Harita Dergisi, Temmuz 2007, Yıl:73, Sayı:138, sayfa 1-21.

TÜREV TABANLI PARAMETRE KESTİRİM YÖNTEMLERİ

(DERIVATIVE BASED PARAMETER ESTIMATION METHODS)

Ahmet Tuğrul BAŞOKUR
Ankara Üniversitesi Mühendislik Fakültesi
Jeofizik Müh. Bölümü, TandoğanKampusu, 06100 Ankara
basokur@eng.ankara.edu.tr

ÖZET

Ters-çözüm kuramında çözüme karşılık gelen yanılgı enerjisi değeri, ön-kestirim parametrelerinden *çözüm civarında* Taylor açılımı ile kestirilebilir. Böylece, yanılgı enerjisi Hessian dizeyi ve gradyen yöneyi ile temsil edilebilir. Kare ve simetrik Hessian dizeyi yanılgı enerjisinin ön-kestirim parametrelerine göre ikinci, gradyen yöneyi ise birinci türevlerini kapsar. Hessian ve gradyen sırası ile eğrisellik ve eğim bilgilerini temsil ederler. Parametre kestirim problemlerinde, Hessian ve gradyen model yanıtı cinsinden tanımlanmalıdır. Hessian $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ ve $\boldsymbol{Q}$ dizeylerinin toplamları ile verilir. $\boldsymbol{A}$ dizeyinin sütunları ön-kestirim parametrelerine göre model yanıtın türevlerini kapsar ve Jacobian dizeyi olarak adlandırılır. $\boldsymbol{Q}$ dizeyi ise ön-kestirim parametrelerine göre model yanıtın ikinci türevlerini kapsar ve doğrusal problemler için sıfırdır. Gradyen yöneyi ise Jacobian dizeyinin dönüğü ile veri farkları dizeyinin çarpımına eşittir. Parametre düzeltme yöneyi ise Hessian dizeyinin tersi ile gradyen dizeyinin çarpımından elde edilebilir. Bu işlem Newton ters-çözüm yöntemi olarak adlandırılır ve birkaç yineleme ile çözüme ulaşmayı amaçlar. Ancak, ön-kestirim çözüme oldukça yakınsa ve problemi çözüm civarında doğrusallaştırmakta ise yakınsama elde etmek olanaklıdır. Diğer durumlarda, algoritmanın duraylılığını sağlamak amacı ile Hessian veya sadece $\boldsymbol{Q}$ için bir yaklaşımda bulunmak gerekebilir. Bu makale Hessian dizeyi için yapılan yaklaşımlar ışığında çeşitli türev tabanlı parametre kestirim yöntemlerini tartışmaktadır.

Anahtar Kelimeler: Newton, En-dik iniş, Eşlenik Gradyen, Gauss-Newton ve Sönümlü En-küçük Kareler Ters-çözüm Yöntemleri, Tikhonov Düzgünleştiricisi.

ABSTRACT

In the inversion theory, an estimate for the error energy that corresponds to the solution of the problem can be made by a Taylor expansion for an initial parameter set *in the neighbourhood of the solution.* This provides the representation of the error energy in terms of Hessian matrix and the gradient vector. The square and symmetric Hessian matrix contains the second derivatives while the gradient vector consists of the derivatives of the error energy with respect to initial guess parameters. The Hessian and gradient matrices represent the curvature and gradient information, respectively. In the parameter estimation problems the Hessian and gradient matrices should be defined in terms of the theoretical model responses. The Hessian can be given by the sum of $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ and $\boldsymbol{Q}$ matrices. $\boldsymbol{A}$ is a matrix whose columns contains the derivative of model response with respect to initial guess parameters and is referred to as the Jacobian matrix. $\boldsymbol{Q}$ consists of the second derivatives of the model responses with respect to the initial guess parameters and becomes equal to

zero for the linear problems. The gradient vector equals to the multiplication of transpose of the Jacobian by the data differences vector. Then the parameter correction vector is calculated by the multiplication of the inverse of Hessian matrix with the gradient vector. This process is referred as the Newton inversion method. It requires a few numbers of iterations to reach the minimum of the error energy function. However, this is only possible if the initial guess is close to the solution and provides a linearized problem around the minimum of the error energy. For other cases, an approximation for the Hessian or only for $\boldsymbol{Q}$ is made to obtain stable inversion steps. This paper discusses a variety of derivative based parameter estimation methods in view of approximations made for the representation of Hessian matrix.

