

Cornelia Tauchner

Effizienz stochastischer Methoden zur Bestimmung von Modellunsicherheiten

Masterarbeit

Montanuniversität Leoben

Lehrstuhl für Angewandte Geophysik

Betreuer: Bleibinhaus, Florian, Univ.-Prof. Dipl.-Geophys. Dr.rer.nat.

Leoben, November 2016

Ich erkläre an Eides statt, dass ich diese Arbeit selbstständig verfasst, andere als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel nicht benutzt und mich auch sonst keiner unerlaubten Hilfsmittel bedient habe.

Leoben, November 2016

Unterschrift

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei jenen Personen bedanken, welche mich bei der Erstellung dieser Arbeit tatkräftig unterstützt haben:

Zuerst bei Univ.-Prof. Dipl.-Geophys. Dr.rer.nat. Florian Bleibinhaus, für die Unterstützung und Begutachtung meiner Arbeit.

Weiters möchte ich mich bei dem FWF bedanken, da diese Arbeit aus den Projektmitteln des Forschungsprojektes: "*Probabilistic uncertainty estimation for 2D/3D refraction seismic travelttime tomography*" (P23748) finanziert wurde.

Dank gilt auch all meinen Kollegen am Lehrstuhl für Geophysik, welche mir in den letzten Monaten mit Rat und Tat zur Seite standen. Ob kleine Fehler in meinen Codes oder organisatorische Schwierigkeiten, ich kann immer auf ihre Hilfe zählen.

Danke, meine lieben Studienkollegen und Freunde, dass ihr mit mir gelernt, gelacht und gespielt habt. Ihr habt meine Studienzeit zu etwas Besonderem gemacht!

Ganz besonders möchte ich mich auch bei meiner Familie für großartige mentale und finanzielle Unterstützung bedanken. Egal wie groß eine Krise auch ist, ich kann mich immer darauf verlassen, dass meine Lieben hinter mir stehen.

Ein ganz herzliches Dankeschön gilt auch meinem Freund Matthias Hofinger, der mich liebevoll unterstützt und motiviert. Du bist wundervoll, danke, dass ich immer auf dich zählen kann!

Abstract

The Markov-Chain-Monte-Carlo method, McMC, adds small random perturbations to the latest model, in favor of searching for models with a high likelihood of fitting the observed data. If the likelihood of a model is already high, in most cases a random perturbation causes a decrease in likelihood. This results in a slow progress of the chain. In this work compensations for these perturbations are introduced in order to increase acceptance rates and step length. These compensations are based on the resolution matrix and are done in slowness. In order to achieve good scaling, different scaling factors of the resolution matrix are tested. Due to computational reasons, all these tests are performed outside a Markov chain. A previous study extracted 500 models from a Markov chain. Although statistic analysis of these models, done as part of this study, reveals strong correlation, this test population is used because of computational reasons. Overall up to 80% of the models can be improved with those compensations. In general, small scaling factors produce a high amount of models with very small improvements. With increasing size of the scaling factor the value of improvements enlarges, but the overall number of enhanced models decreases. Small scaling factors provide a constant result for any resolution of the model parameters. With decreasing resolution compensations with increasing size tend to produce better results. This study acts as a guideline for adding recommended compensations to McMC method.

Ausgehend von einem Startmodell fügt die Markov-Kette-Monte-Carlo Methode, McMC, kleine, zufällige Perturbationen an einer Stelle im Modell hinzu. Sie tastet den Modellraum auf der Suche nach Modellen mit hoher Übereinstimmung mit den beobachteten Daten ab. Bei Modellen mit bereits großer Kongruenz ist eine Verbesserung durch eine zufällige Perturbation unwahrscheinlich. Das führt zu einer Verlangsamung der Kette. Im Zuge dieser Arbeit werden Kompensationen dieser Perturbationen untersucht, mit dem Ziel, Akzeptanzrate und Schrittgröße zu erhöhen. Die Kompensationen basieren auf der Auflösungsmatrix und werden in Langsamkeit durchgeführt. Um eine gute Skalierung zu erreichen, werden unterschiedliche Skalierungsfaktoren für die Auflösungsmatrix getestet. Aufgrund der hohen Rechenzeit einer Markov Kette werden diese Tests außerhalb einer Kette durchgeführt. Dafür wurden in einer Vorstudie aus einem McMC-Verfahren 500 Modelle als Testpopulation entnommen. Obwohl die in dieser Arbeit durchgeführten statistischen Untersuchungen der Testpopulation auf eine starke Korrelation hinweisen, werden diese Modelle aufgrund der Zeiteffektivität verwendet. Im Allgemeinen kann eine deutliche Verbesserung von bis zu 80% gegenüber Perturbationen ohne Kompensationen erreicht werden. Mit kleinen Skalierungsfaktoren können nur kleine Verbesserungen erzielt werden. Mit zunehmendem Skalierungsfaktor kann der Betrag der Verbesserung deutlich erhöht werden, zugleich tritt ein gegenläufiger Trend auf, welcher die Gesamtanzahl der verbesserten Modelle sinken lässt. Kleinere Kompensationen liefern zudem unabhängig von der Auflösung ein konstantes Ergebnis. Mit abnehmender Auflösung der Modellparameter erzielen jedoch große Kompensationen zunehmend bessere Ergebnisse. Diese Studie dient als Richtlinie, um die empfohlenen Kompensationen in das McMC-Verfahren zu integrieren.

Inhaltsverzeichnis

Abstract	iv
1 Einleitung	1
2 Inversion	3
2.1 Lineare Inversion	3
2.1.1 Gemischt bestimmte Probleme und Dämpfungstest	4
2.1.2 Auflösungsmatrix	6
2.2 Nichtlineare Inversion	7
2.2.1 Markov Kette Monte Carlo	8
3 Versuchsanordnung	12
3.1 Synthetischer Datensatz	12
3.2 Dämpfungstest	14
3.3 Auflösungsmatrix	15
4 Statistische Analyse der Testpopulation	16
4.1 Standardabweichung	16
4.2 L_2 Norm	19
4.3 Ergebnisse der Statistik	22
5 Modelperturbationen	23
5.1 Funktionsweise der Perturbation	23
5.2 A Priori Information und Perturbationsgröße	26
5.3 Perturbationskompensationen	26

Inhaltsverzeichnis

5.4	Faktortest	28
5.4.1	Skalierungstest für $ u = 0,5$	30
5.4.2	Skalierungstest für $ u = 1$	34
5.4.3	Skalierungstest für $ u = 1,5$	38
5.4.4	Erkenntnisse der Skalierungstests	42
5.5	Vergleich der Kompensationen in unterschiedlichen Tiefen	42
5.5.1	Tiefenstufe 1	43
5.5.2	Tiefenstufe 4	47
5.5.3	Tiefenstufe 7	50
5.5.4	Ergebnisse des Vergleichs der Kompensationen in unterschiedlichen Tiefen	53
6	Diskussion und Ausblick	54
	Literatur	56

Abbildungsverzeichnis

2.1	Schematische Darstellung der linearen Inversion und Modellierung	4
2.2	Schematische Skizze einer Trade-off Kurve [Gubbins (2004)]	6
2.3	Gegenüberstellung der Kostenfunktion $\Phi(m)$ eines linearen und nicht-linearen Problems	7
3.1	Mittelwert Modell	13
3.2	Dämpfungstest	14
3.3	Zeilen der Auflösungsmatrix des mittleren Modells, das Diagonalelement wird durch den roten Punkt dargestellt	15
4.1	Darstellung der Standardabweichung der einzelnen Modellparameter in Langsamkeit s und Geschwindigkeit v . Die Lokationen der Parameter können der Abbildung 3.1 entnommen werden.	17
4.2	Abweichungen an Modellparameter 6	18
4.3	Abweichung an Modellparameter 21	18
4.4	L_2 Entfernung für 270 Modellstützstellen	19
4.5	L_2 Entfernung für 23 Modellparameter	20
4.6	L_2 Entfernungen der 500 Modelle, Berücksichtigung von 23 Modellparameter	21
4.7	v_p -Geschwindigkeitsverteilung des Modells 488	21
5.1	Verteilung von ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $ u = 0,5$	32
5.2	Histogramme der Verteilung ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $ u = 0,5$	33

Abbildungsverzeichnis

5.3	Verteilung von ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $ u = 1$	36
5.4	Histogramme der Verteilung ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $ u = 1$	37
5.5	Verteilung von ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $ u = 1,5$	40
5.6	Histogramme der Verteilung ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $ u = 1,5$	41
5.7	Verteilung von ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $ u = 1$ in der 1. Tiefenstufe	45
5.8	Histogramme der Verteilung ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $ u = 1$ in der 1. Tiefenstufe	46
5.9	Verteilung von ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $ u = 1$ in der 4. Tiefenstufe	48
5.10	Histogramme der Verteilung ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $ u = 1$ in der 4. Tiefenstufe	49
5.11	Verteilung von ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $ u = 1$ in der 7. Tiefenstufe	51
5.12	Histogramme der Verteilung ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $ u = 1$ in der 7. Tiefenstufe	52

1 Einleitung

Inverse Probleme treten bei dem Versuch auf, aus einem Datensatz Modellparameter abzuschätzen. Inversion ist demnach die Suche nach Parametern, welche die beobachteten Daten erklären. Die Lösung solcher Probleme ist niemals trivial, ihre häufige Nichtlinearität führt zu einer großen Herausforderung. Es gibt für diese Probleme unterschiedliche Lösungsansätze, zu denen auch die Markov-Kette-Monte-Carlo Methode, kurz McMC, zählt. Sie sucht in einem Modellraum mit einer infiniten Anzahl an Modellen nach jenen mit hoher Übereinstimmung mit den gemessenen Daten. Dabei werden zufällige Perturbationen an einem ebenfalls zufälligen Modellparameter hinzugefügt. Anhand der Datenübereinstimmung entscheidet der Algorithmus, ob das so entstandene Modell in die Kette aufgenommen wird. Werden die Daten damit besser erklärt als mit dem vorangegangenen, integriert sich das Modell als Kettenglied. Es ist nun neuer Ausgangspunkt für die nächste Zufallsperturbation. So tastet sich die Markov Kette im Modellraum voran. Eine große Schrittweite führt dabei zu großen Veränderungen der Modelle, womit der Modellraum gut untersucht werden kann. Jedoch sinkt die Chance ein neues Kettenglied zu finden. Kleine Perturbationen führen im Gegenzug zu einer besseren Akzeptanzrate, die Schrittgröße ist jedoch klein. Da eine zufällige Perturbation bei Modellen mit guter Datenübereinstimmung in den meisten Fällen zu schlechteren Ergebnissen führt, benötigt dieses Verfahren für jedes neue Kettenglied sehr viel Rechenzeit und -leistung.

In dieser Arbeit werden Kompensationen für diese zufälligen Perturbationen untersucht. Ziel ist es, die Akzeptanzrate neuer Kettenglieder sowie die Schrittgröße durch den Modellraum zu erhöhen. Diese Kompensationen basieren auf dem Konzept der Auflösungsmatrix. Sie ist für jeden Modellparameter definiert und zeigt im Wesentlichen den Einfluss der anderen Parameter auf den aktuellen. Die Größe eines jeden

1 Einleitung

Matrixelementes ist dabei immer kleiner als eins. Jeder Modellparameter, abgesehen von dem bereits zufällig perturbierten, erhält einen, durch das entsprechende Matrixelement skalierten, Anteil der zufälligen Perturbation. Die Schrittgröße der Kette entspricht nun nicht mehr der Größe der Perturbation, sondern ist die Summe aus Perturbation und aller angewandten Kompensationen. Auch die Akzeptanzrate wird durch diese Kompensationen positiv beeinflusst. Diese beiden Eigenschaften bewirken insgesamt eine Effizienzsteigerung der McMC-Methode.

2 Inversion

Die Grundlagen welche in den nachfolgenden Kapitel diskutiert werden, können in folgenden Lehrbüchern nachgeschlagen werden: Menke (1989), Tarantola (1998), Gubbins (2004) und Aster, Borchers und Thurber (2013).

2.1 Lineare Inversion

Die Inversionstheorie ist eine Ansammlung an Methoden, um aus einem Datensatz verwendbare Informationen zu exzerpieren. Dabei entstehen spezifische numerische Lösungen, sogenannte Modelle. Durch Parametrisierung werden jedem Datenpunkt Modellparameter zugeordnet, welche das System möglichst einfach charakterisieren sollen. Um von einem Datensatz zu einem Modell zu gelangen, muss man das inverse Problem lösen. Das Vorwärtsproblem beschreibt den Umkehrschritt dazu.

Das Vorwärtsproblem versucht für gegebene Modellparameter, das zu erwartende Messerergebnis zu berechnen. Das inverse Problem verwendet gemessene Daten um auf Modellparameter zu schließen. In diesem Zusammenhang werden Modellraum und Datenraum unterschieden.

- **Modellraum:** Jedes erdenkliche Modell wird durch einen Punkt in dem Modellraum M beschrieben. Jedes Modell besteht aus einem Satz an Modellparametern m und ist demnach ein Vektor.
- **Datenraum:** Der Raum, welcher alle beobachtbaren Daten enthält, wird mit D notiert. Jeder spezifische Satz von Daten innerhalb von D wird Datenvektor d genannt.

2 Inversion

Abbildung Grafik 2.1 stellt den Zusammenhang zwischen Vorwärts- und inversem Problem in einer idealen, linearen Welt dar. G ist dabei der lineare Vorwärtsoperator der D und M in Beziehung setzt, G^{-g} ein Symbol für den generalisierten Inversionsoperator.

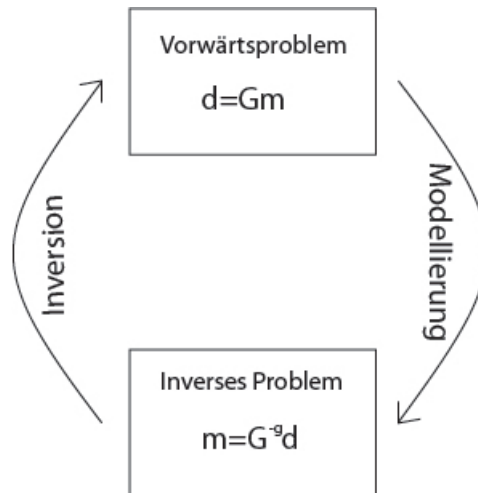


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der linearen Inversion und Modellierung

Unterschiedliche Modelle können die Beobachtungen gleich gut reproduzieren. Die Wahrscheinlichkeit der Modelle die beobachteten Daten, im Rahmen der gegebenen Messgenauigkeit, zu erklären kann in einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion zusammengefasst werden.

2.1.1 Gemischt bestimmte Probleme und Dämpfungstest

Geophysikalische Fragestellungen sind zumeist gemischt bestimmte Probleme. Einige Modellparameter sind überbestimmt, während Parameter in anderen Bereichen des Modells unterbestimmt sind. Im überbestimmten Fall existiert eine Abweichung \vec{e} zwischen beobachteten und kalkulierten Daten. Der gesamte Fehler E ist die Summe dieser einzelnen Vektoren \vec{e} . Für unterbestimmte Modellparameter fehlt es an Informationen um diese exakt zu bestimmen. Es wird für die Bestimmung dieser

2 Inversion

Parameter die Annahme getroffen, dass die Lösung einfach sei. Die Quantifizierung der Einfachheit erfolgt über die Norm N der Lösung. Die Kostenfunktion $\Phi(m)$ (siehe Formel 2.1) zeigt den Zusammenhang zwischen E und N . Mit dem Dämpfungsfaktor θ wird eine Gewichtung zwischen Komplexität des Modells und seinem Residuum vorgenommen. Ist θ groß, entstehen simple Modelle, welche die Daten erklären, aber undetailliert und unpräzise darstellen. Wird θ verkleinert, entstehen komplexe Modelle, welche zu Überschätzung und Fehlinterpretationen der vorhandene Daten tendieren. Ziel des Dämpfungstestes ist es, einen guten Kompromiss zwischen Übereinstimmung mit den Messdaten und der Komplexität des Modells zu finden.

Formel 2.1 zeigt die Kostenfunktion eines gemischt bestimmten Problems, wobei $e^T e$ den die Abweichung zwischen observierten und modellierten Daten darstellt. Der Term $m^T m$ steht für die Größe des Modelles. Oft wird auch $\Delta m^T \Delta m$ verwendet, wobei Δ hier nur für die Variation gegenüber einem „einfachen“ Modells steht. Mit dem Dämpfungsfaktor θ wird diese Komplexität gewichtet.

$$\Phi(m) = E + \theta^2 N = e^T e + \theta^2 m^T m \quad (2.1)$$

In einem Dämpfungstest wird der optimale Gewichtungsfaktor gesucht. Das empirische Verfahren verlangt die Berechnung verschiedener Modelle mit unterschiedlichen Dämpfungsfaktoren θ . Für alle θ werden die Verhältnisse von Fehler E ($e^T e$) und Normierung N ($m^T m$) dargestellt. Es entsteht eine "Trade-Off" Kurve (siehe Abbildung 2.2). Die Komplexität der Modelle steigt und der Fehler wird kleiner, je niedriger θ angenommen wird. Der Faktor der optimalen Dämpfung, ist ein Kompromiss zwischen Komplexität und Übereinstimmung mit den Daten und findet sich am Punkt der stärksten Krümmung oder am Knie der Kurve.

