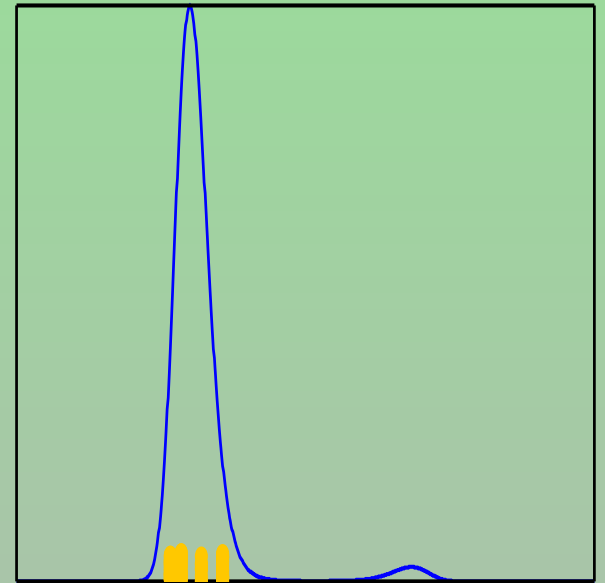
$T=10$



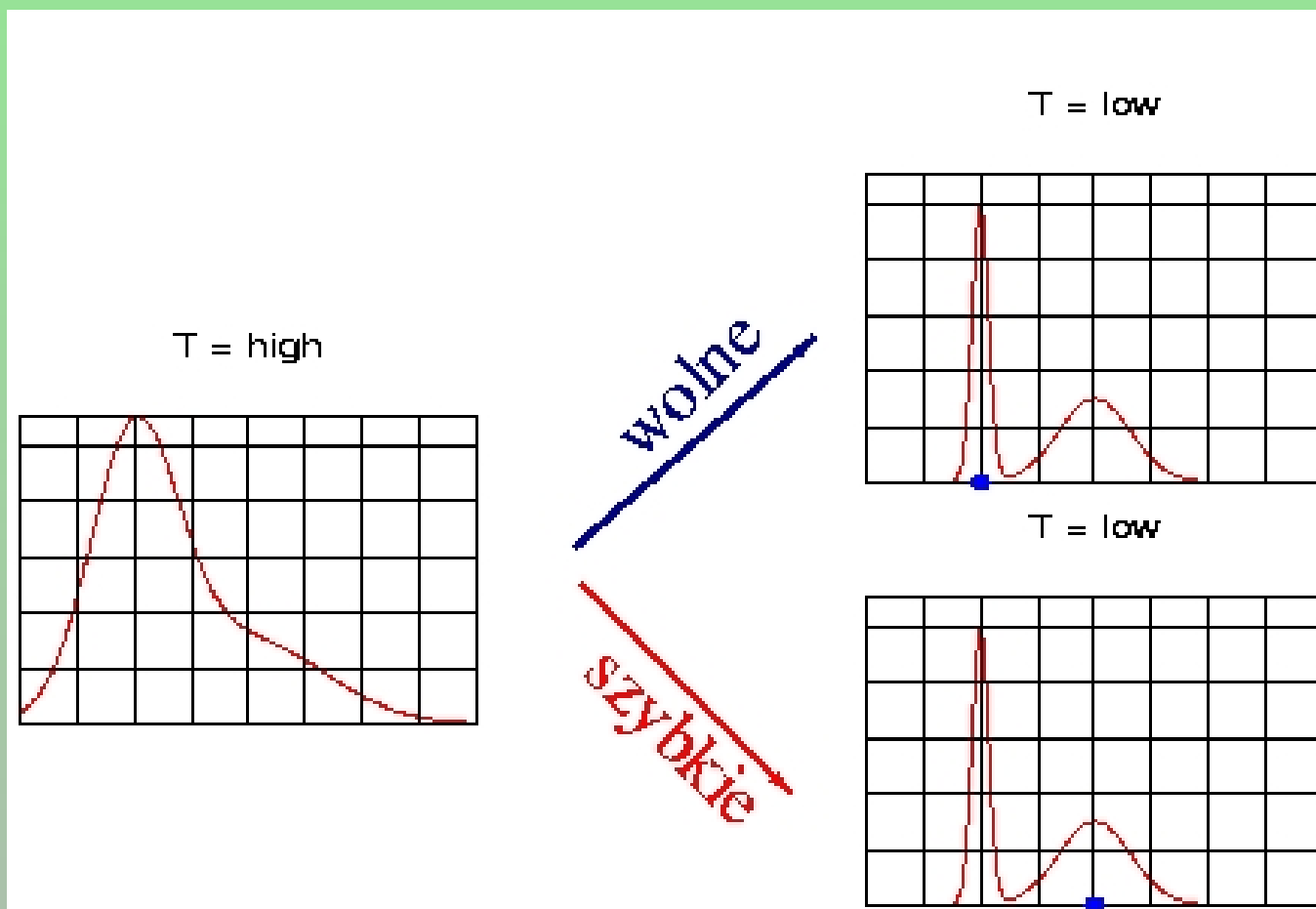
$T=1$



$T=0.1$



Stan podstawowy i stany metatrwałe



- ♦ Utwórz rozkład “Boltzmanowski” $p(\mathbf{m}, T) = \exp(-S(\mathbf{m})/T)$
- ♦ Wybierz T_0 , i model początkowy $\mathbf{m}^\alpha$ i oceń go

$$p_\alpha = p(\mathbf{m}^\alpha, T_0)$$

- ♦ Dla danej temperatury T_k wylosuj $\mathbf{m}^{\alpha+1}$ z $p(\mathbf{m}, T_k)$

★ wylosuj próbkę testową $\mathbf{m}^\beta$: $\mathbf{m}^\beta = \mathbf{m}^\alpha + \delta \mathbf{m}$

★ oceń $\mathbf{m}^\beta$: $p_\beta = p(\mathbf{m}^\beta, T_k)$

★ Utwóź $\mathbf{m}^{\alpha+1}$

zaakceptuj $\mathbf{m}^\beta$ z prawdopodobieństwem $p = \min(1, p_\beta/p_\alpha)$

$$\mathbf{m}^{\alpha+1} = \mathbf{m}^\beta$$

jeśli $\mathbf{m}^\beta$ odrzucona duplikuj stan obecny

$$\mathbf{m}^{\alpha+1} = \mathbf{m}^\alpha$$

- ♦ Zmniejsz temperaturę

$$T_{k+1} = f(T_k)$$

- ♦ Powtarzaj aż do osiągnięcia końcowej temperatury

Algorytm SA przykład

```
while( T > Tf)      /* decrease T loop */
{
    nc =ceil( p2+p3*exp(-(double)k/(double)sa->n));
    if(nc<=1) nc=1;
    ++k;

    for(l=0;l<nc;l++) /* T=const loop */
    {

        for(j=0;j<N;j++)      /* generate new sample */
        {