Key Words: Newton, Steepest-descent, Conjugate gradient, Gauss-Newton and Damped least-squares inversion methods, Tikhonov Stabilizer.

1. TERS-ÇÖZÜM İŞLEMİNİN TANIMI

Gözlem veya deneylerin amacı bir sistem veya sürecin özelliklerini tanımlamaktır. Sistem veya sürecin özellikleri bir matematik model ile betimlenmeye çalışılır. Bu matematik modeli tanımlayan bağıntıda kullanılan ve sistemin yapısını belirleyen sabitler 'parametre' ve bunların sınıflandırılması, anlamlandırılması ve sayılarının saptanması 'parametreleştirme' olarak adlandırılır. Parametreler doğrudan ölçülebilen büyüklükler değildir. Ölçülebilen başka büyüklüklerden, hesap yolu ile saptanmaya çalışılır. Örneğin, bir depremin odak derinliği doğrudan ölçülebilir bir büyüklük değildir. Ancak, çeşitli kayıt istasyonlarında ölçülmüş deprem verisinden hesaplanabilir. Yerbilimlerinde parametreleştirme, yeraltının sonlu sayıda birime bölünmesi ile gerçekleştirilir. Bu birimlerin geometrisini ve fiziksel özelliklerini betimleyen iki tür parametre vardır. Farklı her jeolojik birimin yeraltındaki konum ve biçimini tanımlayan kalınlık, genişlik gibi uzaysal değişkenler geometrik parametreleri oluşturur. Fiziksel parametreler ise ölçülen alanın değişimine neden olan yoğunluk, özdirenç gibi özelliklerdir.

Veri ve parametreleri birbirine bağlayan matematik bağıntı 'düz çözüm (forward solution)' olarak adlandırılır ve modelin belirli bir fiziksel durumu için deneysel gözlemleri betimleyerek, veri ve parametreler arasındaki ilişkiyi verir. 'Kuramsal veri' veya 'model yanıtı (model response)', parametrelere atanan bazı sayısal değerler yardımı ile çeşitli değişken değerleri için düz çözümden hesaplanan sayısal veridir ve parametreler ile değişkenlerin bir fonksiyonudur.

Veri ve parametreler arasında dizey (matrix) denklemleri ile ifade edilebilen bir ilişki yok ise parametreler doğrudan çözülemezler. Bu durumda, parametrelerin hesabı için dolaylı bir yol izlenir. Önceden belirlenen bir ölçüt çerçevesinde, ölçülen veri ile çakışma sağlayan bir kuramsal veri kümesi bulunmaya çalışılır. Çakışma sağlayan kuramsal verinin hesaplanmasında kullanılan parametrelerin problemin bir çözümü olduğu düşünülür. Ölçülen veriye çakışan kuramsal veri kümesinin aranması işlemi ise 'parametre kestirimi (parameter estimation)' veya 'ters-çözüm (inversion)' olarak adlandırılır.

2. TERS-ÇÖZÜM İŞLEMİNİN YÜRÜTÜLMESİ

Ters-çözüm işlemi, parametrelerinin sayısal değerleri için bir ön-kestirim değerinin yorumcu tarafından sağlanması ile başlar. Bu ön-kestirime karşılık gelen kuramsal veri hesaplanarak, ölçülen veri ile karşılaştırılır. Eğer yeterli çakışma elde edilememiş ise ölçülen ve kuramsal veri arasındaki farkları azaltmak için parametreler yenilenir ve işlem 'durdurma ölçütlerinin' sağlanmasına kadar devam eder (Şekil 1). Ters-çözüm işleminin amacı, ölçülen ve kuramsal veri kümelerinin çakışmalarının sağlanmasıdır ve bu işlem 'çakışmazlığın (misfit)' enküçüklenmesi ile denetlenir. Çakışmazlık veya diğer adı ile 'yanılgı enerjisi (error energy)', değişkenin her değerinde veri farklarının mutlak değerinin herhangi bir dereceden kuvvetini hesaplamak ve bunları toplamak ile elde edilebilir:

$$E_L(p) = \sum_{i=1}^{n} \left| (d_i - f(x_i; p) \right|^L = \sum_{i=1}^{n} \left| e_i \right|^L . \qquad (1)$$

