

ВЕРОЯТНОСТНЫЙ ПОДХОД К РЕШЕНИЮ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ ПЛАНЕТАРНОЙ ГЕОФИЗИКИ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО¹

Боронин И.А., Гудкова Т.В.

Институт физики Земли им. О. Ю. Шмидта Российской академии наук, Москва, Россия
anarsull23@yandex.ru, gudkova@ifz.ru

Аннотация. Для определения распределений параметров внутреннего строения планеты по набору данных наблюдений и первоначальных предположений был численно реализован алгоритм решения обратных задач методом Монте-Карло с использованием цепей Маркова. Проверка численного метода была выполнена на классическом примере инверсии данных гравитационного поля.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, обратная задача, Байесовская статистика, цепи Маркова, внутреннее строение планет.

Введение

В последнее время все чаще для уточнения внутреннего строения планет и спутников используют методы решения нелинейных обратных задач [1-5]. Это связано с тем, что данные, полученные из наблюдений, имеют погрешность, что может существенно повлиять на решение прямой задачи. Оказалось, например, что существуют серьезные противоречия между геофизическими и геохимическими классами моделей химического состава и внутреннего строения Луны, и поиск согласования между моделями был осуществлен в рамках решения обратной задачи [6], что свидетельствует о проблеме согласования модельных параметров с наблюдаемыми величинами.

Один из способов разрешить данную проблему заключается в использовании вероятностного подхода к решению обратных задач. Байесовский подход к статистике позволяет оценить с вероятностной точки зрения соответствие между теоретическими гипотезами о модели и данным наблюдения за моделью с помощью использования Метода Монте-Карло с марковскими цепями. Ниже мы сначала опишем алгоритм, затем приведем результаты тестирования на классическом примере инверсии данных гравитационного поля [3].

1. Постановка задачи

Недра условной планеты показаны на рис. 1. Допустим, имеется вертикальная граница до глубины 100 км. Слева от границы среда однородная и плотность $\rho_1=2570$ кг/м³, а справа среда поделена горизонтальными пластами с плотностью $\rho(z)$, зависящей от глубины z . Верхняя и нижняя граница каждого слоя параллельна поверхности, которая моделируется прямой. На глубине более 100 км среда однородна и имеет плотностью 2570 кг/м³ (рис. 1).

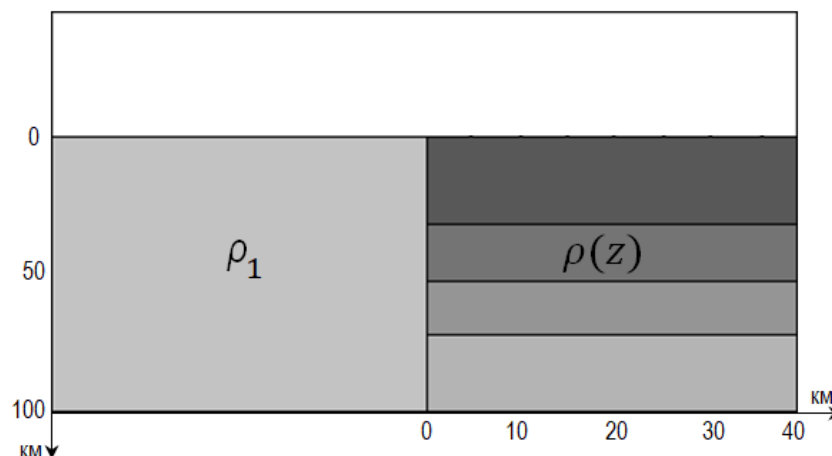


Рис. 1. Модель планеты

¹ Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-00074, <https://rscf.ru/project/23-22-00074/>

Определим теоретические гипотезы о строении планеты, которые мы хотим согласовать с данными наблюдений. Во-первых, предположим, что распределение толщин слоев справа от вертикальной границы подчиняется экспоненциальному закону распределения со средним значением 4 км. Во-вторых, предположим, что плотности каждого слоя подчиняется нормальному закону распределения со средним значением $\mu = 2570$ и среднеквадратичным отклонением $\sigma = 850$.