2 Inversion

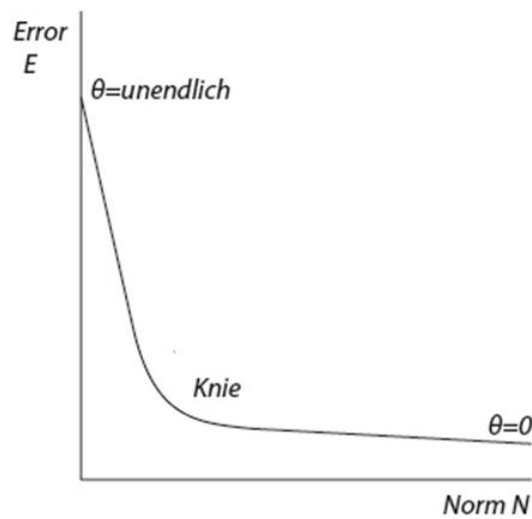


Abbildung 2.2: Schematische Skizze einer Trade-off Kurve [Gubbins (2004)]

2.1.2 Auflösungsmatrix

Ein wichtiges Konzept der Inversion und Kern dieser Arbeit, ist die Auflösungsmatrix R_{pj} . Sie beschreibt die Beziehung des wahren Modells \vec{m}_t zu dem gedämpften, errechneten Modell \vec{m} (siehe Formel 2.2). Bei gedämpften Inversionen ist sie Maß für die Beeinflussung der Lösung durch die Dämpfung. Sie ist eine $n - Parameter \times n - Parameter$ quadratische, symmetrische Matrix.

$$\vec{m} = \sum_{j=1}^n R_{pj}(\vec{m}_t)_j \quad (2.2)$$

Im idealen Fall wäre jedes Diagonalelement $R_{pp} = 1$ und alle Nebendiagonaleinträge $R_{pj} = 0$. Dann entspräche das errechnete dem wahren Modell. In jeder unterbestimmten Fragestellung kann das nicht zutreffen, da einzelne Parameter nur unzureichend aufgelöst sind. Hier entsprechen die Diagonalelemente der Gewichtung des p-ten Modellparameters. Alle Nebendiagonaleinträge, ungleich 0, indizieren einen Zusammenhang des p-ten mit dem j-ten Modellparameter, der durch die Messgeometrie beeinflusst wird.

Generell zeugen Diagonalelemente, deren Wert nahe an eins liegen von einem gut aufgelösten Parameter. Sehr kleine Werte weisen auf eine schlechte Auflösung hin.

2.2 Nichtlineare Inversion

Viele Problemstellungen sind jedoch nichtlinear, wodurch die Komplexität der Kostenfunktion (Kostenfunktion für gemischt bestimmtes Problem siehe Formel 2.1) des Problems zunimmt. Wie Abbildung 2.3 zeigt treten bei der nichtlinearen Kostenfunktion zusätzlich zu einem globalen Minimum viele, lokale Minima auf. Lokale Minima können als globales fehlinterpretiert werden. Je mehr Datenpunkte und Modellparameter vorhanden sind desto komplexer das Problem. Um nichtlineare Probleme dennoch lösen zu können, werden globale und lokale Methoden angewandt.

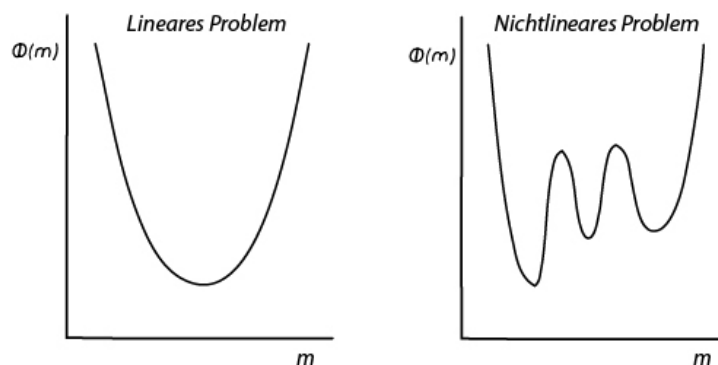


Abbildung 2.3: Gegenüberstellung der Kostenfunktion $\Phi(m)$ eines linearen und nichtlinearen Problems

Lokale Methoden approximieren ein nichtlineares Problem mit linearen Methoden. Diese sind iterativ, sie erzeugen eine Reihe von Modellen die zum finalen Modell konvergieren. Dadurch können nichtlineare Probleme mit einfachen Mitteln kostengünstig berechnet werden. Aufgrund der Linearisierung werden jedoch Annahmen getroffen, die nicht der Realität entsprechen und somit zu ungenauen Ergebnissen führen.

Globale Methoden verzichten auf Linearisierung und untersuchen, meist stichprobenartig, den gesamten Modellraum. Durch Abtasten der Kostenfunktion versuchen sie das Minimum aufzufinden und zu beschreiben. Eine dieser globalen Methoden ist das Markov-Kette-Monte-Carlo Verfahren, kurz McMC. Sie steht im Zentrum dieser Arbeit (siehe Kapitel 2.2.1).

2.2.1 Markov Kette Monte Carlo

Monte Carlo

Generell werden Methoden, welche einen Zufallszahlengenerator verwenden, als Monte Carlo bezeichnet. Der Name stammt von dem gleichnamigen Casino in Monaco. In der Inversionstheorie werden sie vor allem für die Lösung nichtlinearer Probleme verwendet. Der Zufallszahlengenerator wird eingesetzt um Modelle m innerhalb eines definierten Modellraumes M zu beproben. Die gemessenen Daten d_{obs} werden anschließend mit den errechneten Daten d_{cal} eines Modells verglichen. Ein Beispiel für die Anwendung von Monte Carlo in der Geophysik ist die Arbeit von Press (1968). In dieser Studie wurde die Dichte des Erdmantels mit Hilfe von Laufzeitbeobachtungen von Erdbebenwellen modelliert. Dafür wurden 88 Stützstellen in der Erde betrachtet, wovon 23 mit Monte Carlo perturbiert wurden. Über fünf Millionen Modelle wurden berechnet. Nach intensiven Vergleichen mit der Erdmasse und den bekannten seismischen Geschwindigkeiten wurden sechs Modelle für ausreichend befunden.

Ein Kriterium für ein gutes Modell ist die Likelihood oder auch Gauss'sche Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion. Formel 2.3 stellt diese Funktion dar. Für die beobachteten Daten steht d_{obs}^i , wobei i ein Element aus den Datenpunkten ist. Die Standardabweichung der Daten stellt σ_D^i da. Jeder berechnete Datenpunkt wird von $g^i(m)$ dargestellt.

$$L(m) = \exp\left[-\frac{1}{2} \sum_{i \in I_d} \frac{|g^i(m) - d_{obs}^i|}{\sigma_D^i}\right] \quad (2.3)$$

Markov Kette

Im Wesentlichen ist eine Markov Kette eine Ansammlung von Variablen, beziehungsweise Modellen. Jedes Element dieser Variablenkette kann auch als zeitliche Abfolge gesehen werden kann. [Meyn und Tweedie (1993)]

Eine grundsätzliche Vorgabe einer Markov Kette ist, dass jede Variable der Zukunft unabhängig von Vergangenen ist. Einzig und allein der gegenwärtige Zustand steht im Zusammenhang mit einer zukünftigen Variable. Um zu beschreiben, mit welcher Wahrscheinlichkeit sich die Variable in der Zukunft verändert, werden Übergangswahrscheinlichkeiten eingesetzt. Dadurch entsteht eine zeithomogene Markov Kette. [Meyn und Tweedie (1993)]

Das Startmodell einer Markov Kette wird mit der Anfangswahrscheinlichkeit beschrieben. Sie und die Übergangswahrscheinlichkeiten werden benötigt, um eine Markov Kette vollständig zu beschreiben. Letztere werden oft auch in einer Übergangsmatrix für alle Elemente der Kette zusammengefasst und zeigen die Wahrscheinlichkeit der Kette eine neues Kettenglied zu generieren. [Waldmann und Stocker (2013)]

Kettenelemente sind aufgrund der kleinen Zufallsänderung stark mit Modellen in der Nachbarschaft korreliert. Dadurch werden die ersten Modelle stark von dem Startmodell beeinflusst. Dieses kann frei gewählt werden und befindet sich daher nicht zwingend in einer Gegend des Modellraumes mit hoher Likelihood. Um dieses Problem zu umgehen, erlaubt man der Kette eine Aufwärmphase. Modelle aus diesem Abschnitt werden für die Auswertung nicht herangezogen.

Metropolis-Hastings Algorithmus

Der Metropolis-Hastings Algorithmus verwendet eine MCMC mit einer begrenzten Verteilung. Der Algorithmus greift dabei auf die Zielverteilung, oder Posteriori-Wahrscheinlichkeit, $\pi(m | d)$ zu und produziert so Modelle mit einer höheren Likelihood.

Im Wesentlichen wird die Markov Kette dazu angehalten einen Zufallsweg zu gehen

2 Inversion

und aus dem Modellraum mit initialer Wahrscheinlichkeitsverteilung zu beproben. Mit einer Wahrscheinlichkeitsregel wird diese Beprobung abgeändert, um Modelle aus der Zielverteilung zu ziehen. Diese Regel gibt an, welche Modelle in die Kette integriert werden und welche nicht geeignet sind.

Der Grundstein für diesen Algorithmus wurde bereits von Metropolis (1953) gelegt. Er nutzte Monte Carlo Integration um Molekülradialen in chemischen Verbindungen zu modellieren. Darauf aufbauend erweiterte und verallgemeinerte Hastings (1970) den Algorithmus.

Wie gut der Algorithmus arbeitet, hängt stark von der Schrittgröße der Modellperturbationen ab. Ist diese klein, ist die relative Veränderung des Modells zum Vorgänger ebenfalls klein. Die Chance das dieses Modell eine ähnlich gute Likelihood aufweist ist dadurch groß und die Akzeptanzrate ist hoch. Kleine Perturbationen benötigen allerdings viele Kettenglieder um unkorrelierte Modelle zu erzeugen, da sie sich nur langsam von einem Modell weg entwickelt. Wird dagegen eine große Schrittgröße gewählt, kann der Algorithmus mit weniger Kettenglieder schneller unkorrelierte Modelle erzeugen. Die Akzeptanzrate sinkt jedoch mit zunehmender Perturbationsgröße, da die neue Probe weiter vom aktuellen Endglied der Kette entfernt ist. In beiden Situationen kann sich der Algorithmus verirren und in einem lokalen Minimum gefangen sein. Jede Kette muss also diesbezüglich überprüft werden.

Bayesische Sicht

Markov-Ketten-Monte-Carlo Verfahren beproben eine Zielverteilung. Diese lässt sich als Bayesische Sicht der Wahrscheinlichkeit darstellen. Im Vergleich zur klassischen Wahrscheinlichkeit weist diese Methode mehrere Unterschiede auf. So ist beispielsweise das wahre Modell in der klassischen Wahrscheinlichkeitsrechnung, zwar eine unbekannte aber dennoch klar definierte Größe, hingegen bei Bayesischer Betrachtung eine zufällige Variable. Die Lösung wird somit zur Posteriori-Verteilung. Auch das Miteinfließen von vorherigen Informationen, die Anfangsverteilung, beziehungsweise die Priori-Wahrscheinlichkeit, finden erst in Bayes-Statistik seine Anwendung.

Formel 2.4 beschreibt das Bayes-Theorem.

$$\pi(M) = P(m | d) = \frac{P(d | m)P(d)}{P(m)} \quad (2.4)$$

Damit werden die Wahrscheinlichkeiten wie folgt definiert:

- $P(m)$: Priori-Wahrscheinlichkeit oder Likelihood
- $P(m | d)$: Posteriori-Wahrscheinlichkeit

3 Versuchsanordnung

3.1 Synthetischer Datensatz

In dieser Arbeit wird versucht mit Hilfe von matrixbasierenden Funktionen die zufälligen Perturbationen im McMC-Verfahren zu kompensieren. Diese neuen Modelle sollen sich im Idealfall als neues Glied in einer Markov Kette integrieren.

Die Nützlichkeit solcher Funktionen wird an einem synthetischen Datensatz erprobt. Dieser wurde von Fontanini (2016) für dessen Dissertation erzeugt. Diese ist zentraler Gegenstand des vom FWF finanzierten Forschungsprojektes: *“Probabilistic uncertainty estimation for 2D/3D refraction seismic travelttime tomography”* (P23748). Er hat eine Profillänge von 120 m und 23 Schuss- und Receiverpunkte mit je 5 m Abstand. Die maximale Tiefe des synthetischen Modells beträgt 36 m. Es besitzt 23 Modellparameter. Das synthetische Modell stellt einen Dreischichtfall dar, wobei die hangende Schicht eine Synklinale ausbildet. Jede einzelne Schicht weist einen vertikalen Geschwindigkeitsgradienten von 5 m/s/m auf. Die synthetischen Laufzeiten wurden mit dem FAST Algorithmus nach Zelt (1998) berechnet. Weißes Rauschen wurde mit 5% Standardabweichung zur rauschlosen Laufzeit addiert.

Um diese Kompensationstests an Modellen durchzuführen, die für die Zielverteilung repräsentativ sind, wurde von Fontanini (2016) eine Testpopulation aus einer bereits bestehenden Kette entnommen. Dabei wurde nur jedes K-te Modell zur Testpopulation hinzugefügt, mit dem Ziel eine unkorrelierte Testpopulation entstehen zu lassen. Statistische Untersuchungen (siehe Kapitel 4) zeigen jedoch, dass diese eine starke Korrelation aufweisen. Abbildung 3.1 zeigt ein arithmetisches Mittel aus allen 500 Modellen. Die drei Schichten, inklusive Synklinale, sind ebenfalls gut erkennbar. Im

3 Versuchsanordnung

Nachfolgenden werden diese als hangende, mittlere und liegende Schicht bezeichnet. Tabelle 3.1 zeigt eine Aufschlüsselung der Tiefenlagen der einzelnen Modellparameter. Da die Kompensationstests außerhalb der Markov Kette durchgeführt werden gibt es kein Startmodell, daher dient das mittlere Modell als "Startmodell". Deshalb wird auch die Auflösungsmatrix dieses Modells für die Kompensationen verwendet.

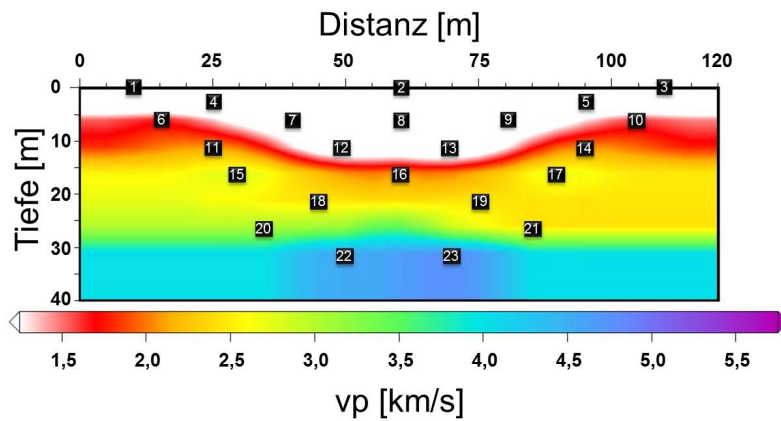


Abbildung 3.1: Mittelwert Modell

Tabelle 3.1: Tiefenstufen und Nummer der Modellparameter, diese sind mit schwarzen Rechtecken markiert.

Tiefenstufe	z [m]	Schicht	Modellparameter
1	0,1	Hangende	1,2,3
2	2	Hangende	4,5
3	6	Hangende	6,7,8,9,10
4	11	Hangende, Mittlere	11,12,13,14
5	16	Mittlere	15,16,17
6	21	Mittlere	18,19
7	26	Mittlere	20,21
8	31	Liegende	22,23

3.2 Dämpfungstest

Wie in Kapitel 2.1.1 und 2.1.2 beschrieben, wird für eine geeignete Auflösungsmatrix eine passende Dämpfung benötigt. Für die Berechnung der Dämpfung wird das mittlere Modell aus Abbildung 3.1 verwendet. Für diesen Test werden mit unterschiedlichen Dämpfungen die Fehler gegen die Einfachheit des Modells aufgetragen (Abbildung 3.2). Die resultierende Trade-off Kurve besitzt ihren Punkt der stärksten Krümmung bei einer Dämpfung von 1000.