Burada; n; veri sayısı, p; parametreler, d_i; ölçü ve x_i; değişken değerleri, $f(x_i; p)$ kuramsal veridir. e_i; i inci yatay eksen değerindeki ölçülen ve kuramsal veri arasındaki fark $e_i = d_i - f(x_i; p)$ ve L bir tam sayıdır ve bir problemin çözümü sırasında sabit olarak alınmalıdır. Çünkü sabit bir L değeri için çakışma ölçütü sadece parametre değerlerine bağımlı ve dolayısı ile sadece parametrelerin bir fonksiyonu olacaktır. En yaygın kullanılan L değeri ikidir ve bu durumda yöntem en-küçük kareler adını alır. Parametre değerleri, gerçeğe ne kadar yakın ise yanılgı enerjisi de o kadar küçük olacağından, ters-çözüm işlemi de yanılgı enerjisi fonksiyonunu enküçükleyen parametre kümesinin bulunmasına indirgenmiş olur (Başokur, 2002).

Şekil 1. Ters-çözüm işleminin yalınlaştırılmış akış şeması.

3. NEWTON TERS-ÇÖZÜM YÖNTEMİ

Parametreler bilinmediğinden (1) bağıntısı ile verilen *E(p)* enerji yanılgısının değerinin de bilinmesi olanaklı değildir. Ancak, ön-kestirim parametrelerinden hesaplanabilen $E(p^0)$ değerinden yararlanılarak, çözüm parametrelerine karşılık gelen *E(p)* değerleri kestirilebilir. Şekil 2 de, iki parametreli bir problem için yatay ve düşey eksenler sırası ile birinci ve ikinci parametreyi göstermek üzere, herhangi bir parametre çiftine karşılık gelen yanılgı enerjisi değerlerinden eş enerji çizgileri çizilerek elde edilen harita görüntülenmiştir. Bu harita anlatım amacı ile hesaplanmış ve görüntülenmiş olup, parametre kestirim probleminde önceden bilinemez. Çözüm parametreleri en küçük yanılgı enerjisi üreteceğinden, *E(p)* noktası yanılgı enerjisi haritasının minimumundadır. Newton ters-çözüm yönteminin amacı, $E(p^0)$ noktasından çözüm parametrelerine karşılık gelen *E(p*) minimumuna tek adımda ulaşmaktır. *E(p)* değeri, ön-kestirim parametrelerinin çözüm parametrelerine yakın olduğu varsayımı ile $E(p^0)$ değerinden Taylor açılımı ile elde edilebilir. Bu varsayım, doğrusal olmayan problemlerin, çözüm civarında doğrusal davranış göstermesi durumunda geçerlidir. Üçüncü ve daha yüksek dereceli türevler ihmal edilir ise izleyen açılım yazılabilir:

$$E(p) = E\left(p^0\right) + \sum_{j=1}^{m} \frac{\partial E\left(p^0\right)}{\partial p_j^0}\left(p_j - p_j^0\right) + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{m}\sum_{k=1}^{m} \frac{\partial^2 E\left(p^0\right)}{\partial p_j^0\, \partial p_k^0}\left(p_j - p_j^0\right)\left(p_k - p_k^0\right). \qquad (2)$$