Неоднородность плотности создает на поверхности гравитационную аномалию, величина которой равна $d(x)$, x – расстояние по оси X на поверхности от вертикальной границы:

$$d(x) = 2G \int_0^{100} dz \frac{z\Delta\rho(z)}{z^2+x^2}. \quad (1)$$

Данные наблюдений это известные величины гравитационной аномалии в 20 точках d_{obs}^i с интервалом 2 км по оси X (рис. 1). Погрешность измерений гравитационных аномалий имеет независимые ошибки ε_i , в виде суммы двух нормальных распределений:

$$f(\varepsilon) = \frac{a}{\sqrt{2\pi}\sigma_1} \exp\left(-\frac{\varepsilon^2}{2\sigma_1^2}\right) + \frac{1-a}{\sqrt{2\pi}\sigma_2} \exp\left(-\frac{\varepsilon^2}{2\sigma_2^2}\right), \quad (2)$$

где $\sigma_1=0.25 \cdot 10^{-9}c^{-2}$, $\sigma_2=1.25 \cdot 10^{-9}c^{-2}$ и $a = 0.25$.

Для нахождения значений d_{obs}^i создается случайная модель, называемая “настоящая”, удовлетворяющая всем теоретическим гипотезам и на основе полученной модели вычисляются значения d_{obs}^i .

2. Алгоритм решения обратной задачи

Для применения метода Монте-Карло необходимо описать пространство моделей и сам алгоритм семплирования моделей в этом пространстве, дополнительно необходимо описать как алгоритм семплирования может быть изменен при помощи функции правдоподобия.

Предположим, что M – пространство всех моделей, для описанной выше задачи. Каждая точка m из модельного пространства M представляет собой экземпляр модели заданными параметрами модели, а именно: количество и толщины горизонтальных слоев определены и плотность каждого слоя известна (толщины и плотности созданы при помощи соответствующих распределений вероятностей), следовательно, на основе всех известных параметров модели можно рассчитать значение гравитационной аномалии на поверхности.

Решение обратной задачи заключается в подборе таких параметров модели, чтобы расчет значений гравитационных аномалий на этих моделях был равен известным значениям гравитационных аномалий на поверхности в пределах заданной погрешности. Стоит отметить, что чем в больших точках требуется совпадение значений гравитационной аномалии, тем выше размерность задачи.

Для применения метода Монте-Карло необходимо описать алгоритм семплирования. В качестве алгоритма семплирования, выбран алгоритм случайного блуждания, подробные рассуждения о выборе алгоритма семплирования, а также о корректности его модификации для апостериорных распределений приведены в статье [3], мы же воспользуемся полученными результатами и опишем алгоритм, который был выбран как один из лучших для данной задачи.

Рассмотрим пространство моделей M как связный граф. Вершины графа – это элементы множества моделей, а ребра – допустимые шаги с точки зрения алгоритма семплирования. Определение правила допустимости шага существенно влияет на скорость работы метода Монте-Карло. Шаг в пространстве моделей означает с вероятностью 0.5 выполнить одно из двух действий. Первое – изменить плотность случайно выбранного слоя, второе – добавить или удалить границу слоя.

Изменение плотности случайным образом выбранного слоя означает выбор нового значения плотности на основе априорной функции распределения плотности и присвоение этого значения слою.

Добавления границы слоя означает выбор точки на глубине от 0 до 100 км и с вероятностью 0.01 добавление границы слоя с последующей выбором нового значения плотности плотностей на основе априорной функции распределения новых двух слоев сверху и снизу от границы. Если в случайно выбранной точке уже присутствует граница, то с вероятностью 0.01 она удаляется и образуется новый горизонтальный слой с толщиной, равной сумме толщин слоев сверху и снизу от границы, затем выбирается новое значение плотности на основе априорной функции распределения плотности. Выбор вероятности 0.01 для добавления или удаления слоя обосновывается тем, что согласно априорной информации средняя толщина слоя равна 4 км, а шаг расчетной сетки по глубине равен 40 м, следовательно, в среднем каждые 100 шагов сетки присутствует граница слоев.

Для того чтобы случайные блуждания в пространстве априорных моделей превратить в направленные, с точки зрения наилучшего соответствия данным наблюдения, используется функция правдоподобия. Другими словами, необходимо получить апостериорное распределение, которое зависит как от априорного, так и функции правдоподобия, т.е. $\sigma(m) = C\rho(m)L(m)$, $L(m)$ – функция правдоподобия, измеряющая соответствие между данными из модели m и наблюдений, $\sigma(m)$ – апостериорная плотность вероятности, $\rho(m)$ – априорная плотность вероятности, C – константа нормировки. Можно рассматривать различные функции правдоподобия, но в данной статье мы остановимся на функции правдоподобия, согласно [3]:

$$L(m) = k \prod_i \left(a \exp \left(-\frac{(g^i(m) - d_{obs}^i)^2}{2\sigma_1^2} \right) + b \exp \left(-\frac{(g^i(m) - d_{obs}^i)^2}{2\sigma_2^2} \right) \right), \quad (3)$$

где d_{obs}^i – наблюдаемые значения гравитационных аномалий на поверхности планеты, $g^i(m)$ – значения гравитационных аномалий на поверхности планеты, вычисленных по формуле (1) на основе параметров модели m , k – константа нормировки, параметры a , b , σ_1 и σ_2 принимаются согласно формуле (2).