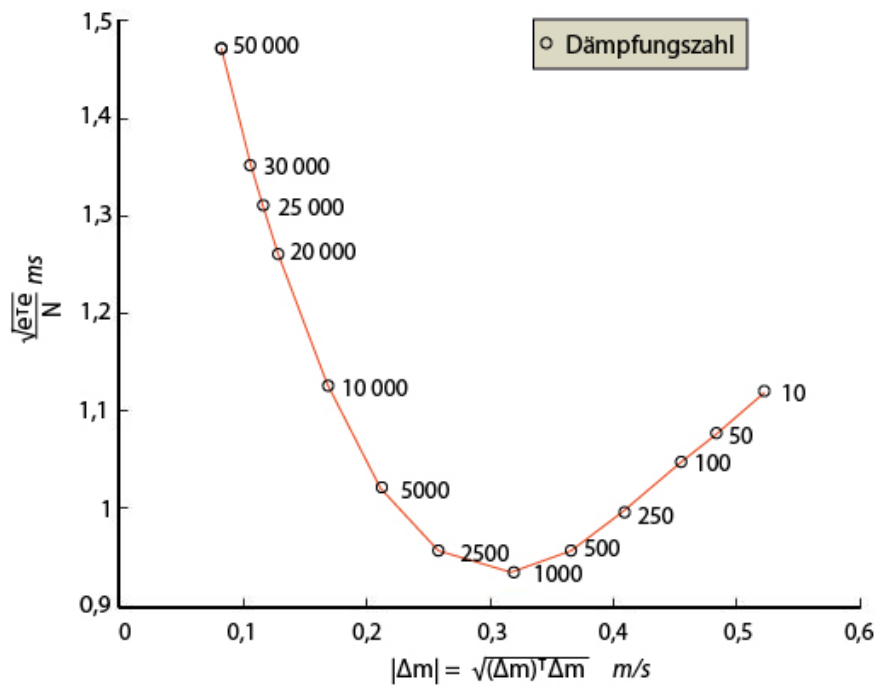
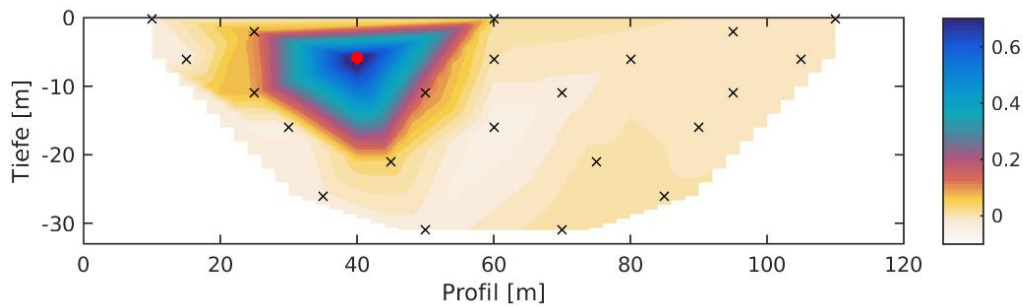


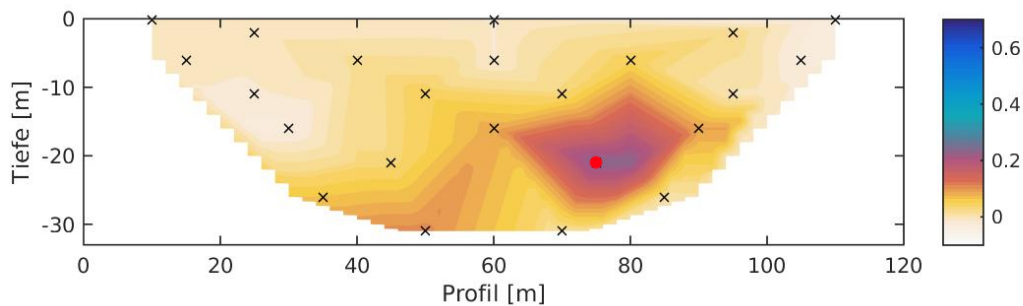
Abbildung 3.2: Dämpfungstest

3.3 Auflösungsmatrix

Die Auflösungsmatrix wurde aus dem Mittelwertmodell bei Dämpfung 1000 errechnet. Abbildung 3.3 stellt zwei Zeilen aus ebendieser Matrix dar. Abbildung (a) weist die Auflösung des oberflächennahen Modellparameters Nummer 7 aus. Die Wert des Diagonalelements ist wesentlich höher als jener des tiefen Modellparameters Nr. 19, abgebildet Darstellung (b). Oberflächennahe Bereiche können generell besser aufgelöst werden, da sie von mehr Strahlengängen durchkreuzt werden. Daraus folgt, dass tiefe Modellparameter, bedingt durch die geringe Auflösung, mehr von umliegenden Modellparametern beeinflusst werden.



(a) 7. Zeile



(b) 19. Zeile

Abbildung 3.3: Zeilen der Auflösungsmatrix des mittleren Modells, das Diagonalelement wird durch den roten Punkt dargestellt

4 Statistische Analyse der Testpopulation

Für die statistische Analyse der 500 Testmodelle werden L_2 -Norm und Standardabweichung berücksichtigt.

Fontanini (2016) hat für seine Modellperturbationen Geschwindigkeit als Einheit gewählt. Aufgrund der direkten Proportionalität zur Laufzeit wurde beschlossen für diese Arbeit die Perturbationen und Kompensationstests in Langsamkeit durchzuführen. Statistische Parameter (Standardabweichung und L_2 -Norm) werden daher in den nachfolgenden Kapiteln für Geschwindigkeit und Langsamkeit erläutert. Die statistischen Untersuchungen benötigen ein mittleres Modell. Dieses wird für beide Größen als arithmetisches Mittel berechnet (Abbildung 3.1).

4.1 Standardabweichung

Für jede Stützstelle wurde aus allen 500 Modellen die Standardabweichung berechnet. Abbildung 4.1 zeigt die Standardabweichung berechnet in Geschwindigkeit und Langsamkeit.

die Standardabweichung für die Geschwindigkeit bleibt bei gut aufgelösten Modellparametern relativ konstant. Ab Modellparameter 15 wird ein deutlich unstetiger Verlauf der Standardabweichung verzeichnet. Besonders hohe Standardabweichungen besitzen Modellparameter 19, 21 und 23.

4 Statistische Analyse der Testpopulation

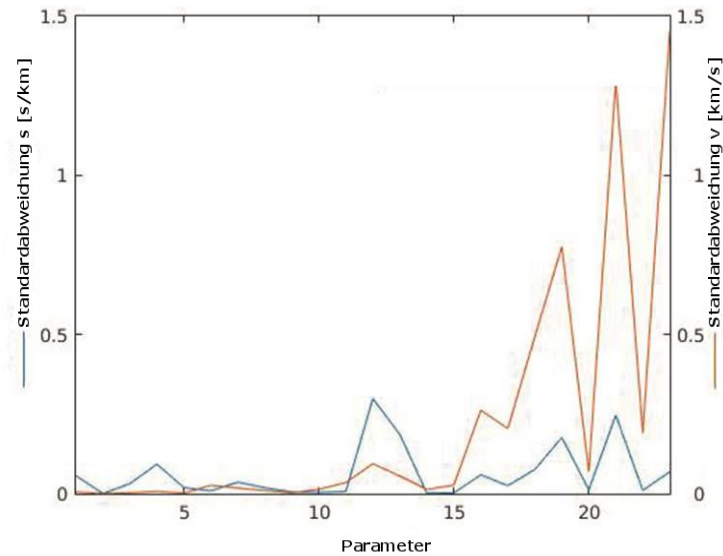
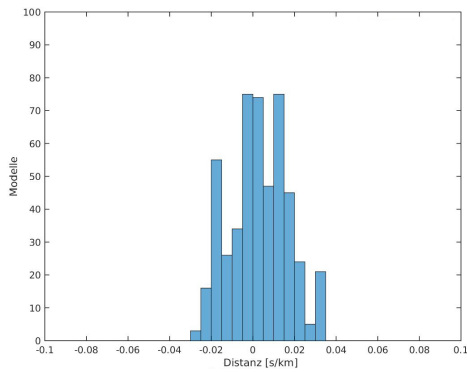


Abbildung 4.1: Darstellung der Standardabweichung der einzelnen Modellparameter in Langsamkeit s und Geschwindigkeit v . Die Lokationen der Parameter können der Abbildung 3.1 entnommen werden.

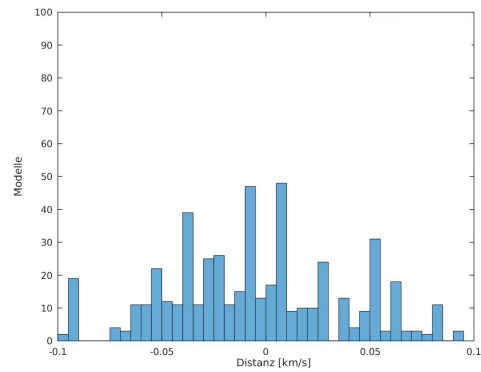
Die Standardabweichung der Langsamkeit verhält sich ähnlich, wobei die Ausschläge der tief liegenden Modellparameter jedoch nicht so stark ausfallen. Auffällig ist jedoch der Ausschlag bei Modellparameter 12 und 13. Ein Blick auf Abbildung 3.1 zeigt, dass diese beiden Modellparametern am tiefsten Punkt der Synklinale liegen. Die erhöhte Standardabweichung kann durch diese Situation bedingt sein.

Abbildung 4.2 zeigt die Standardabweichungen der 500 Modelle für den 6. Modellparameter, als Beispiel für eine oberflächennahe Position. In Geschwindigkeit streuen die Abweichungen stärker. Aufgrund der guten Auflösung, dank Oberflächennähe, sind die Abweichungen wie erwartet gering und annähernd symmetrisch verteilt.

4 Statistische Analyse der Testpopulation



(a) Langsamkeit

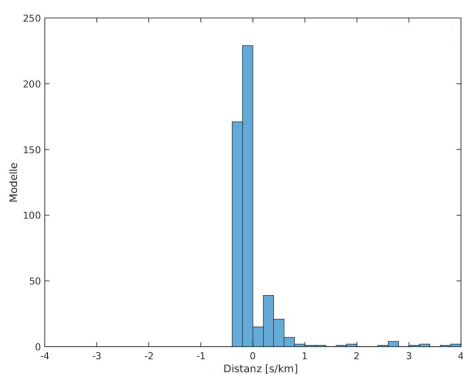


(b) Geschwindigkeit

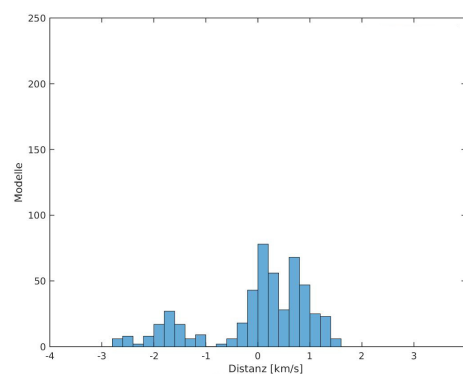
Abbildung 4.2: Abweichungen an Modellparameter 6

Abbildung 4.3 zeigt die Abweichung für die 21. Modellparameter mit angepasster Skalierung der Achsen. Bereits in Abbildung 4.1 konnte eine deutlich erhöhte Standardabweichung für diesen Modellparameter beobachtet werden.

Die Zunahme der Abweichung mit der Tiefe kann aufgrund der Abnahme der Auflösung leicht erklärt werden. Allerdings zeigt sich eine deutliche Asymmetrie sowohl in Langsamkeit als auch in Geschwindigkeit. In Langsamkeit gibt es deutliche positive Ausreißer. In Geschwindigkeit gibt es deutliche unsymmetrische negative Abweichungen. Insgesamt streut Langsamkeit weniger, da $s \propto t$.



(a) Langsamkeit



(b) Geschwindigkeit

Abbildung 4.3: Abweichung an Modellparameter 21

4.2 L_2 Norm

Im Wesentlichen ist die L_2 -Norm, oder euklidische Entfernung ein Maß für die Entfernung eines Modells zu einem anderen. Die Formel 4.1 beschreibt diese Entfernung. X_i und Y_i stehen hier für Langsamkeit- beziehungsweise Geschwindigkeitswerte. Die Anzahl der Parameter, welche in die Berechnung eingehenden, ist p .

Als Referenz von der aus die L_2 -Entfernung berechnet wird, dient in diesem Fall das mittlere Modell aus den 500 Modellen.

$$L_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^p (X_i - Y_i)^2} \quad (4.1)$$

Abbildung 4.4 zeigt die L_2 -Entfernungen aller Modelle, ausgehend vom mittleren Modell. Es werden alle 270 Modellstützpunkte herangezogen. Die rechte Geschwindigkeitsdarstellung weist ein unerwartet großes Spektrum an L_2 -Distanzen auf. Da keines der Modelle unter 1,5 km/s plottet, scheint es keine Modelle nahe am mittleren Modell zu geben. In der Langsamkeitsdarstellung kommt es zu einer klaren Anhäufung von Modellen im L_2 Bereich zwischen 0,5 und 1 s/km.

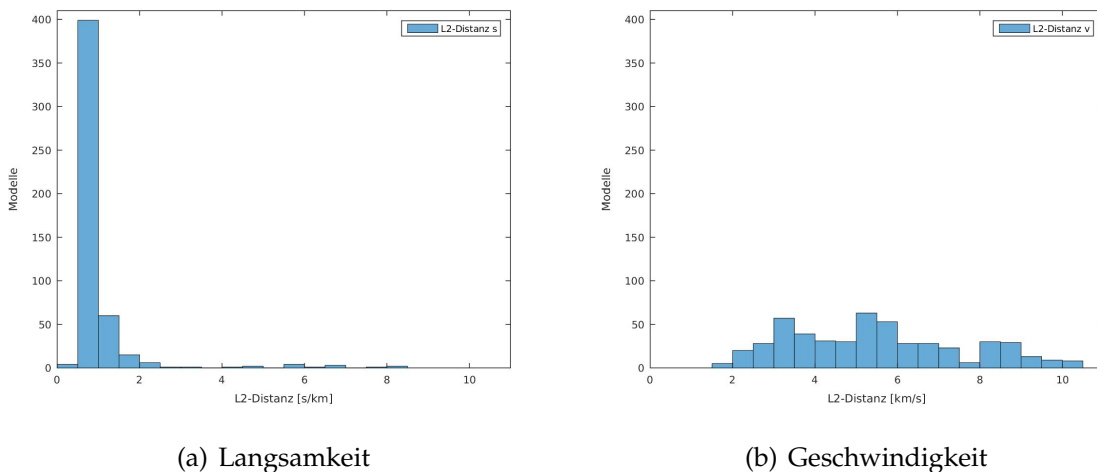


Abbildung 4.4: L_2 Entfernung für 270 Modellstützstellen

4 Statistische Analyse der Testpopulation

Für Abbildung 4.5 wurden nur die 23 Modellparameter herangezogen. Es kann in beiden Fällen eine klare Verschiebung der L_2 -Distanzen in Richtung null beobachtet werden. Aufgrund der geringeren Anzahl an Modellparametern die in die Berechnung miteinbezogen werden, ist dieser Trend korrekt.

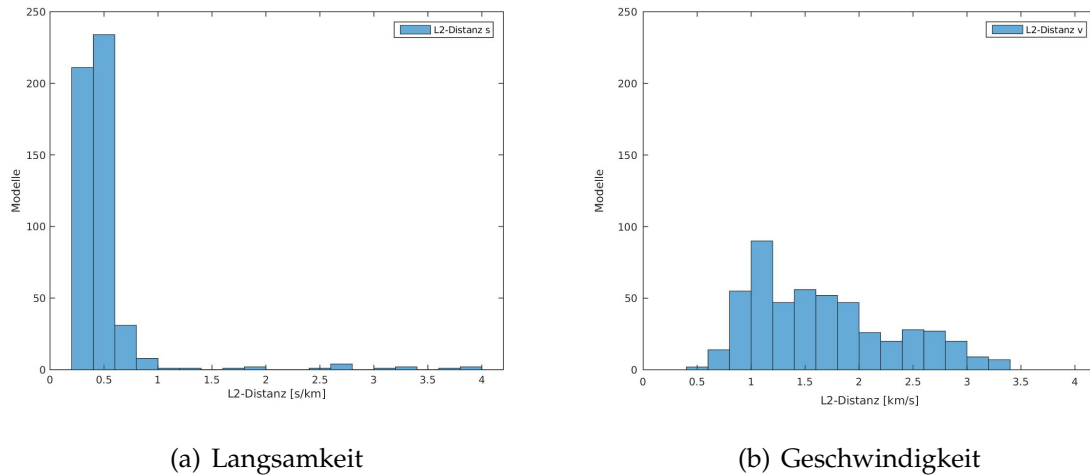


Abbildung 4.5: L_2 Entfernung für 23 Modellparameter

Abbildung 4.6 zeigt alle L_2 -Entfernungen der 500 Modelle in Langsamkeit und Geschwindigkeit. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Distanzen in Langsamkeit für die deutliche Mehrheit der Modelle relativ konstant bleiben. Ab Modell 470 kann eine deutliche Zunahme der L_2 -Distanz vor allem in Langsamkeit beobachtet werden.

4 Statistische Analyse der Testpopulation

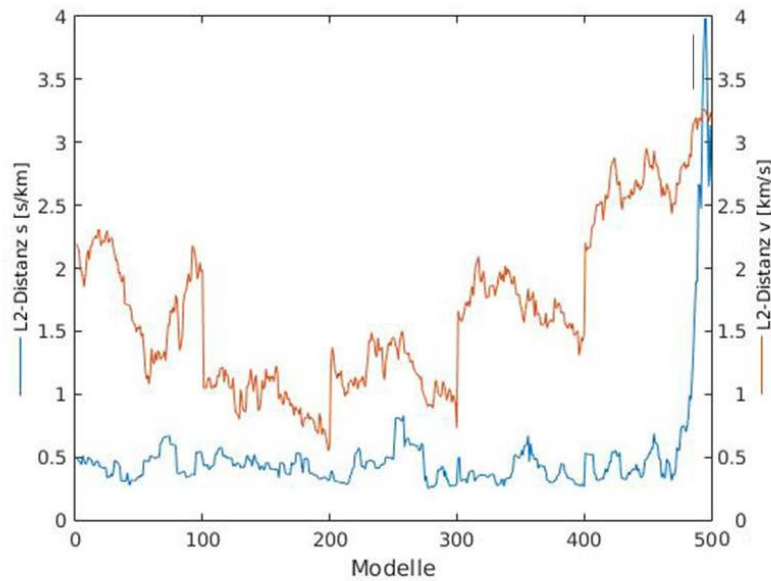


Abbildung 4.6: L_2 Entfernungen der 500 Modelle, Berücksichtigung von 23 Modellparameter

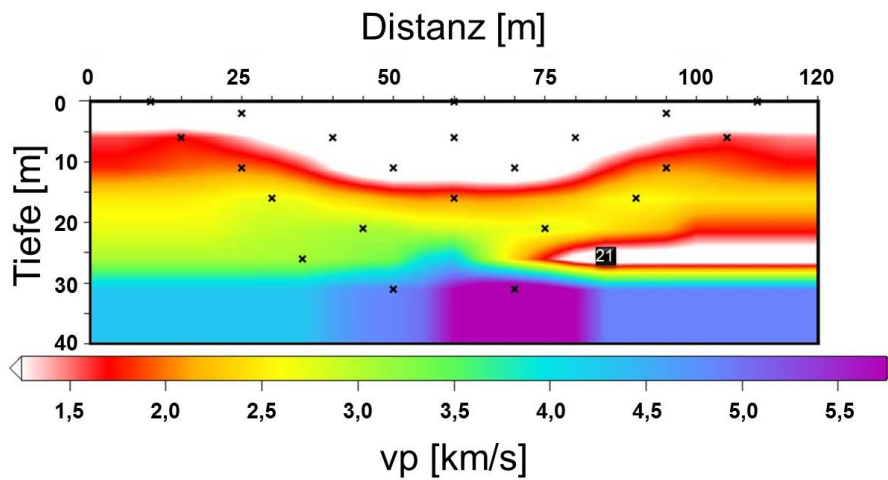


Abbildung 4.7: v_p -Geschwindigkeitsverteilung des Modells 488

Das Modell 488 in Abbildung 4.7 fällt in den Bereich des starken Anstiegs der L_2 -Entfernung in Langsamkeit. An dem Modellparameter 21 wurden ab dem 470. Modell extrem niedrige Geschwindigkeiten modelliert, welche eine große L_2 -Entfernung

sowie eine große Standardabweichung erklären. Diese Gegebenheiten müssen vor allem bei der späteren Diskussion der Ergebnisse beachtet werden.