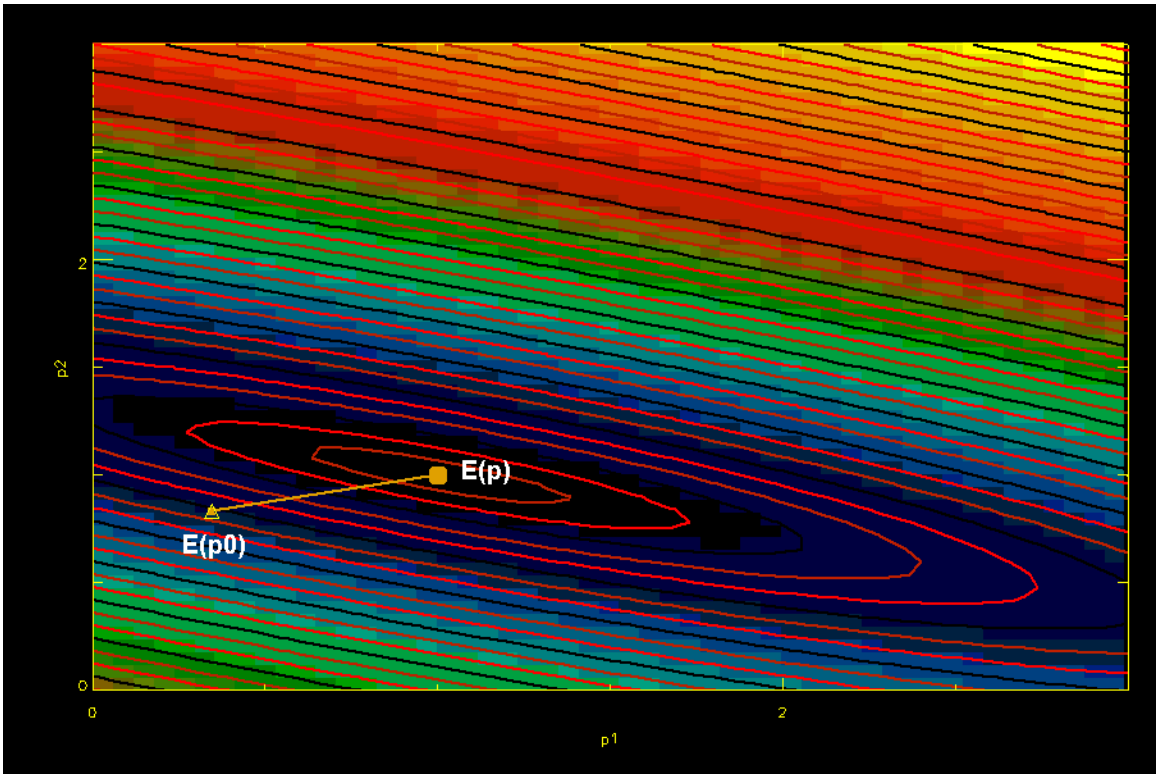
Dizeyler ve yöneyler (vectors) kalın harfler ile gösterilmek üzere, *m* adet parametre için izleyen tanım ile

$$\nabla \boldsymbol{E} = \boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} \partial E(p^0)/\partial p_1^0 \\ \partial E(p^0)/\partial p_2^0 \\ \vdots \\ \partial E(p^0)/\partial p_m^0 \end{pmatrix}_{mX1} \qquad (3)$$

(2) bağıntısının sağ yanındaki ikinci toplam,

$$\left[(\boldsymbol{\Delta p}^T)_{1xm}\boldsymbol{\gamma}_{mx1}\right]_{1x1} = \sum_{j=1}^{m} \frac{\partial E\left(p^0\right)}{\partial p_j^0}\left(p_j - p_j^0\right) \qquad (4)$$

olarak yazılabilir ve sonuç bir adet sayısal değer üretir. Burada, $\boldsymbol{\gamma}$, yanılgı enerjisinin parametrelere göre kısmi türevlerini ve dolayısı eğim bilgisini kapsar. $\boldsymbol{\Delta p}$, çözüm parametreleri ile ön-kestirim parametreleri arasındaki farkları kapsayan parametre düzeltme yöneyidir. *T* simgesi ise bir dizeyin dönüğünü (transpose) göstermektedir.



Şekil 2. Ön-kestirim ve çözüm parametrelerine karşılık gelen $E(p^0)$ (üçgen) ve $E(p)$ (dolu kare) değerlerinin yanılgı enerjisi harita üzerinde gösterimi (ön-kestirim parametreleri p_1^0 =0.34, p_2^0 =0.83 ve çözüm parametreleri p_1 =1, p_2 =1).

Benzer olarak, *mxm* boyutundaki izleyen kare dizeyin tanımlanması ile

$$\boldsymbol{H} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E(p^0)}{\partial p_1^0 \partial p_1^0} & \frac{\partial^2 E(p^0)}{\partial p_1^0 \partial p_2^0} & . & \frac{\partial^2 E(p^0)}{\partial p_1^0 \partial p_m^0} \\ \frac{\partial^2 E(p^0)}{\partial p_2^0 \partial p_1^0} & \frac{\partial^2 E(p^0)}{\partial p_2^0 \partial p_2^0} & . & \frac{\partial^2 E(p^0)}{\partial p_2^0 \partial p_m^0} \\ . & . & . & . \\ \frac{\partial^2 E(p^0)}{\partial p_m^0 \partial p_1^0} & \frac{\partial^2 E(p^0)}{\partial p_m^0 \partial p_2^0} & . & \frac{\partial^2 E(p^0)}{\partial p_m^0 \partial p_m^0} \end{pmatrix} \tag{5}$$