Для модификации алгоритма семплирования априорных вероятностных величин в алгоритм семплирования апостериорных вероятностных величин добавляется вычисления на каждом шаге функции правдоподобия $L(m)$ для текущей позиции i и предполагаемой на следующем шаге позиции j . Вероятность успешного шага вычисляется по правилу Метрополиса [7]: если $L_j(m) \geq L_i(m)$, то шаг делается всегда, если $L_j(m) < L_i(m)$, то шаг принимается с вероятностью $L_j(m)/L_i(m)$.

Целиком алгоритм решения обратной задачи методом Монте-Карло (получения апостериорных вероятностных характеристик) выглядит следующим образом:

- Создается случайная модель, удовлетворяющая всей известной априорной информации.
- Затем предпринимается попытка сделать шаг в модельном пространстве от модели с номером i к модели с номером j .
- Согласно правилу Метрополиса, шаг принимается или отклоняется, в случае отклонения шага пункт 3 повторяется.
- Делаются шаги в пространстве моделей до достижения заданного ограничения на количество шагов.

Для применения центральной предельной теоремы лучше не ограничиваться движением из одной начальной точки для построения апостериорных вероятностных распределений, для избегания попадания в локальные максимумы.

3. Численный эксперимент

Было проведено 20 численных экспериментов, каждый из которых состоял из последовательного создания более 300 000 моделей с учетом функции правдоподобия. Как правило, значения функции правдоподобия возрастает примерно 100 000 – 150 000 первых моделей, затем она стабилизируется около определенного значения и незначительно отклоняется от него в большую или меньшую сторону. Эти модели не рассматриваются для построения вероятностных характеристик т.к. они недостаточно хорошо соответствуют либо теоретическим гипотезам, либо наблюдаемым величинам. Из оставшихся примерно 200 000 моделей отбирается часть моделей т.к. ближайшие соседние модели являются зависимыми и в результате откидывания с помощью проверки на автокорреляцию моделей оставалось около 100 моделей, которые использовались для построения распределения вероятностей.

На рис. 2 показаны результаты вычисления гравитационных аномалий в 20 точках с шагом 2 км по оси X для априорных моделей (модели которые удовлетворяют только теоретическим гипотезам), красной кривая – величины гравитационных аномалий для “настоящей” модели.

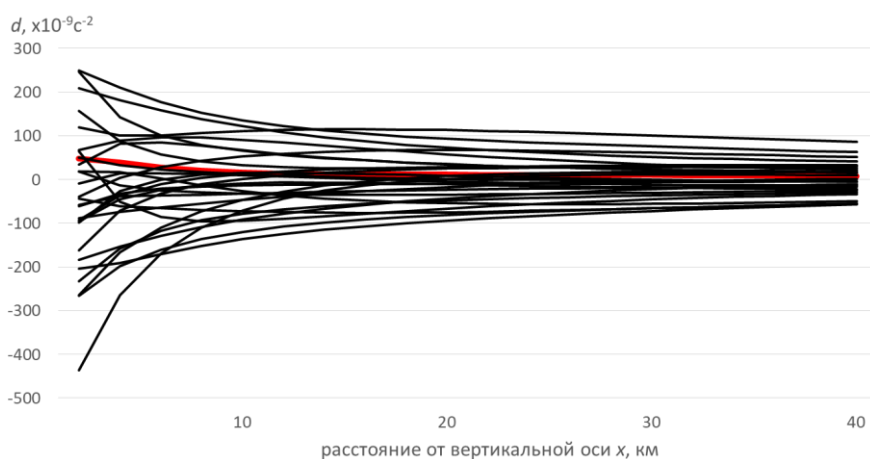


Рис. 2. Величины гравитационных аномалий для априорных моделей

На рис. 3 показаны результаты вычисления гравитационных аномалий в 20 точках с шагом 2 км по оси X для апостериорных моделей (модели которые удовлетворяют теоретическим гипотезам и результатам наблюдений за “настоящей” моделью с точки зрения функции правдоподобия), красной кривая – величины гравитационных аномалий для “настоящей” модели.