4.3 Ergebnisse der Statistik

Der Vergleich zwischen L_2 Distanzen und Standardabweichungen in Geschwindigkeiten und Langsamkeit haben gezeigt, dass Langsamkeit in den meisten Fällen kleinere Distanzen liefert. Die Langsamkeit ist direkt proportional zu den Laufzeiten, Geschwindigkeit nur indirekt proportional. Dieser physikalische Zusammenhang führt dazu, dass die L_2 Distanzen in allen Fällen kleiner sind als vergleichbare in Geschwindigkeit. Die meisten Modellparameter besitzen auch eine kleinere Standardabweichung in Langsamkeit als in Geschwindigkeit.

Ab Modell 450 kann eine Niedrig-Geschwindigkeitszone um Modellparameter 21 beobachtet werden, welche in den nachfolgenden 50 Modellen mit geringfügigen Veränderungen erhalten bleibt. Diese einfache Observation zeigt, dass die Modelle stark miteinander korrelieren und somit keine ideale Testpopulation darstellen. Aus Gründen der Durchführbarkeit wurde jedoch entschieden keine neue Markov Kette und somit eine neue Testpopulation zu erzeugen.

5 Modelperturbationen

5.1 Funktionsweise der Perturbation

Grundlage für die Perturbationen der Modelle in dieser Arbeit ist die Auflösungsmatrix. Wird in der Gleichgewichtsphase einer M-H-Mc ein Parameter eines Modells zufällig verändert, so ist die Wahrscheinlichkeit, dass jenes Model in die Kette als neues Glied akzeptiert wird, gering. Ein Model in dieser Gleichgewichtsphase besitzt bereits eine gute Likelihood, diese mit einer zufälligen Änderung noch zu steigern ist unwahrscheinlich. Der Rechenaufwand, durch zufällige Perturbationen ein neues Kettenglied zu finden, ist dementsprechend groß. Mit Hilfe der Auflösungsmatrix wird nun versucht, Kompensationen für diese Zufallsänderung einzuführen, mit dem Ziel die Suche nach neuen Kettengliedern effizienter zu gestalten. Formel 5.1 zeigt die Vorgangsweise des herkömmlichen M-H-McMC Verfahrens. Der Parameter p wird mit einer Zufallszahl u mit gauß'scher Verteilung (Mittelwert=0, Standardabweichung=1) perturbiert. Die Standardabweichung σ_p dient als Skalierung der Perturbation und stellt hier eine a priori Information der Standardabweichung der modellierten Größe dar.

$$\vec{m}' = \vec{m} + u\sigma_p\vec{e}_p \quad (5.1)$$

$$\vec{m}' = \vec{m} + u\sigma_p\vec{e}_p - u\sigma_p\vec{g}(R_{pj}) \quad (5.2)$$

Formel 5.2 zeigt die Vorgangsweise bei einer Kompensation durch die Auflösungsmatrix. Parameter p wird herkömmlich verändert. Für alle anderen Parameter j wird

5 Modelperturbationen

eine Kompensation mit $\vec{g}(R_{pj})$ durchgeführt. Fontanini (2016) hat diese Perturbationen in Geschwindigkeit durchgeführt. Als a priori Information verwendete er eine, mit der Tiefe linear zunehmende, Standardabweichung σ_p der Geschwindigkeiten. Die Formeln 5.3 bis 5.6 zeigen die von ihm eingesetzten Funktionale. Diese wurden gewählt um verschiedene, von Parameter p abhängige, Skalierungen der Kompensation durch $\vec{g}(R_{pj})$ zu testen.

$$\text{Funktional 1:} \quad \vec{g}(R_{pj}) = \sum_{j \neq p}^n R_{pj} \vec{e}_j \quad (5.3)$$

$$\text{Funktional 2:} \quad \vec{g}(R_{pj}) = \sum_{j \neq p}^n R_{pj} R_{pp} \vec{e}_j \quad (5.4)$$

$$\text{Funktional 3:} \quad \vec{g}(R_{pj}) = \sum_{j \neq p}^n \frac{R_{pj}}{R_{pp}} \vec{e}_j \quad (5.5)$$

$$\text{Funktional 4:} \quad \vec{g}(R_{pj}) = \sum_{j \neq p}^n \frac{R_{pj}}{\sum_{j \neq p}^n R_{pj}} \vec{e}_j \quad (5.6)$$

Die Motivation für den Einsatz der einzelnen Funktionale kann der nachfolgenden Aufzählung entnommen werden:

- **Funktional 1:** Die Kompensationsperturbationen dieser Funktion basieren auf Formel 5.3. Sie ist die einfachste der Funktionen, da sie nur das entsprechende Element in der Auflösungsmatrix ohne Skalierung verwendet. Die Kompensation basiert nur auf der Abhängigkeit der Modellparameter voneinander. In den meisten Fällen ist dieses Element sehr klein. Die Größe der Matrixelemente ist von der Tiefe des aktuellen Modellparameters abhängig. Tiefe Modellparameter werden mehr von den umliegenden Stellen beeinflusst als flache. Die Nebendiagonalelemente der tiefen Modellparametern sind demnach im Durchschnitt größer als jene von flachen. Die Diagonalelemente verhalten sich invers dazu.
- **Funktional 2:** In Formel 5.4 wird die entsprechende Kompensation zusätzlich mit dem Diagonalelement multipliziert wird. Das Diagonalelement ist größer als die entsprechenden Nebendiagonalelemente und hat in der Auflösungsmatrix der Testmodelle einen durchschnittlichen Wert von 0,4. Generell haben flache

5 Modellperturbationen

Modellparameter ein größeres Diagonalelement als jene in der Tiefe. Die Skalierung bewirkt demnach eine kleinere Kompensation in der Tiefe.

- **Funktional 3:** Der Kompensationsterm wird in Formel 5.5 beschrieben. Die Division mit dem Diagonalelement bewirkt eine generell größere Kompensation. Da das Diagonalelement mit der Tiefe kleiner wird, werden die größten Kompensationen in tiefen Bereichen angebracht.
- **Funktional 4:** Diese Funktion (Formel 5.6) basiert auf der Division durch die Summe der gesamten Matrixzeile, abgesehen vom Diagonalelement. Diese Summe ist in oberflächennahen Modellparametern kleiner, in der Tiefe ist sie größer. Dieses Funktional verhält sich analog zu Funktional 2, insgesamt sind die Kompensationen jedoch um Faktor 10 größer.

Es handelt sich bei den Funktionalen um eine empirische Suche nach gut funktionierenden Kompensationen. Fontanini (2016) führte seine Tests ohne zu überprüfen, von welcher Größe eine Skalierung von $\vec{g}(Rpj)$ notwendig ist, durch. Er führte keine statistische Analyse der 500 Testmodelle durch. Zusätzlich entschied er sich für Perturbationen in Geschwindigkeit mit in die Tiefe linear ansteigenden Standardabweichungen. Er nutzte eine schwach-informative a priori Information, (siehe Gelman (2006)) um ein Geschwindigkeitsmodell des Datensatzes zu erhalten. Dafür definierte er Minimum und Maximum der Geschwindigkeiten an der Oberfläche und in der Tiefe. Durch Extrapolation entstand ein lineares Geschwindigkeitsfeld für die gesamte Tiefe. Die Standardabweichung dieser Information nutzte er für die Skalierung seiner Perturbationen.

Seine Tests resultierten in dem Ergebnis, dass Funktional 2 die besten Leistung erbringt. Eine Steigerung der Effizienz der MCMC konnte aber nur geringfügig erreicht werden.

Für diese Arbeit wurde entschieden, einen Schritt zurück zu gehen und zunächst anhand von Funktional 1 die geeignete Skalierung der Kompensationen zu bestim-

men. Zusätzlich werden aufgrund der direkten Proportionalität von Laufzeit und Langsamkeit die Perturbationen in Langsamkeit durchgeführt.

5.2 A Priori Information und Perturbationsgröße

A Priori Informationen sind unabhängig vom Datensatz. Sie sind kein Beiprodukt der Datenaquisition. Sie können beispielsweise das Resultat vorangegangener Studien oder physikalische Gesetze sein. Welche a priori Informationen verwendet werden, muss für jeden Datensatz und jede Problemlösung individuell entschieden werden. Wie bereits in Kapitel 2.2.1 beschrieben, ist die Leistungsstärke der MCMC mit Metropolis Hastings Algorithmus stark abhängig von der Schritt- bzw. Perturbationsgröße sowie der Akzeptanzrate.

Für das Entstehen einer guten und effizienten Kette ist es wichtig, neue Modelle mit 20-30 Prozent Wahrscheinlichkeit zu akzeptieren. Um das zu erreichen, wird für nachfolgenden Kompensationstests empirisch eine Standardabweichung von $\sigma_p = 0,05$ [s/km] bestimmt. Im Vergleich mit Fontanini (2016) erscheint diese Standardabweichung geeignet zu sein und eine gute Akzeptanzrate zu erzeugen.

Die Zufahlszahl u wird in den nachfolgenden Tests als konstant und nicht variabel angenommen um die Ergebnisse besser vergleichen zu können. Um dennoch die Verteilung von u abtasten zu können werden die Tests mit folgenden u durchgeführt:

- $u = \pm 0,5$
- $u = \pm 1$
- $u = \pm 1,5$

5.3 Perturbationskompensationen

Für die folgenden Perturbationstests werden konstante Faktoren a in Kombination mit Funktional $\mathbb{1}$ verwendet (siehe Formel 5.7). So wird überprüft, ob eine Skalierung der Kompensation $\vec{g}(Rpj)$ gegenüber der primären Zufallsperturbation vorgenommen

5 Modelperturbationen

werden muss (vgl. Formel 5.8). Die Perturbationen werden in Langsamkeit mit konstanter Standardabweichung durchgeführt.

$$\text{Funktional 1 mit Faktor } a: \quad \vec{g}(R_{pj}) = a \sum_{j \neq p}^n R_{pj} \vec{e}_j \quad (5.7)$$

Das Schema der angewandten Perturbationen wird in Formel 5.8 dargestellt. Die Variable s'_K steht für ein mit Perturbationsfunktion in Langsamkeit verändertes Modell.

$$\text{Funktion mit Kompensationen:} \quad \vec{s}'_K = \vec{s} + u\sigma_p \vec{e}_p - u\sigma_p \vec{g}(R_{pj}) \quad (5.8)$$

Zu Vergleichszwecken wird auch eine Perturbation des herkömmlichen M-H-McMC-Verfahrens durchgeführt. Diese wird in Formel 5.9 dargestellt. Hier steht die Variable s'_U für ein Modell, welches mit regulärer McMC in Langsamkeit perturbiert wurde.

$$\text{Funktion ohne Kompensation:} \quad \vec{s}'_U = \vec{s} + u\sigma_p \vec{e}_p \quad (5.9)$$

Für den Test wird die Perturbation mit unterschiedlichen Kompensationen sowie eine herkömmliche Perturbation mit positivem und negativem Vorzeichen auf alle 23 Modellparametern in jedem der 500 Modelle in Langsamkeit angewandt. Das ergibt $2 * 23 * 500 = 23.000$ Modelle pro Perturbation.

Für jedes Modell wird die Likelihood entsprechend der Formel 2.3 berechnet. In den nachfolgenden Kapiteln wird für die Darstellungen die Formel 5.10 verwendet. Dieses ΔL_{KU} wird gewählt, um sofort erkennen zu können, ob die Likelihood von \vec{s}'_K größer ist als jene von \vec{s}'_U .

5 Modelperturbationen

$$\Delta L_{KU} = L_K/L_0 - L_U/L_0 \quad (5.10)$$

L_K =Likelihood nach Perturbation mit Kompensation

L_U =Likelihood nach Perturbation ohne Kompensation

L_0 =Likelihood vor der Perturbation

5.4 Faktortest

Diese Skalierungstests werden mit $\sigma_p = 0,05 \text{ s/km}$ durchgeführt. Die Perturbationen dieses Kapitels basieren auf Formel 5.7. Der Faktor a dient dazu, einen Eindruck zu erhalten, inwieweit die Perturbation mit R_{pj} skaliert werden muss.

Die Tabelle 5.1 zeigt die gewählten Werte für Faktor a . Für jede der in Kapitel 5.2 genannten u werden alle Faktoren getestet.

Tabelle 5.1: Skalierungsfaktoren

Faktor a	0,1	0,4	1	1,25	2	3
------------	-----	-----	---	------	---	---

Für die Bewertung der nachfolgenden Darstellungen von ΔL_{KU} können folgende Richtlinien angewandt werden:

- $\Delta L_{KU} > 0 = \text{GUT}$; Die Likelihood von \vec{s}_K' ist größer als jene von \vec{s}_U' , die neue Perturbationsmethode liefert gute Ergebnisse.
- $\Delta L_{KU} < 0 = \text{SCHLECHT}$; Die Likelihood von \vec{s}_K' ist kleiner als jene von s'_R , ohne Kompensation werden bessere Ergebnisse erzielt.

Die Anzahl der Modelle, die nach den Skalierungstests gemittelt ein positives ΔL_{KU} aufweisen, werden in Tabelle 5.2 dargestellt. Die häufigsten positiven Ausschläge des

5 Modelperturbationen

ΔL_{KU} werden mit einem $u = |1|$ und einem Faktor $a = 1,25$ erzielt. Hier verbessern sich 430 der 500 Modelle. Durchwegs die niedrigsten Ergebnisse werden mit einem $u = |0,5|$ erzielt. Auch der Faktor $a = 3$ erzeugt weniger verbesserte Modelle.

Tabelle 5.2: Anzahl von $\Delta L_{KU} > 0$, die Größte Anzahl wird mit roter Farbe gezeichnet, grau gefärbte Zahlen zeigen die Kompensationen, welche weniger als 50% Verbesserung bringen

$ u $	0,5	1	1,5
Faktor a			
0,1	379	420	424
0,4	375	408	408
1	374	417	407
1,25	373	430	360
2	365	346	220
3	262	198	99

In den nachfolgenden Kapiteln werden die Skalierungstests im Detail besprochen. Da die reine Anzahl nichts über die Größe der jeweiligen Verbesserungen aussagt, ist sie kein ausreichender Indikator für die Funktionsweise der Kompensation in einer Markov Kette. Im Nachfolgenden werden daher weitere statistische Größen in die Diskussion aufgenommen. Da es keine Erfahrungen im Umgang mit Kompensationen gibt, kann nicht klar definiert werden, welche dieser statistischen Größen tatsächlich die besten Aussagen über die Funktionsfähigkeit innerhalb einer Markov Kette liefert. Aus Gründen der Darstellung sind die Abbildungen auf Ausschnitte um den Bereich von $\Delta L_{KU} = 0$ begrenzt. Bei der Betrachtung der Verteilung von ΔL_{KU} ist daher zu bedenken, dass Extrema nicht dargestellt sind.

5.4.1 Skalierungstest für $|u| = 0,5$

Die Darstellungen 5.1 zeigen ΔL_{KU} für alle Faktoren a für die 500 Testmodelle. In Abbildungen c-e ist erkennbar, dass ΔL_{KU} , abgesehen von großen negativen Ausschlägen, zwar klein, aber dennoch positiv plottet. Bei Faktor $a = 0,1$ ist der Unterschied in der Likelihood von s'_K und s'_U nur sehr gering. Die Tabelle 5.3 zeigt jedoch für diesen Faktor die meisten positiven Ausschläge. Mit größer werdendem Faktor a verschiebt sich ΔL_{KU} immer weiter ins Positive. Zugleich nehmen die Negativausschläge in Anzahl und Intensität zu. Bei allen Darstellungen kann man am rechten Ende des Graphen (Modelle > 450) große Schwankungen erkennen. Diese Modelle sind jene, welche an Modellparameter z_1 anormal niedrige Geschwindigkeiten aufweisen (vgl. Kapitel 4).

Auch die Histogramme in Abbildung 5.2 zeigen den selben Trend. Bei $a = 0,1$ plottet ΔL_{KU} zwar mit einer deutlichen Mehrzahl an Modellen im positiven Bereich, die Werte sind jedoch sehr klein. Mit größer werdendem a fließt das Histogramm immer mehr auseinander und verschiebt sich zu positiven Werten. Bei $a = 3$ kehrt sich der Trend um.

Tabelle 5.3 listet statistische Daten zu diesen Verteilungen von ΔL_{KU} auf. Wie anhand von $\Delta L_{KU} > 0$ ersichtlich ist, nimmt mit größer werdendem Faktor a die Gesamtanzahl an verbesserten Modellen ab. Faktor $a = 3$ erzeugt ca. 120 verbesserte Modelle weniger als beispielsweise $a = 0,1$. Der Median der Daten liegt für alle Faktoren im positiven Bereich. Zunächst steigt der Wert des Medians mit zunehmendem Faktor, erreicht sein Maximum bei $a = 1,25$, um danach stark abzusinken. Umgekehrt verhält sich das absolute Minima, sein Betrag sinkt mit zunehmenden a . Der Mittelwert folgt dem selben Trend, auch sein Betrag sinkt mit steigender Kompensation. Das Maximum und die Anzahl der $\Delta L_{KU} > 3$ nimmt mit zunehmendem a zu.

Als genereller Trend für $|u| = 0,5$ kann festgehalten werden, dass die Gesamtanzahl der durch Kompensationen verbesserten Modelle mit größer werdendem a nur sehr gering abnimmt, abgesehen vom Faktor $a = 3$. Der Median hat sein Maximum bei $a = 1,25$ Modelle mit kleinem a besitzen eine große Anzahl an verbesserten Modellen, diese weisen jedoch nur geringfügige Verbesserungen auf. Bei einem Faktor a von

5 Modelperturbationen

1,25 gibt es immer noch eine große Zahl verbesserter Modelle, gleichzeitig erhöht sich der Betrag dieser Verbesserungen. Die Beträge der Extrema nehmen bei diesen a ebenfalls zu. Bei $a = 3$ sinkt der Betrag der Extremstelle wieder. Das zugehörige Histogramm besitzt sein Maximum bei leicht negativen ΔL_{KU} .