(2) bağıntısının sağ yanında ön-kestirim parametrelerine göre ikinci türevleri kapsayan terim, dizey denklemi olarak,

$$\left[(\boldsymbol{\Delta p}^T)_{1xm} \; \boldsymbol{H}_{mxm} \; (\boldsymbol{\Delta p})_{mx1} \right]_{1x1} = \sum_{j=1}^{m} \sum_{k=1}^{m} \frac{\partial^2 E(p^0)}{\partial p_j^0 \partial p_k^0} \left(p_j - p_j^0\right)\left(p_k - p_k^0\right) \tag{6}$$

şeklinde yazılabilir. Dizey çarpımları sonucunda bir adet sayısal değer elde edilir. ***H*** dizeyi, Hessian dizeyi olarak adlandırılır ve ikinci türevleri kapsadığından yanılgı enerjisi haritasının eğrisellik bilgisini içermektedir. Bu dizeyin bireyleri arasında

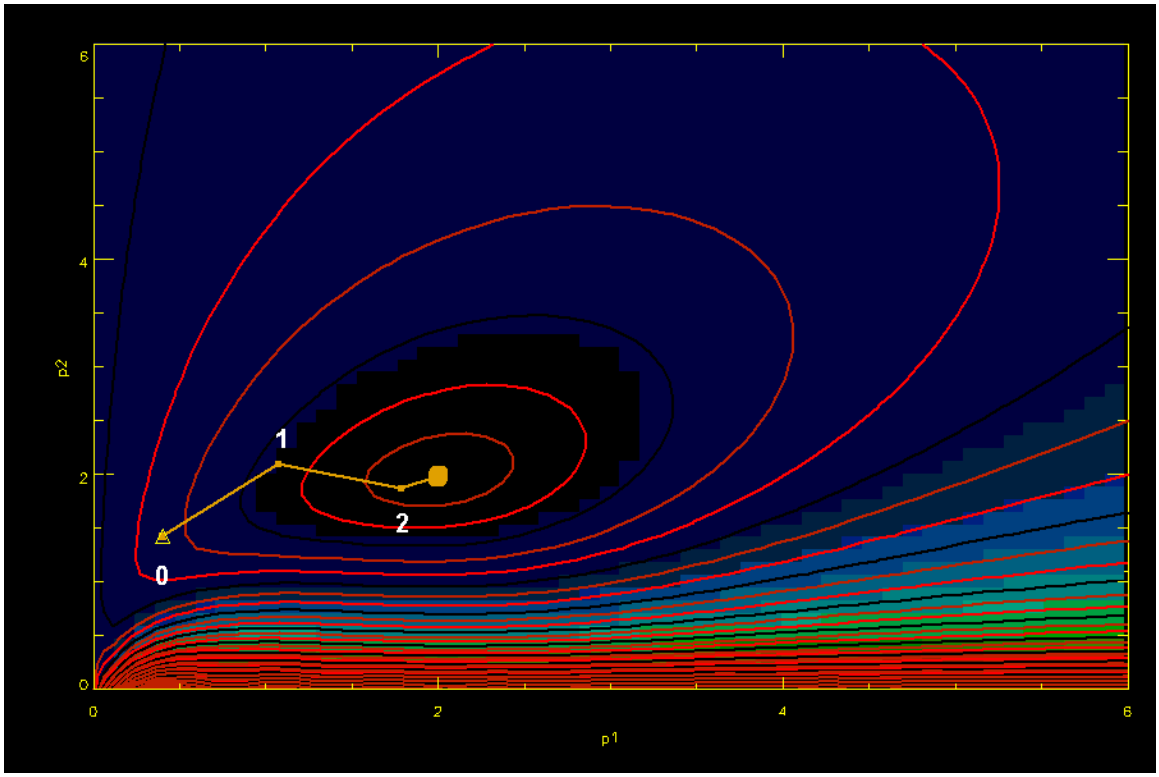
$$h_{jk} = h_{kj} = \frac{\partial^2 E\left(p^0\right)}{\partial\, p_j^0 \partial\, p_k^0}$$