            u=SArandval(0,1);      /* modified VFSA */
            x= fabs(2*u -1);
            z= T*( pow(1+1/T,x) - 1);

            if(u >=0.5)
                p=mi[j] + z * (mu[j]-mi[j]);
            else
```

```

    p= mi[j] - z * (mi[j]-ml[j]);

mf[j]=p;
}

tt= (*fun)(mf);    /* evaluate */
    e = tt-ta;
z=exp(-e/T);
u=SArandval(0,1);

if( e<0 || z > u) /* accept */
{
    ta=tt;
    mc = mi;
    mi = mf;
    mf=mc;

if(ta < ts) /* keep the best */
{ ts=ta;
    for(i=0;i < N; i++)
        ms[i]=mi[i];
}
}

```

```

}

    } /* End of T=const loop */

    To=T;      /* decrease T (VFSA scheme) */
    z=Tc*pow((double) (k),di);
    T = Ti*exp(-z);

    if(sa->pf>0) /* messages to STD_ERR */
    { if(k%sa->pf==0)
        fprintf(stderr," VFSA:  T = %.2e    dT = %.2e    iter: %-6d    nc: %d\n",
            T, dT, iter, nc);
    }

} /* End  of cooling (T) loop */

```

Termodynamika - Optymalizacja/Inwersja

analogie

Termodynamika	Optymalizacja
wiele stopni swobody	optymalizacja wielu parametrowa
rozkład Boltzmana	rozkład <i>a posteriori</i>
energia	niedopasowanie
stan podstawowy	globalne maksimum
możliwe stany metatrwałe	lokalne maksima
Schładzanie wymaga by układ był w stanie równowagi termodynamicznej	