Tabelle 5.3: Verteilung von ΔL_{KU} mit $|u| = 0,5$ und Faktor a , inkl. Median, arithmetisches Mittel, Minimum und Maximum sowie Anzahl $\Delta L_{KU} > 0$ und > 3

Faktor a	$\Delta L_{KU} > 0$	Median	Min.	Max.	Mittelwert	$\Delta L_{KU} > 3$
0,1	379	0,0119	-6,6545	0,2766	-0,0318	0
0,4	375	0,0438	-23,0561	1,1999	-0,1190	0
1	374	0,0832	-41,1504	3,2562	-0,2411	1
1,25	373	0,0910	-44,2322	4,2123	-0,2666	1
2	365	0,0776	-44,2338	7,0769	-0,2468	1
3	262	0,0112	-13,1366	6,3619	-0,0026	2

5 Modelperturbationen

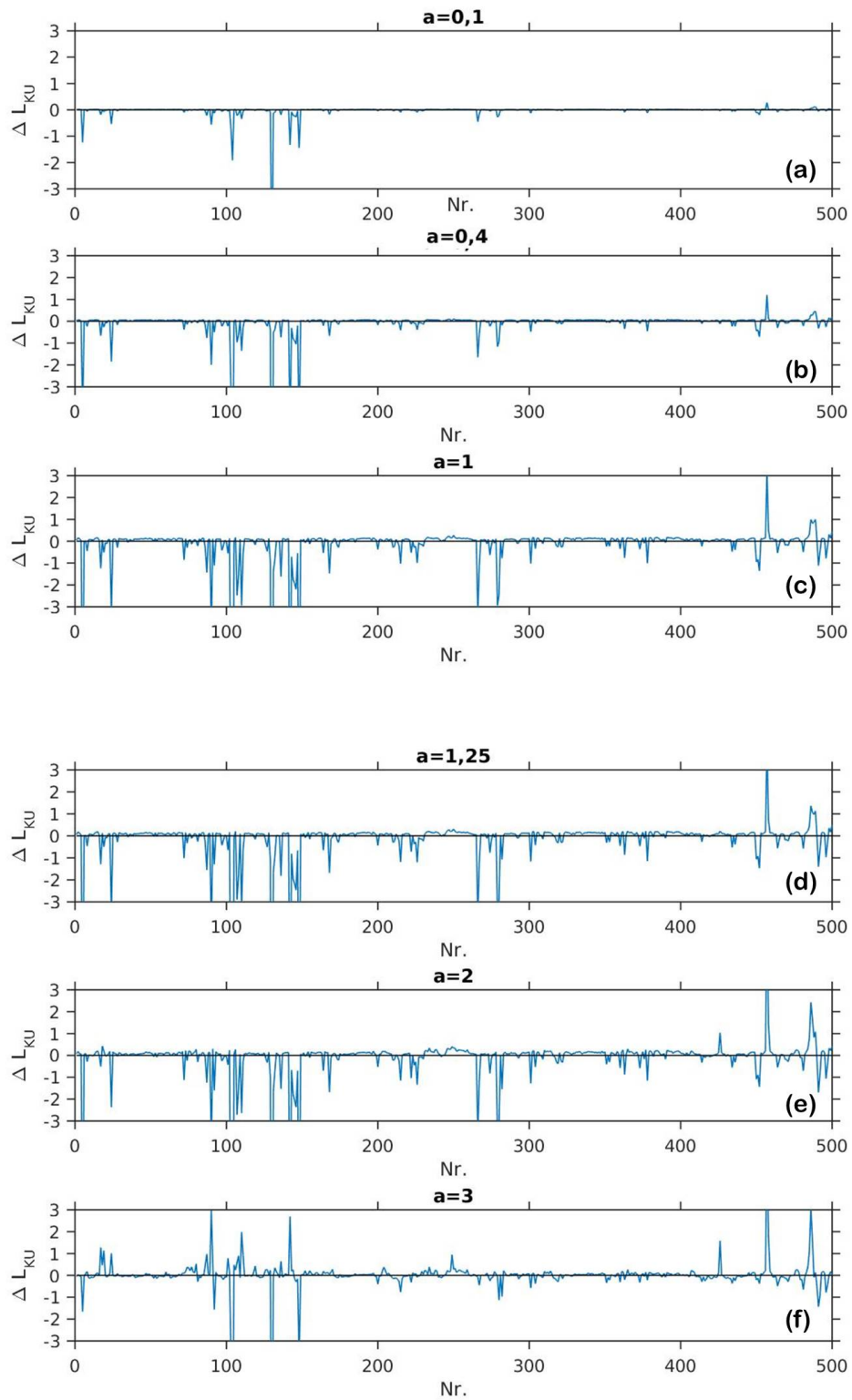


Abbildung 5.1: Verteilung von ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $|u| = 0,5$

5 Modelperturbationen

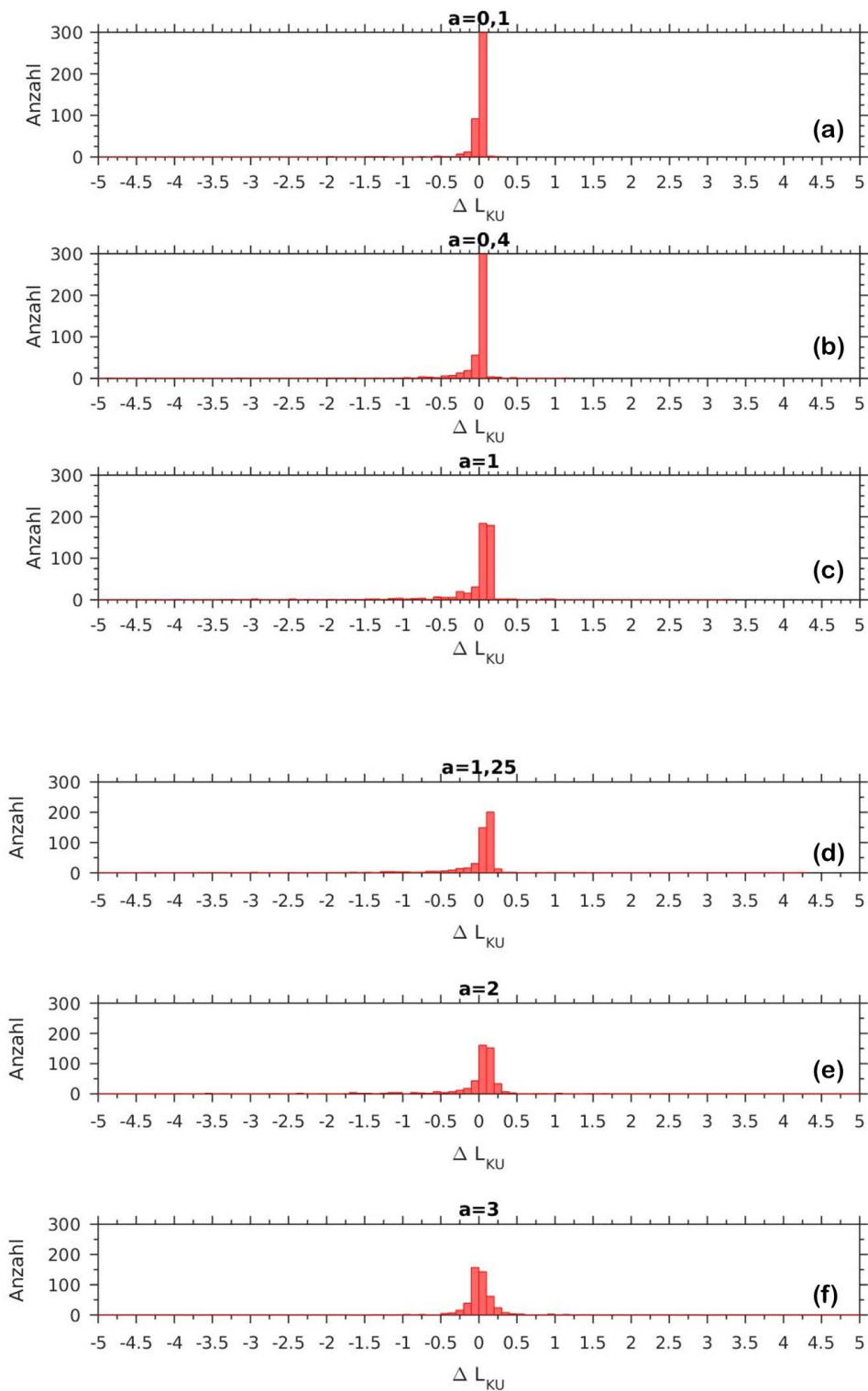


Abbildung 5.2: Histogramme der Verteilung ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $|u| = 0,5$

5.4.2 Skalierungstest für $|u| = 1$

Abbildungen 5.3 zeigen die Verteilung von ΔL_{KU} aller Faktoren für $|u| = 1$. Wie schon bei $|u| = 0,5$, zeigt die Skalierung mit $a = 0,1$ bei vielen Modellen ein ΔL_{KU} nahe Null. Mit zunehmendem Faktor a werden die Ausschläge extremer und ΔL_{KU} verschiebt sich in positive Richtung. Diese Kompensation bewirkt aber dennoch starke Verbesserungen für einige wenige Modelle. Große negative Ausschläge sind nur mehr geringfügig vorhanden.

Die Histogramme der Abbildung 5.4 zeigen dies ebenso. Bei $a = 0,1$ erzielen die meisten Modelle ein $\Delta L_{KU} > 0$. Die Beträge der Verbesserungen mit dieser Kompensation sind jedoch klein. Mit zunehmenden a verbreitet sich, wie schon bei $u = |0,5|$ das Spektrum der Verteilung von ΔL_{KU} . Nach wie vor erzielen die meisten Modelle ein positives ΔL_{KU} . Erst bei einem Faktor von $a = 3$ verschiebt sich dieser Trend und das Histogramm hat sein Maximum bei $-0,2$.

Tabelle 5.4 zeigt die statistische Auswertungen der Verteilung. Die Anzahl an Modellen mit $\Delta L_{KU} > 0$ liegt für dieses u , für $a \leq 1,25$ bei > 400 . Die meisten Modelle mit Verbesserungen weist der Faktor $a = 1,25$ auf. Obwohl die Anzahl von Modellen mit $\Delta L_{KU} > 0$ und $a = 2$ kleiner ist, verschiebt sich die Verteilung (siehe Mittelwert) zu größeren ΔL_{KU} und führt dadurch zu signifikanteren Verbesserungen. Der Faktor $a = 3$ weist einen noch besseren Mittelwert auf. Allerdings werden weniger als 200 Modelle mit dieser Kompensation verbessert. Da der Median jedoch signifikant kleiner ist weist das darauf hin, dass der Mittelwert stark von dem extremen Maximum beeinflusst wird. Generell verschiebt sich der Median bis $a = 1,25$ immer weiter ins positive, um dann wieder abzufallen. Ähnlich wie bereits bei $|u| = 0,5$ sinkt das Minimum mit zunehmendem Faktor, um sich bei Faktoren $a = 2,3$ wieder zu vergrößern. Die größte positive ΔL_{KU} findet sich bei Faktor $a = 3$. Im Vergleich zu dem nächst kleineren Faktor vergrößert sich der maximale Ausschlag um das 10-fache. Das schlägt sich auch auf den Mittelwert nieder. Sukzessive steigt dieser von leicht negativen Werten bis ins leicht positive. So große Ausschläge sind jedoch auch bei Faktor $a = 3$ eine Seltenheit. Nur 29 der Modelle schaffen ein $\Delta L_{KU} > 3$ und nur eines davon ist größer als 100.

5 Modelperturbationen

Generell zeichnet sich dieses u durch die hohe Anzahl an Verbesserungen mit mittelgroßen Kompensationsfaktoren aus. Je größer die Faktoren werden, umso kleiner wird diese Anzahl. Das wird auch an der Position des Medians sichtbar. Einzelne lokale Maxima von ΔL_{KU} nehmen mit größerem a höhere Werte an, Minima sind jedoch nicht so prominent wie bei mittlerem a . Die positiven Extremstellen werden also mit zunehmenden a größer, die Anzahl der positiven ΔL_{KU} nimmt jedoch ab.

Tabelle 5.4: Verteilung von ΔL_{KU} mit $|u| = 1$ und Faktor a , inkl. Median, arithmetisches Mittel, Minimum und Maximum sowie Anzahl $\Delta L_{KU} > 0$ und > 3

Faktor a	$\Delta L_{KU} > 0$	Median	Min.	Max.	Mittelwert	$\Delta L_{KU} > 3$
0,1	420	0,0159	-2,4432	0,0921	-0,0136	0
0,4	408	0,0571	-10,5993	6,0926	-0,0215	1
1	417	0,1017	-29,3822	15,5762	-0,0161	2
1,25	430	0,1088	-41,5792	10,0849	-0,0128	5
2	346	0,0844	-27,8220	13,1852	0,2680	17
3	198	-0,0624	-13,0768	137,3330	0,9579	29

5 Modelperturbationen

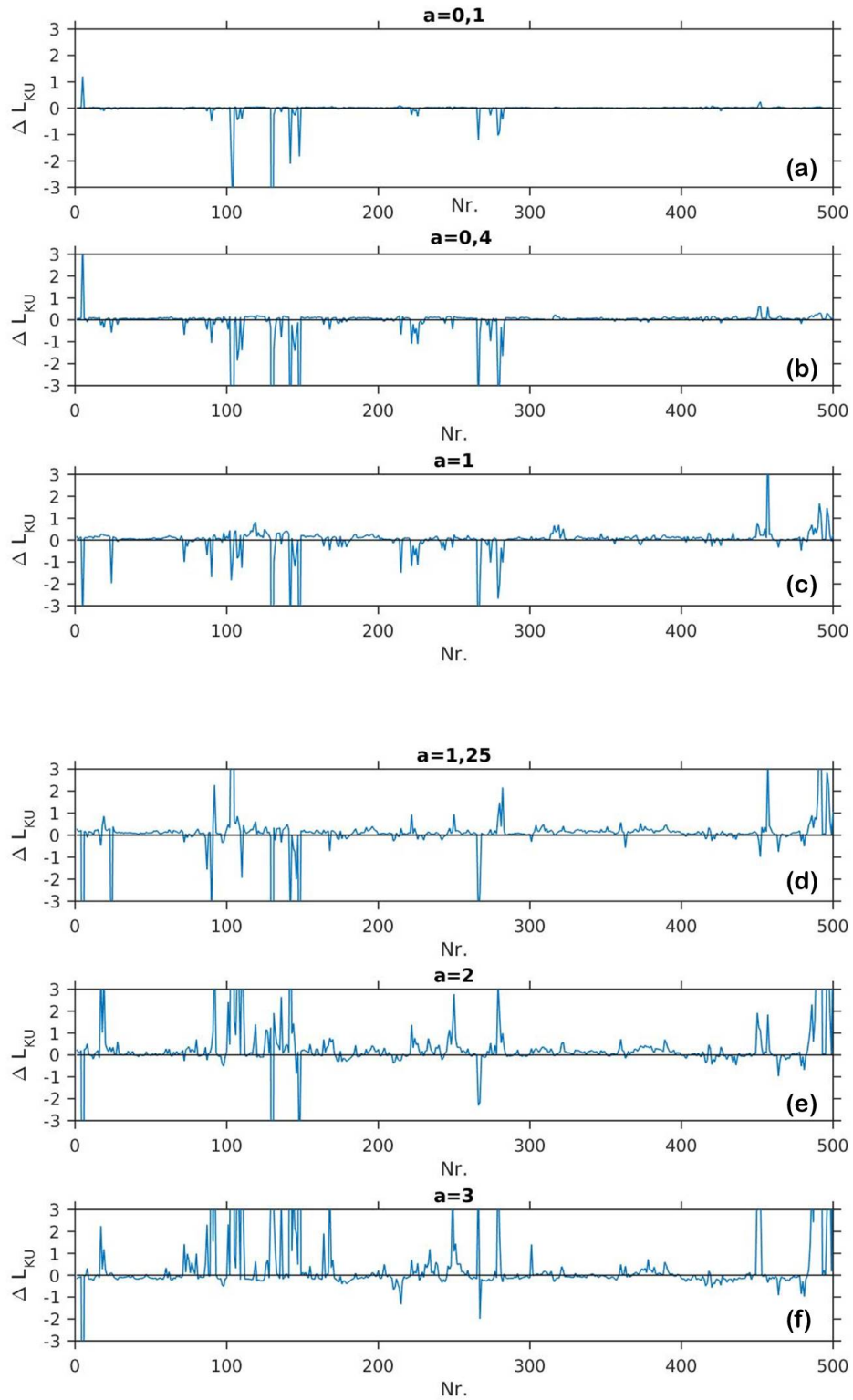


Abbildung 5.3: Verteilung von ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $|\mu| = 1$