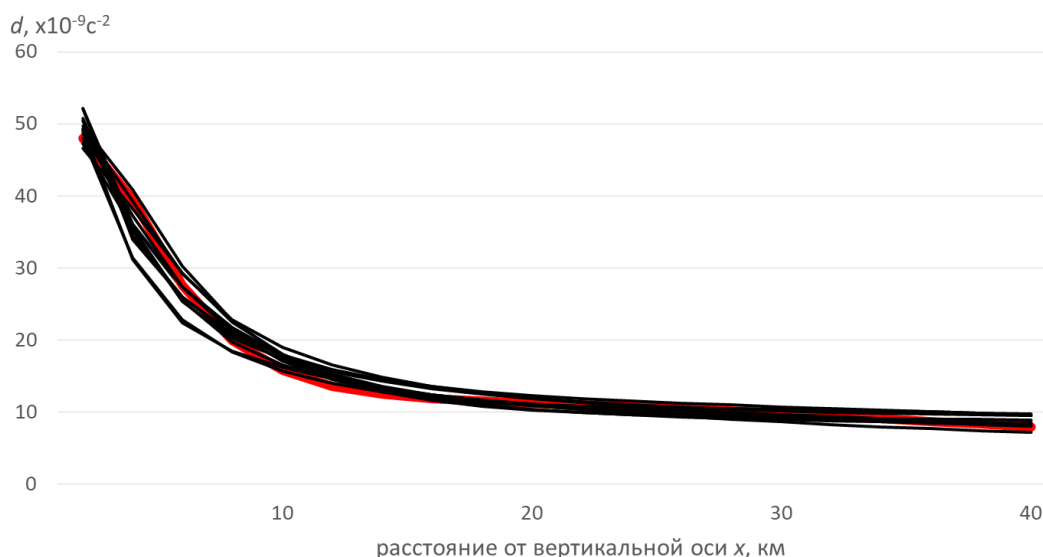


Рис. 3. Величины гравитационных аномалий для апостериорных моделей

Из рис. 3 видно, что значение гравитационных аномалий для всех апостериорных моделей отличаются в 20 расчетных точках от значений гравитационных аномалий “настоящей” модели на величину не более погрешности измерения “настоящей” модели, другими словами эти модели удовлетворяют наилучшим образом данным наблюдений и теоретическим гипотезам, на их основе будут строиться распределения вероятностей параметров модели.

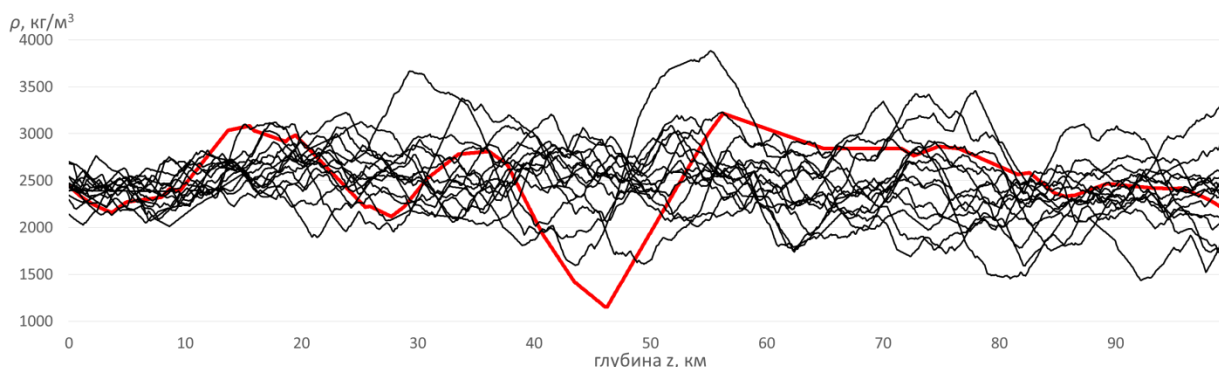


Рис. 4. Величины гравитационных аномалий для апостериорных моделей

На рис. 4 представлены различные экземпляры апостериорных моделей, а именно их плотности по оси Y от расстояния по глубине z – ось X , красной кривая – плотность “настоящей” модели.