ilişkisi bulunduğundan, köşegene göre bakışımlıdır. (4) ve (6) sonuçları kullanılarak, (2) bağıntısından, yanılgı enerjilerinin farkı için

$$E(p) = E(p^0) + \boldsymbol{\Delta p}^T \boldsymbol{\gamma} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\Delta p}^T \boldsymbol{H} \boldsymbol{\Delta p}$$

$$E(p) - E(p^0) = \boldsymbol{\Delta p}^T \boldsymbol{\gamma} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\Delta p}^T \boldsymbol{H} \boldsymbol{\Delta p} \qquad (7)$$

elde edilir. Eğer, ön-kestirim parametreleri, gerçek parametre değerlerine yaklaşır ise ***Δp*** yöneyi de sıfıra yaklaşır. Bu nedenle, yanılgı enerjisi farklarının ***Δp*** yöneyine göre türevleri minimum yapılmalıdır. (7) bağıntısının türevinin sıfıra eşitlenmesi ile



Şekil 3. Newton algoritması ile ters-çözüm adımlarının yörüngesi. (0) ön-kestirim parametreleri ve diğer rakamlar yineleme numaralarıdır. Toplam 4 yinelemenin son iki yineleme adımı küçüktür. (ön-kestirim değerleri p_1^0=0.4, p_2^0=1.43 ve çözüm parametreleri p_1=2, p_2=2).

$$\frac{\partial\left[E(p)-E(p^0)\right]}{\partial \boldsymbol{\Delta p}} = \boldsymbol{\gamma} + \frac{1}{2}\boldsymbol{H\Delta p} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\Delta p}^T\boldsymbol{H} = 0$$

bulunur. $\boldsymbol{\Delta p}$ bir yöney olduğundan $\boldsymbol{H}$ dizeyi ile çarpımı da bir yöneydir. Satır ve sütun yöneyler birbirine eşit olduğundan,

$$(\boldsymbol{H\Delta p})_{mx1} = (\boldsymbol{\Delta p}^T\boldsymbol{H})_{1xm}$$

yazılabilir. Buradan,

$$(\boldsymbol{H\Delta p})_{mx1} = -\boldsymbol{\gamma}_{mx1}$$

elde edilir. $\boldsymbol{H}$, mxm boyutunda kare bir dizey olduğundan tersi (inverse) alınabilir. Yukarıdaki bağıntının her iki yanı soldan $\boldsymbol{H}$ dizeyinin tersi ile çarpılır ise

$$\boldsymbol{\Delta p}_{mx1} = -\boldsymbol{H}^{-1}.\boldsymbol{\gamma} = (\boldsymbol{H}^{-1}_{mxm}.\boldsymbol{\gamma}_{mx1})_{mx1} \qquad (8)$$

yazılabilir. Newton algoritmasının davranışı Şekil 3 de gösterilmiştir.

4. GRADYEN VE HESSIAN DİZEYLERİNİN HESAPLANMASI

(8) bağıntısı ile verilen parametre düzeltme yöneyini hesaplayabilmek için gradyen ve Hessian dizeylerinin elde edilmesi gerekir. $f(x_i;p^0)$ değerleri, ön-kestirim parametrelerinden hesaplanan kuramsal değerleri göstermek üzere (1) bağıntısı ile verilen yanılgı enerjisinin L=2 için sıra numarası k olan bir parametreye göre kısmi türevi alınır ise

$$\frac{\partial\ E(p^0)}{\partial\ p_k^0} = -2\sum_{i=1}^{n}(d_i - f_i^0)\ \frac{\partial f(x_i;p^0)}{\partial p_k^0} = 2\sum_{i=1}^{n} e_i\ \frac{\partial e_i}{\partial p_k^0} \qquad (9)$$

elde edilir. Bu bağıntının her parametre için yazılması ve bulunan denklem sisteminin dizey çarpımları olarak düzenlenmesi ile gradyen yöneyi,

$$\boldsymbol{\gamma} = -2\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{\Delta d} \qquad (10)$$