5 Modelperturbationen

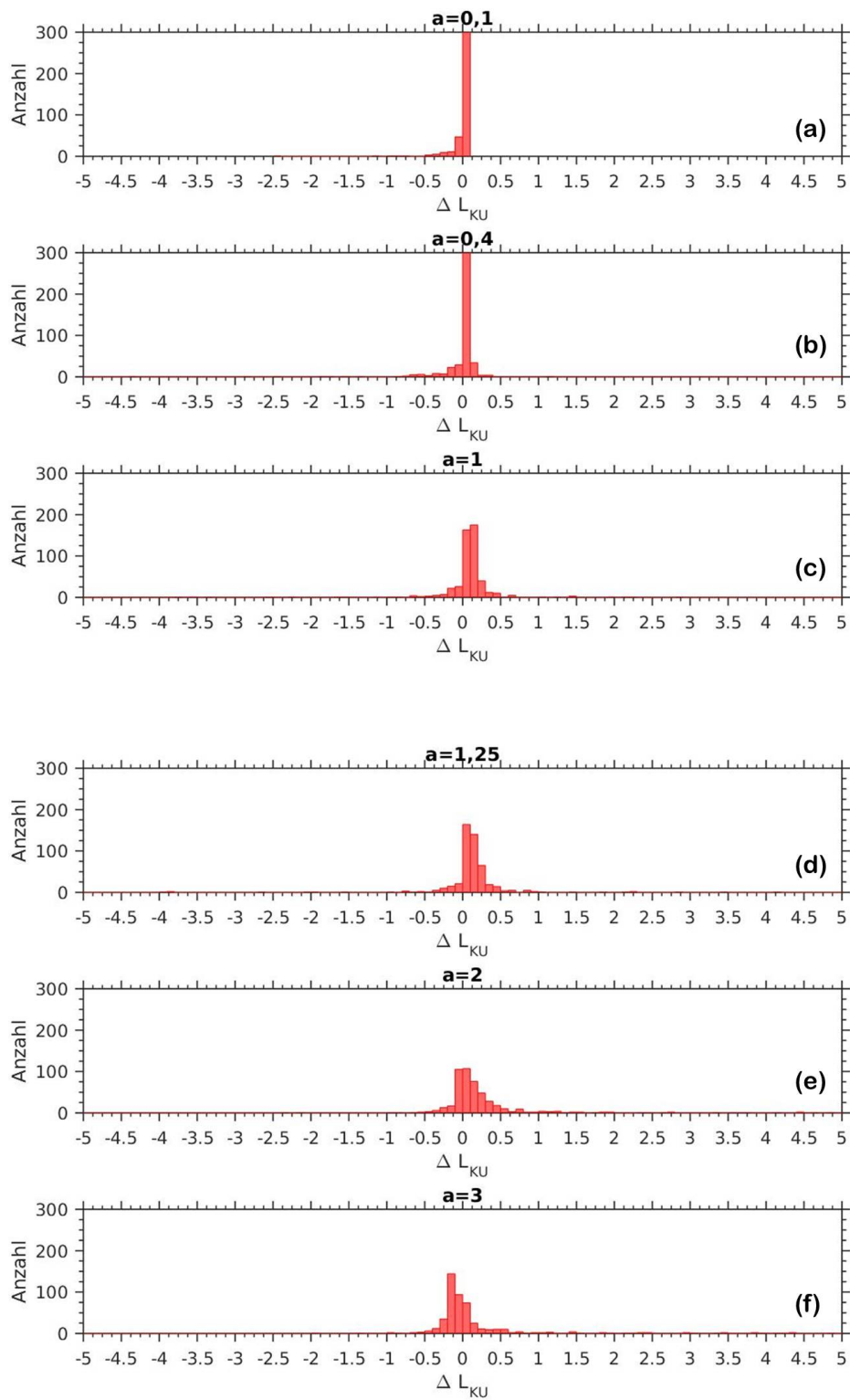


Abbildung 5.4: Histogramme der Verteilung ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $|u| = 1$

5.4.3 Skalierungstest für $|u| = 1,5$

Die Abbildungen 5.5 zeigen ΔL_{KU} aller Faktoren für $|u| = 1,5$. Diese Information ist auch in den Histogrammen 5.2 *a-f* abgebildet. Wie schon in beiden vorangegangenen Tests intensivieren sich die Ausschläge der Verteilung von mit ΔL_{KU} zunehmenden a . Gleichzeitig werden die Beträge von ΔL_{KU} größer.

Die Tabelle 5.5 zeigt auch hier statistische Größen der Verteilung. Die meisten positiven ΔL_{KU} Werte werden für $a = 0,1$ ausgewiesen. Das Histogramm dieser Kompensation zeigt jedoch, dass zwar viele Modelle verbessert werden, die Verbesserungen sind jedoch mit $0,1 \Delta L_{KU}$ sehr gering. Mit zunehmendem a sinkt die Anzahl der Modelle mit positivem ΔL_{KU} . Bei $a = 3$ werden nur mehr $\frac{1}{5}$ der Modelle verbessert. Das zeigt sich auch an der Position des Medians, der sein Maximum bei $a = 1$ hat und für große a negativ wird. Die kleinsten Minima werden bei $a = 1,25$ beobachtet. Obwohl $a = 3$ die niedrigste Anzahl an verbesserten Modellen vorweist, besitzt es das größte Minimum und Maximum. Beides schlägt sich stark auf den Mittelwert wieder, welcher doppelt so groß ist wie die der anderen Faktoren. Solch große Ausschläge des ΔL_{KU} sind auch bei diesen Bedingungen eine Seltenheit. Bei $a = 3$ sind nur 13 Modelle vorhanden, bei denen ein Betrag $\Delta L_{KU} > 3$ erreicht wird.

Auch bei $|u| = 1,5$ zeigen sich die selben Trends, wie schon bei den beiden anderen u . Bei sehr kleinen Faktoren ist wieder die Anzahl der verbesserten Modelle groß, aber der Betrag der Verbesserung des entsprechenden ΔL_{KU} klein. Mit zunehmenden a erhöht sich der Betrag der positiven Ausschläge, gleichzeitig werden zunächst Minima stärker ausgeprägt. Trotz der geringen Anzahl an positiven Ergebnissen wartet $a = 3$ mit Extremwerten an positiven ΔL_{KU} auf.

5 Modelperturbationen

Tabelle 5.5: Verteilung von ΔL_{KU} mit $|u| = 1,5$ und Faktor a , inkl. Median, arithmetisches Mittel, Minimum und Maximum sowie Anzahl $\Delta L_{KU} > 0$ und > 3

Faktor a	$\Delta L_{KU} > 0$	Median	Min.	Max.	Mittelwert	$\Delta L_{KU} > 3$
0,1	424	0,0175	-12,6616	1,2106	-0,0413	0
0,4	408	0,0575	-26,0387	3,6478	-0,1148	1
1	407	0,0716	-23,1846	4,6332	-0,0416	1
1,25	360	0,0604	-28,2205	4,7674	0,0132	1
2	220	-0,0217	-4,7464	47,2767	0,5575	25
3	99	-0,1369	-2,1231	245,8638	1,0492	13

5 Modelperturbationen

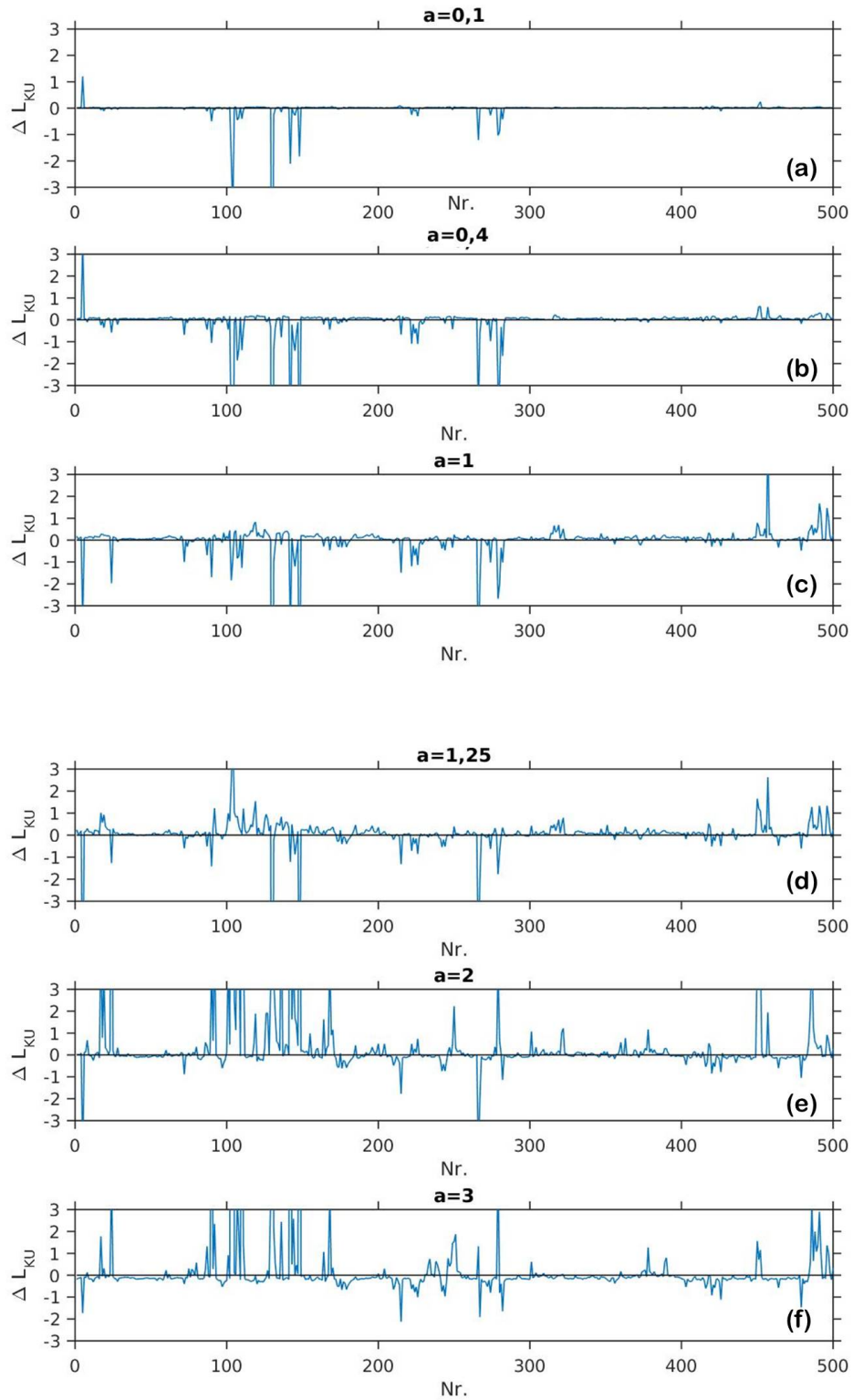


Abbildung 5.5: Verteilung von ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $|u| = 1,5$

5 Modelperturbationen

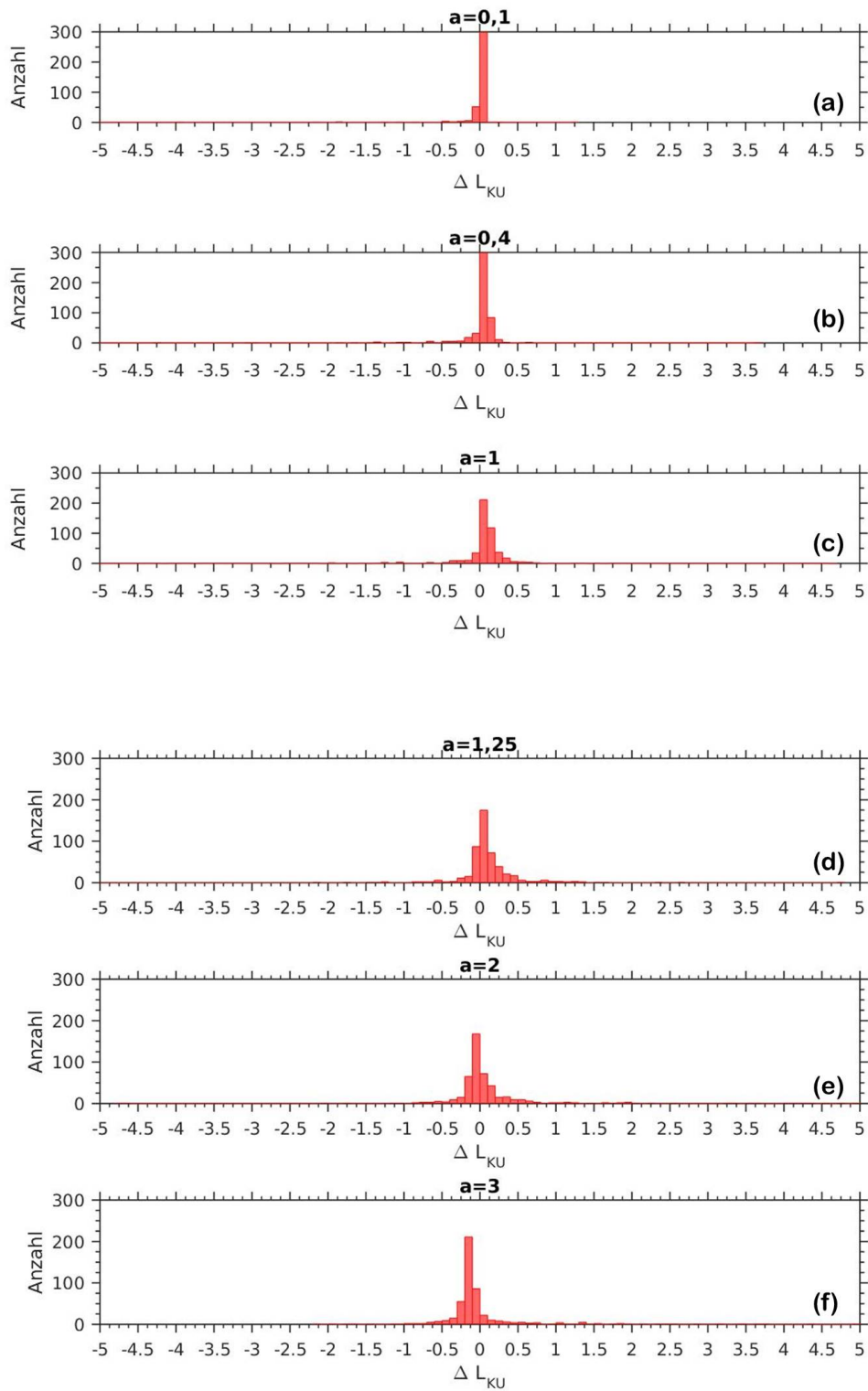


Abbildung 5.6: Histogramme der Verteilung ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $|u| = 1,5$

5.4.4 Erkenntnisse der Skalierungstests

Da $|u|$ in einer herkömmlichen Markov Kette eine Zufahlszahl mit Mittelwert=0 und Standardabweichung=1 ist, kann auf diese Zahl keinen Einfluss genommen werden. Trotzdem soll festgestellt werden, ob die Kompensationen der Verteilung von u zu guten Ergebnissen führen. Werden die drei getesteten u verglichen, ist die Anzahl des $\Delta L_{KU} > 0$ bei $|u| = 0,5$ in den meisten Fällen kleiner als die der anderen beiden. Das Maxima ist hier ebenso am niedrigsten. Bezüglich des Medians schneidet $|u| = 1,5$ am schlechtesten ab. Das $|u| = 1$ scheint hinsichtlich der Anzahl von $\Delta L_{KU} > 0$ die besten Werte zu liefern. Die Anzahl der Verbesserungen ist annehmbar hoch, dennoch entstehen auch viele lokale negative ΔL_{KU} .

Alle $|u|$ liefern mit Faktoren $a = 1 - 2$ die besten Ergebnisse. Der Median und Maximum sind in diesen Bereichen hoch, dadurch ist eine signifikante Verbesserung gegeben. Die Anzahl an positiven Beträgen von ΔL_{KU} ist jedoch bei Kompensationen mit den sehr kleinen Faktoren $a = 0,1 - 0,4$ am größten.

5.5 Vergleich der Kompensationen in unterschiedlichen Tiefen

Um herauszufinden, ob ein Zusammenhang in der Größe der Kompensation mit der Tiefe festgestellt werden kann, werden im nachfolgenden Kapitel für $|u| = 1,5$ drei Tiefenstufen analysiert. Die Auswahl der hier beschriebenen Tiefen erfolgte über das Diagonalelement der Auflösugsmatrix. Es wurde jeweils eine Tiefe mit hohen, mittleren und niedrigen Werten des Diagonalelements ausgesucht.

Aus Gründen der übersichtlicheren Schreibweise werden in den nachfolgenden Kapiteln für „relativ gut aufgelöst“ das Synonym „flach“ und für „relativ schlecht aufgelöst“ das Wort „tief“ verwendet.

5.5.1 Tiefenstufe 1

Das mittlere Diagonalelement in dieser Tiefe liegt bei 0,6987. Die Korrelation von Modellparameter ist daher in dieser Tiefe nur gering. Abbildungen 5.7 zeigen ΔL_{KU} für alle Faktoren a . Die entsprechenden Histogramme können den Darstellungen 5.8 entnommen werden. Tabelle 5.6 stellt die statistischen Größen der Verteilung von ΔL_{KU} dar.

Anhand der Abbildungen 5.7 und Histogramme 5.8 ist ein klarer Trend für $a > 1$ zur sukzessiven Verschiebung der Verteilung von ΔL_{KU} ins Negative zu erkennen. Auch in der Tabelle 5.6 zeichnet sich ein ähnlicher Trend anhand der, mit ansteigendem a geringer werdenden Anzahl an $\Delta L_{KU} > 0$ ab. Median und Minimum werden ebenfalls negativ und kleiner mit größerem a . Es gibt jedoch einen umgekehrten Trend bei Maximum und Mittelwert. Der Extremwert ist bei $a = 3$ am Größten und verzerrt dadurch auch den Mittelwert. $\Delta L_{KU} > 3$ zeigt, dass nur wenige dieser Ausreißer auftreten.

Diese flache Tiefenstufe ist gut aufgelöst, die Nebendiagonalelemente sind dementsprechend sehr klein. Werden große Kompensationen an den anderen Modellparametern angebracht führen diese zu schlechteren Ergebnissen. Relativ kleine Kompensationen ($a \leq 0,4$) erzeugen eine große Anzahl an verbesserten Modellen ($\Delta L_{KU} > 0$), der Betrag der Verbesserung (Median) ist bei diesen Kompensationen ebenfalls am größten. Insgesamt sind die Verbesserungen jedoch nicht von signifikanter Größe.