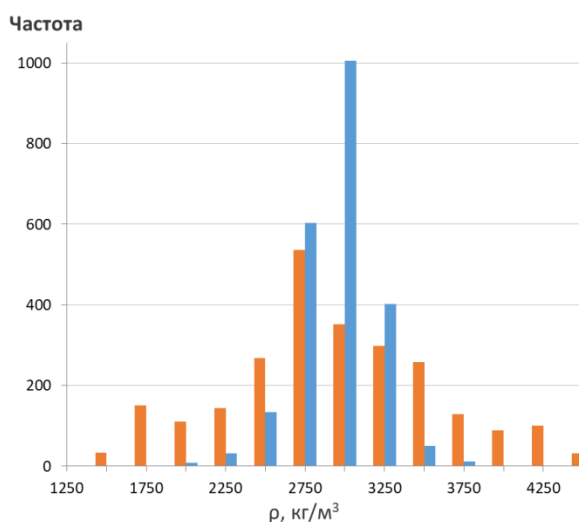


Рис. 5. Гистограмма значений плотности для апостериорных моделей на глубине 12 км

На рис. 4 видно, что у “настоящей” модели на глубинах 12 км функция плотности имеет локальный экстремум. В результате численных экспериментов (рис. 5) получилось, что на глубине 12 км чаще встречаются значения апостериорной функции плотности со значениями выше среднего значения плотности – 2570 кг/м³, а именно значения между 2750 кг/м³ и 3250 кг/м³.

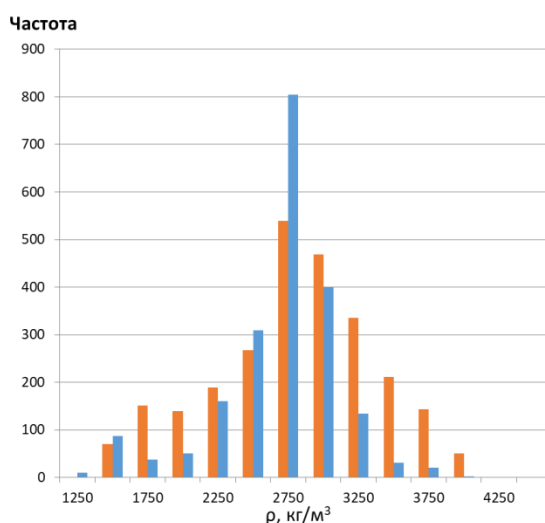


Рис. 6. Гистограмма значений плотности для апостериорных моделей на глубине 46 км

Стоит отметить, что вероятностный подход не дает точного ответа на вопрос какая плотностью будет на заданной глубине, а лишь показывает полученное распределение вероятности. Так, например, для глубины примерно 46 км на рис. 4 видно, что у “настоящей” локальный экстремум – минимум. В результате численных экспериментов (рис. 6) получилось, что на глубине 46 км чаще встречаются значения апостериорной функции плотности со средним значением плотности 2750 кг/м³, что не соответствует локальному минимуму.

5. Заключение

Результаты численного эксперимента показали качественно схожие результаты с результатами работы [3]. Применение Метода Монте-Карло позволяет учитывать результаты наблюдений и предполагаемые теоретические гипотезы наилучшим образом с точки зрения функции правдоподобия. Построение функции правдоподобия является ключевым моментом решения обратной задачи, поскольку неверно подобранный критерий может привести к ошибочным выводам.

Литература

1. *Tarantola A., Valette B.* Inverse problems – Quest for information // *J. Geophys. Res.* 1982. V.50. P. 159–170.
2. *Tarantola A.* Inverse Problem Theory: Methods for Data Fitting and Model Parameter Estimation. Elsevier, New York. 1987. 613 pp.
3. *Mosegaard K., Tarantola A.* Monte Carlo sampling of solutions to inverse problems // *J. Geophys. Res.* 1995. V.100. N B7. P. 12431–12447.
4. *Mosegaard K.* Resolution analysis of general inverse problems through inverse Monte-Carlo sampling // *Inverse Problems.* 1998. V. 14. P. 405–426.
5. *Tarantola A.* Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation, Society for Industrial and Applied Mathematics. 2005. 342 pp.
6. *Kronrod E., Matsumoto K., Kuskov O.L., Kronrod V, Yamada R., Kamata S.* Towards geochemical alternatives to geophysical models of the internal structure of the lunar mantle and core // *Adv. Space Sci.* 2022. V. 69. P. 2798–2824.
7. *Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., Teller A.H., Teller E.* Equation of state calculations by fast computing machines // *J. Chem. Phys.* 1953. V. 1 (6). P. 1087–1092.