5 Modelperturbationen

Tabelle 5.6: Verteilung von ΔL_{KU} mit $|u| = 1$ und Faktor a , inkl. Median, arithmetisches Mittel, Minimum und Maximum sowie Anzahl $\Delta L_{KU} > 0$ und > 3 der Tiefenstufe 1

a	$\Delta L_{KU} > 0$	Median	Min.	Max.	Mittelwert	$\Delta L_{KU} > 3$
0,1	358	0,0147	-0,1628	0,0508	0,0057	0
0,4	354	0,0400	-0,3844	0,2468	0,0276	0
1	257	0,0126	-0,4087	1,9238	0,0953	0
1,25	213	-0,0406	-0,4289	4,3185	0,1337	7
2	136	-0,2892	-0,9084	20,5332	0,2687	20
3	60	-0,4731	-1,2759	57,2757	0,2439	17

5 Modelperturbationen

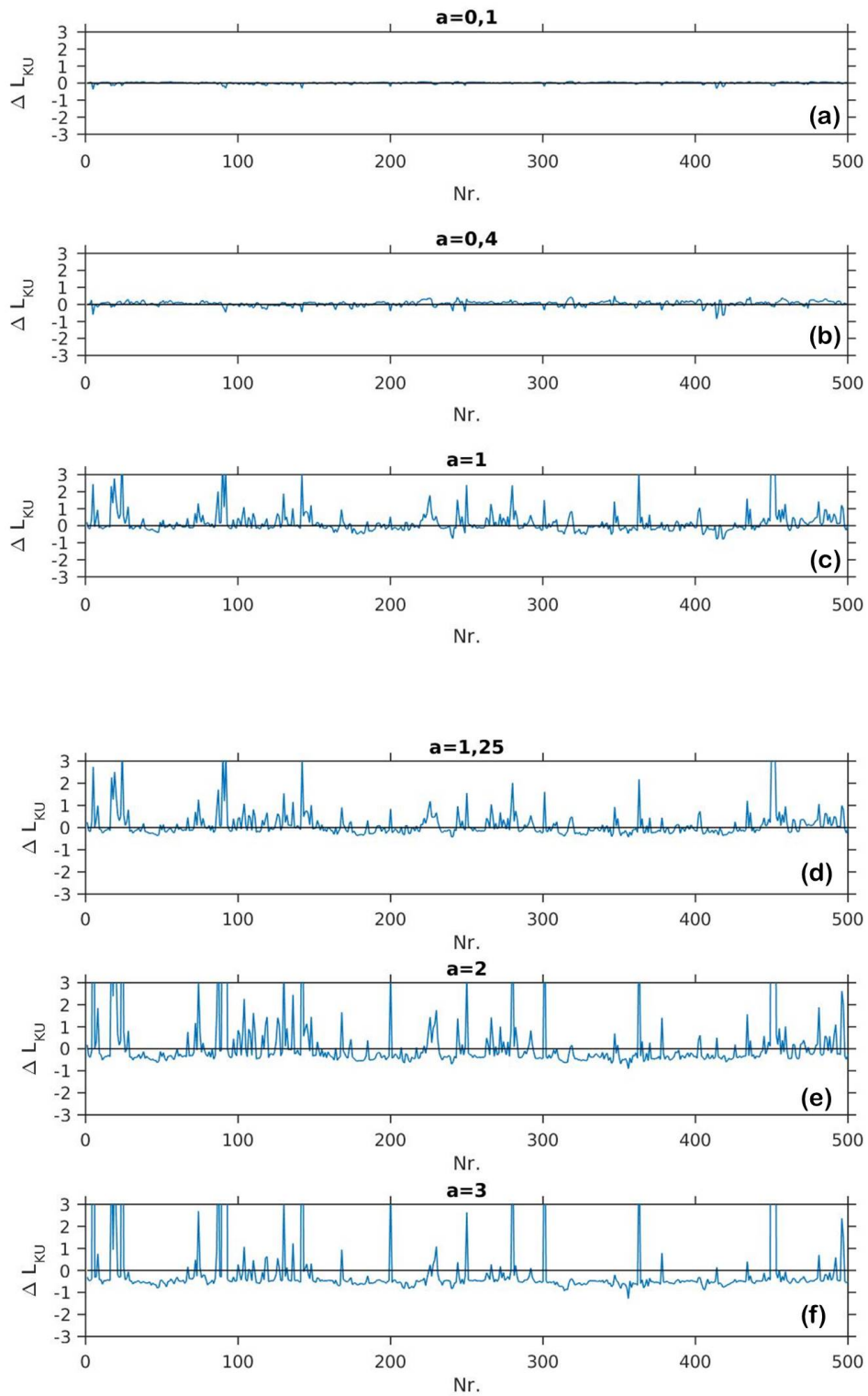


Abbildung 5.7: Verteilung von ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $|u| = 1$ in der 1. Tiefenstufe

5 Modelperturbationen

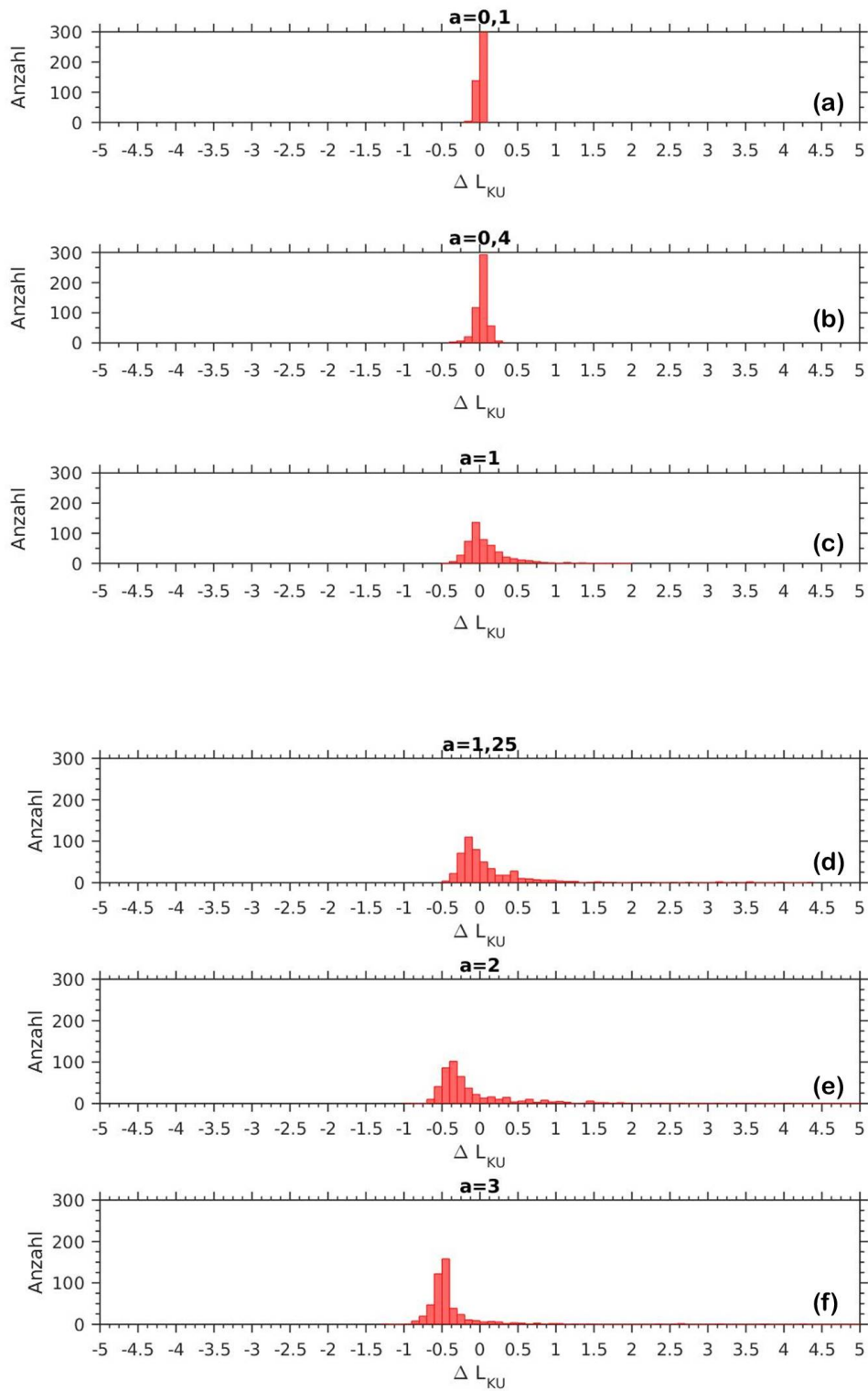


Abbildung 5.8: Histogramme der Verteilung ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $|u| = 1$ in der 1. Tiefenstufe

5.5.2 Tiefenstufe 4

Durchschnittlich hat ein Diagonalelement dieser Tiefe einen Wert von 0,4419. Abbildungen 5.9 zeigen ΔL_{KU} für alle Faktoren a , die Histogramme können Abbildungen 5.10 entnommen werden. Tabelle 5.7 listet die statistischen Größen für diese Verteilung.

Für diese Tiefenstufe kann ein ähnlicher Trend festgestellt werden. Die positiven Beträge der Verteilung $\Delta L_{KU} > 0$ nehmen mit zunehmenden a wieder deutlich ab, das ist auch in den Abbildungen 5.9 und 5.10 erkennbar. Der Betrag des Median wird bis $a = 1$ zunehmend größer und fällt danach wieder ab. Auffällig sind jedoch die Extremwerte die bei den Minima erreicht werden. Aufgrund der abnehmenden Auflösung nehmen mit der Tiefe die Beträge der Nebendiagonalelemente zu. Im Durchschnitt sind sie doppelt so groß wie jene in Tiefenstufe 1. Die relative Größe der Kompensation nimmt also mit der Tiefenstufe ebenfalls zu. In dieser Tiefenstufe fallen im Vergleich mit den beiden anderen beschriebenen die Maxima nicht so groß aus. Der Mittelwert wird in dieser Tiefenstufe eher von den großen negativen Extremstellen beeinflusst.

Für einen Faktor $a \leq 0,4$ ist der Betrag der Verbesserung ebenfalls nur gering, obwohl eine Vielzahl an Modellen verbessert wurde. Erst bei $a = 1$ zeigen sich in der Abbildung 5.9 c deutliche positive Ausschläge. Für Faktoren $a \geq 1,25$ nehmen diese positiven Ausschläge wieder ab und die Verteilung von ΔL_{KU} verschiebt sich ins Negative.

Tabelle 5.7: Verteilung von ΔL_{KU} mit $|u| = 1$ und Faktor a , inkl. Median, arithmetisches Mittel, Minimum und Maximum sowie Anzahl $\Delta L_{KU} > 0$ und > 3 der Tiefenstufe 4

σ_p	$\Delta L_{KU} > 0$	Median	Min.	Max.	Mittelwert	$\Delta L_{KU} > 3$
0,1	412	0,0140	-12,4133	0,1728	-0,0228	0
0,4	416	0,0405	-52,9199	0,5077	-0,1100	0
1	339	0,0435	-117,303	0,7477	-0,2812	0
1,25	278	0,0240	-131,5702	1,1120	-0,3343	0
2	152	-0,1083	-146,1771	3,3262	-0,4531	1
3	91	-0,3155	-147,1068	5,3062	-0,5378	5

5 Modelperturbationen

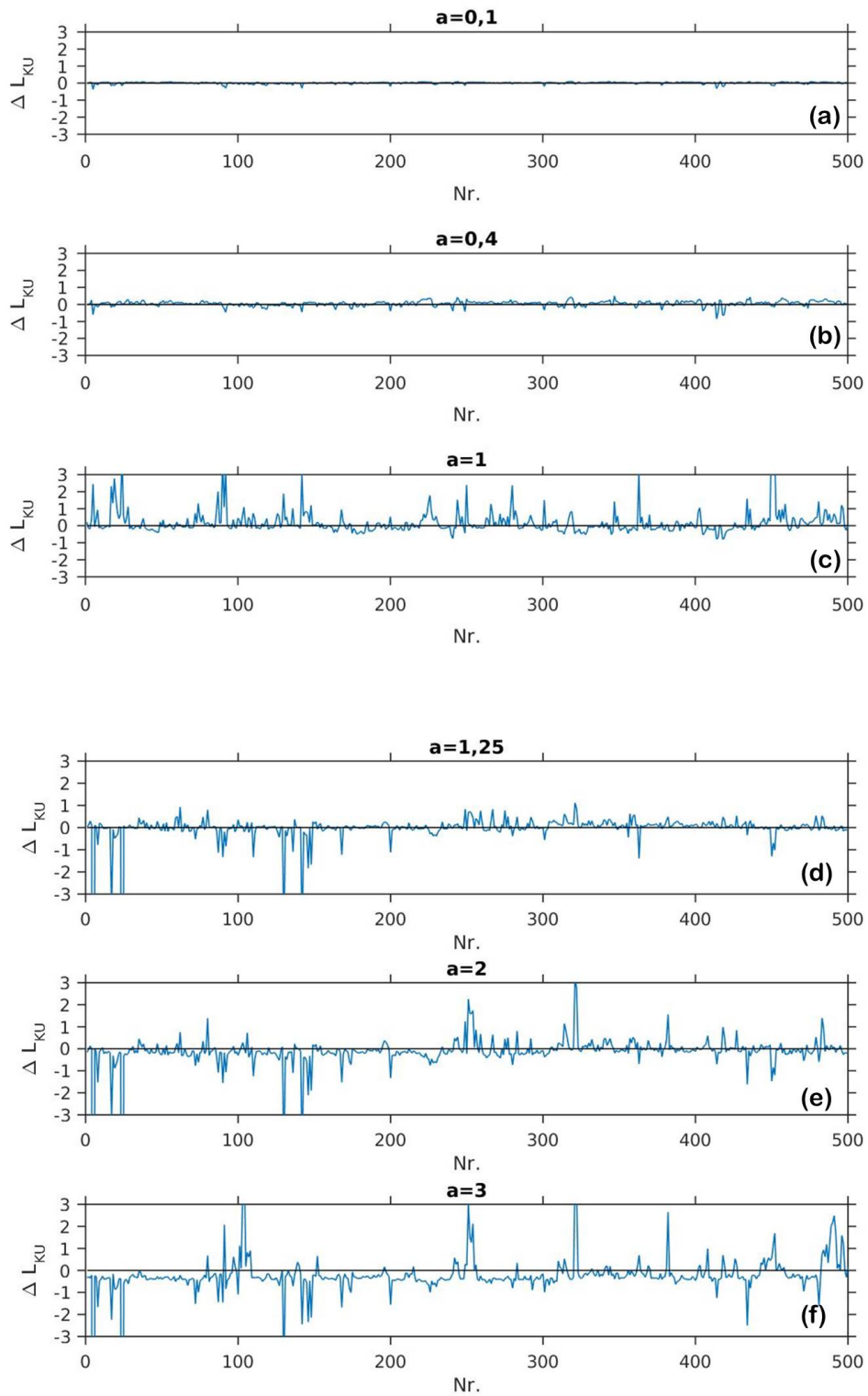


Abbildung 5.9: Verteilung von ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $|u| = 1$ in der 4. Tiefenstufe

5 Modelperturbationen

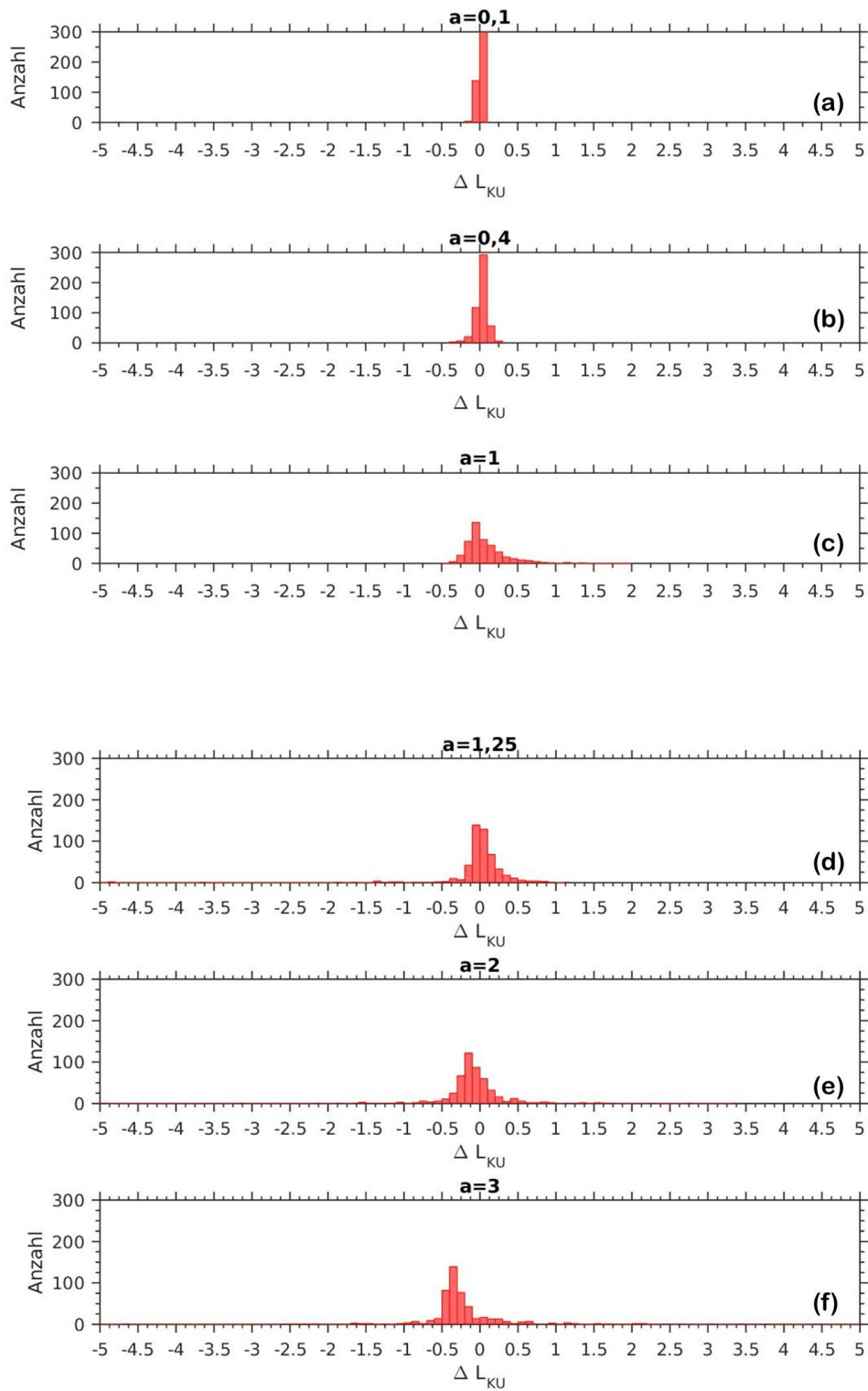


Abbildung 5.10: Histogramme der Verteilung ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $|u| = 1$ in der 4. Tiefenstufe

5.5.3 Tiefenstufe 7

In der 7. Tiefenstufe besitzen die Diagonalelemente einen durchschnittlichen Wert von 0,1539. Die Korrelation mit anderen Modellparameter ist im Vergleich zu flacheren Bereichen stark gegeben. Abbildungen und Histogramme können den Darstellungen 5.11 und 5.12 entnommen werden. Tabelle 5.8 zeigt die statistischen Größen dieser Verteilung von ΔL_{KU} .

Der Trend der beiden anderen Tiefenstufen kann auch hier, wenn auch nicht so stark ausgeprägt, erkannt werden. $\Delta L_{KU} > 0$ nimmt mit zunehmenden a ab. In diesen Tiefen erzeugen jedoch Perturbationen mit $a \geq 1,25$ bessere und vor allem mehr verbesserte Modelle als in flacheren Tiefenstufen. Die Nebendiagonalelemente verdoppeln ihren durchschnittlichen Betrag im Vergleich zu Tiefenstufe 4. Die relative Größe der Kompensation nimmt als weiter zu. Alle Kompensationen mit $a \leq 2$ erzeugen in dieser Tiefe viele Modelle mit Verbesserungen. Faktor $a = 3$ erzeugt nur wenige Modelle mit $\Delta L_{KU} > 0$, besitzt aber ein außerordentlich hohes Maximum. Wie $\Delta L_{KU} > 3$ zeigt, ist die Anzahl an solchen Extrema jedoch nur gering, der hohe Mittelwert ist daher irrelevant.

Tabelle 5.8: Verteilung von ΔL_{KU} mit $|u| = 1$ und Faktor a , inkl. Median, arithmetisches Mittel, Minimum und Maximum sowie Anzahl $\Delta L_{KU} > 0$ und > 3 der Tiefenstufe 7

σ_p	$\Delta L_{KU} > 0$	Median	Min.	Max.	Mittelwert	$\Delta L_{KU} > 3$
0,1	403	0,0487	-42,6876	2,6555	-0,3237	0
0,4	386	0,1569	-93,1404	1,0784	-0,9276	0
1	328	0,2251	-100,8777	33,7746	-1,1087	9
1,25	311	0,1872	-98,1195	50,2246	-0,9826	10
2	219	-0,0587	-66,8169	127,3476	0,4945	30
3	82	-0,4422	-50,4193	1218,2205	2,6763	10

5 Modelperturbationen

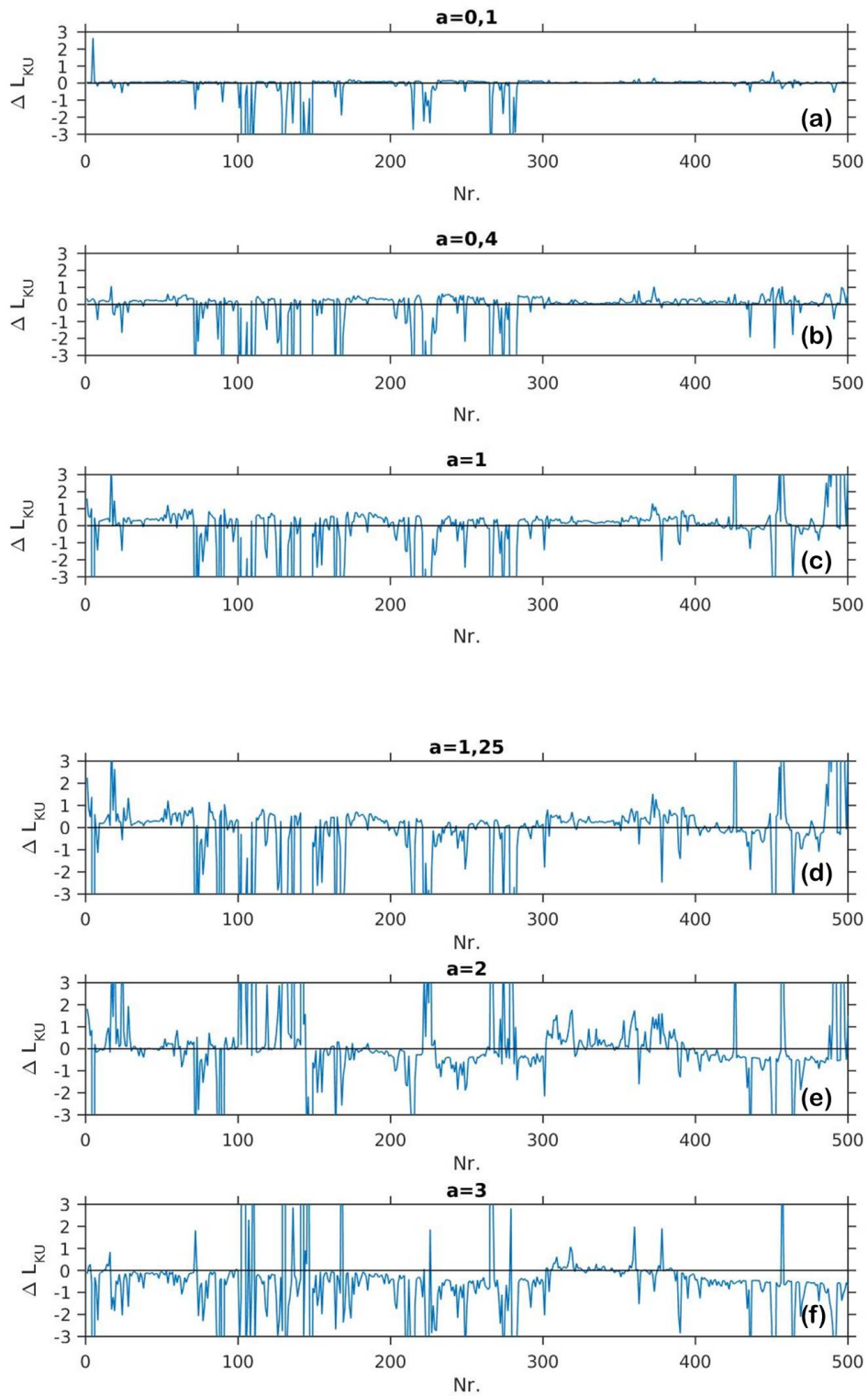


Abbildung 5.11: Verteilung von ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $|u| = 1$ in der 7. Tiefenstufe

5 Modelperturbationen

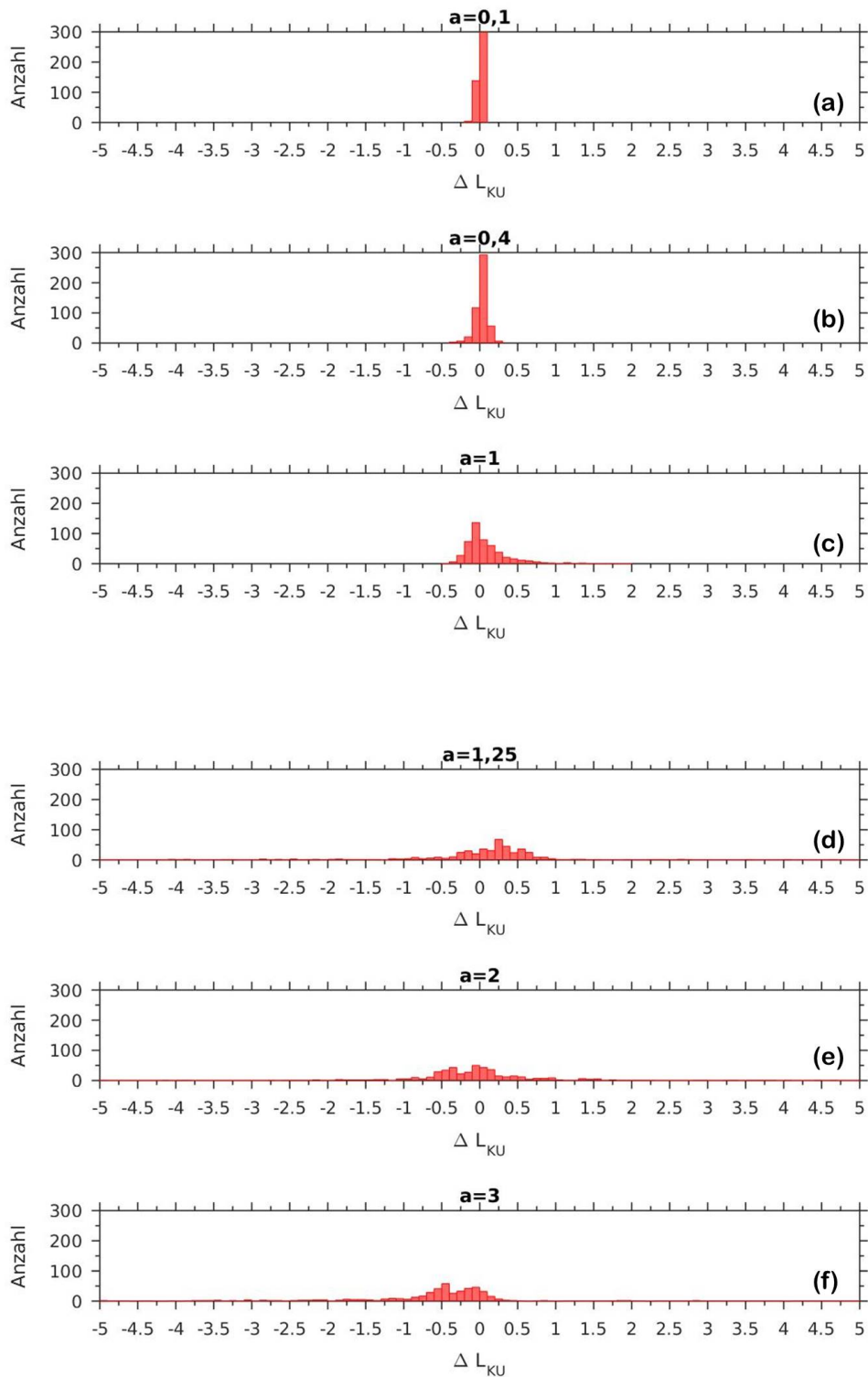


Abbildung 5.12: Histogramme der Verteilung ΔL_{KU} der 500 Testmodelle nach den Skalierungstests für $|u| = 1$ in der 7. Tiefenstufe

5.5.4 Ergebnisse des Vergleichs der Kompensationen in unterschiedlichen Tiefen

Der Vergleich der Kompensationen in den unterschiedlichen Tiefen zeigt, dass kleine ($a \leq 0,4$) in allen Tiefen viele Modelle verbessern. Der Betrag dieser Verbesserungen (vgl. entsprechende Mediane und Abbildungen) ist jedoch sehr klein, die Schrittgröße der Perturbation wird demnach nur geringfügig vergrößert.

Mit der Tiefe erzeugen auch $a \geq 1$ zunehmend mehr Modelle mit Verbesserungen. Für eine deutliche Steigerung der Schrittgröße ist eine relativ große Kompensation wichtig.

Der Faktor $a = 1$ erzielt in allen Tiefenstufen eine große Anzahl an Modellen mit guten Verbesserungen. Faktor $a = 1,25$ erzielt nur in gut aufgelösten Tiefen keine ausreichenden Verbesserungen. Faktor $a = 2$ kann erst in schlecht aufgelösten Tiefen eine große Anzahl an verbesserten Modellen mit einem großen Betrag der Verbesserung erzeugen.

Diese Erkenntnisse können in der Formel 5.11 zusammen gefasst werden. Der Faktor $\frac{0,15}{R_{jj}}$ inkludiert das Diagonalelement der Auflösungsmatrix und skaliert den Faktor a dementsprechend.

$$\text{Test-Funktional:} \quad \vec{g}(Rpj) = a \sum_{j \neq p}^n R_{pj} \frac{0,15}{R_{jj}} \vec{e}_j \quad \text{für } a=1,25 \quad (5.11)$$

6 Diskussion und Ausblick

Ziel dieser Arbeit war es, Kompensation von Perturbationen mit Hilfe der Auflösungsmatrix zu untersuchen. Aufgrund der hohen Rechenleistung wurde bereits zu Beginn des Tests entschieden, diese Tests außerhalb einer Markov Kette durchzuführen. Die Testpopulation wurde aus der Dissertation von Fontanini (2016) entnommen. Im Zuge dieser Arbeit konnte eine starke Korrelation der Modelle innerhalb der Testpopulation festgestellt werden.

Für diese Arbeit werden Kompensationen mit unterschiedlicher Skalierung für eine Standardabweichung von $\sigma_p = 0,05 [s/km]$ durchgeführt. Aufgrund der fehlenden Erfahrungswerte kann keine der eingeführten statistischen Größen als maßgeblicher Faktor für die Funktionsfähigkeit der Kompensation und deren Kompensation in einer Markov Kette herangezogen werden. Dennoch können Tendenzen mithilfe der statistischen Untersuchungen erkannt werden. Kompensationen mit großen Wahrscheinlichkeiten, auch in einer Markov Kette gute Ergebnisse zu liefern, sollten daher nachfolgenden Kriterien genügen:

- $\Delta L_{KU} > 0$: Die Mehrzahl der Modelle soll verbessert werden
- **Median**: Soll positiv sein
- **Maximum**: Viele und groß

Es ist wichtig, dass die hinzugefügten Kompensationen Schrittgröße und Akzeptanzrate erhöhen. Je größer die Kompensation, desto größer ist auch die daraus resultierende Schrittgröße. Je mehr Modelle verbessert werden, desto wahrscheinlicher ist eine gute Akzeptanzrate.

6 Diskussion und Ausblick

Generell haben alle durchgeführten Tests Verbesserungen gegenüber unkompensierten Perturbationen aufgezeigt. Eine konkrete Aussage, wie groß die Skalierung sein muss, um in einer Markov Kette gute Ergebnisse zu liefern, kann nicht getroffen werden. Die Faktoren $a = 1 - 2$ erzielen jedoch gute Ergebnisse in $\Delta L_{KU} > 0$ und der Größe der Verbesserungen. Sehr große Faktoren erzielen zwar sehr große Maxima, die Gesamtanzahl der Verbesserungen ist jedoch klein. Der umgekehrte Fall tritt bei kleinen Faktoren auf.

Für eine Identifizierung der besten Skalierungsfaktoren müsste ihr Verhalten in einer Markov Kette untersucht werden. Für weitere Tests innerhalb einer Markov Kette werden demnach auf Grund der vorliegenden Ergebnisse für die Standardabweichungen $\sigma_p = 0,05 [s/km]$ Faktorentests mit $a = 1 - 2$ empfohlen.

Aufgrund des unterschiedlichen Verhaltens der Skalierungsgrößen in unterschiedlich gut aufgelösten Tiefen, könnte auch eine tiefenabhängige Skalierung, gemäß Formel 5.11, erfolgen.

Literatur

- Aster, Richard C., Brian Borchers und Clifford H. Thurber, Hrsg. (2013). *Parameter estimation and inverse problems*. 2nd Ed. Waltham, MA: Academic Press. ISBN: 9780123850485 (siehe S. 3).
- Fontanini, Francesco (2016). *Optimization strategies for Markov chain Monte Carlo Inversion of seismic tomographic data*. Friedrich Schiller Universität Jena (siehe S. 12, 16, 24–26, 54).
- Gelman, Andrew (2006). *Prior distributions for variance parameters in hierarchical models*. Bayesian Analysis 1.3 (siehe S. 25).
- Gubbins, David (2004). *Time series analysis and inverse theory for geophysicists*. Cambridge University Press. ISBN: 0521819652 (siehe S. 3, 6).
- Hastings, W. K. (1970). *Monte Carlo sampling methods using Markov chain and their applications*. Biometrika 1.57, S. 97–109 (siehe S. 10).
- Menke, William (1989). *Geophysical data analysis: Discrete inverse theory*. Bd. 45. International geophysics series. San Diego, Calif.: Acad. Pr. ISBN: 0124909213 (siehe S. 3).
- Metropolis, Nicholas (1953). *Equation of State Calculation by Fast Computing Machines*. Journal of Chemical Physics 4.21 (siehe S. 10).
- Meyn, Sean P. und Richard L. Tweedie (1993). *Markov Chains and Stochastic Stability*. Communications and Control Engineering Series. London: Springer. ISBN: 9781447132691. DOI: 10.1007/978-1-4471-3267-7 (siehe S. 9).
- Press, Frank (1968). *Earth models obtained by Monte Carlo Inversion*. 73.16, S. 5223–5234 (siehe S. 8).

Literatur

- Tarantola, Albert (1998). *Inverse problem theory: Methods for data fitting and model parameter estimation*. 1. ed., 3. impr. Amsterdam: Elsevier. ISBN: 0444427651 (siehe S. 3).
- Waldmann, Karl-Heinz und Ulrike M. Stocker (2013). »Markov-Ketten«. In: *Stochastische Modelle*. Hrsg. von Karl-Heinz Waldmann und Ulrike M. Stocker. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, S. 9–57. ISBN: 978-3-642-32911-1 (siehe S. 9).
- Zelt, Colin A. (1998). *Three-dimensional seismic refraction tomography: A comparison of two methods applied to data from faeroe basin*. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth* 4, S. 7187–7210 (siehe S. 12).