olarak tanımlanabilir. Burada, $\boldsymbol{\Delta d}$ veri farkları yöneyi olarak adlandırılır ve $nx1$ boyutundaki ölçülen veri yöneyi ($\boldsymbol{d}$) ile ön-kestirim parametrelerinden hesaplanan kuramsal veri yöneyinin ($\boldsymbol{f}$) farklarını kapsar ($\boldsymbol{\Delta d}=\boldsymbol{d}-\boldsymbol{f}$) ve nx1 boyutunda bir yöneydir. Jacobian dizeyi olarak adlandırılan nxm boyutundaki $\boldsymbol{A}$ dizeyinin bireyleri ise x_i yatay eksenindeki kuramsal verinin, j inci parametreye göre türevinden oluşur:

$$a_{ij} = \frac{\partial f(x_i;p^0)}{\partial p_j^0}. \qquad (11a)$$

Jacobian dizeyinin bir kolonu bütün ölçü noktalarında belirli bir parametreye göre kısmi türevleri kapsamaktadır:

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f(x_1;p^0)}{\partial p_1^0} & \frac{\partial f(x_1;p^0)}{\partial p_2^0} & . & . & \frac{\partial f(x_1;p^0)}{\partial p_m^0} \\ \frac{\partial f(x_2;p^0)}{\partial p_1^0} & \frac{\partial f(x_2;p^0)}{\partial p_2^0} & . & . & \frac{\partial f(x_2;p^0)}{\partial p_m^0} \\ . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . \\ \frac{\partial f(x_n;p^0)}{\partial p_1^0} & \frac{\partial f(x_n;p^0)}{\partial p_2^0} & . & . & \frac{\partial f(x_n;p^0)}{\partial p_m^0} \end{pmatrix}_{nxm} . \qquad (11b)$$

Hessian dizeyini hesaplamak için yanılgı enerjisinin parametrelere göre ikinci türevlerinin hesaplanması gerekmektedir. Bu amaçla önce birinci türevleri kapsayan (9) bağıntısının q numaralı parametre için bir çarpımın türev özelliğinden yararlanılarak, yeniden türevi alınır ise Hessian dizeyinin h_{jq} numaralı elemanı elde edilir ve iki ayrı toplama ayrılabilir:

$$h_{jk} = \frac{\partial^2 E(p^0)}{\partial p_j^0 \partial p_k^0} = 2\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial e_i}{\partial p_j^0}\frac{\partial e_i}{\partial p_k^0} + e_i \frac{\partial^2 e_i}{\partial p_j^0 \partial p_k^0} \right). \qquad (12)$$

$$h_{jk} = 2\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial e_i}{\partial p_j^0}\frac{\partial e_i}{\partial p_k^0} \right) + 2\sum_{i=1}^{n}\left(e_i \frac{\partial^2 e_i}{\partial p_j^0 \partial p_k^0} \right). \qquad (13)$$

(9) bağıntısından, farkların parametrelere göre türevlerinin kuramsal verinin parametrelere göre türevlerinin negatifine eşit olduğu görülebilir:

$$\frac{\partial e_i}{\partial p_j^0} = \frac{\partial}{\partial p_j^0}\left(d_i - f(x_i;p^0) \right) = -\frac{\partial f_i}{\partial p_j^0} .$$

Bu bağıntının, q numaralı parametreye göre bir kez daha türevi alınır ise

$$\frac{\partial^2 e_i}{\partial p_j^0 \ \partial p_k^0} = -\frac{\partial^2 f_i}{\partial p_j^0 \ \partial p_k^0} \qquad (14)$$

elde edilir. Bu sonuçlar, (12) bağıntısında yerine yazılır ise

$$h_{jk} = 2\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial f(x_i;p^0)}{\partial p_j^0}\frac{\partial f(x_i;p^0)}{\partial p_k^0}\right) + 2\sum_{i=1}^{n}\left(-(d_i - f(x_i;p^0))\frac{\partial^2 f(x_i;p^0)}{\partial p_j^0 \partial p_k^0}\right), \quad (15)$$

Hessian dizeyinin elemanlarının kuramsal verinin parametrelere göre türevlerinden hesaplanabileceği görülür. Bağıntının sağ yanındaki iki toplam,

$$t_{jk} = \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial f(x_i;p^0)}{\partial p_j^0}\frac{\partial f(x_i;p^0)}{\partial p_k^0}\right) \quad (16a)$$

$$q_{jk} = \sum_{i=1}^{n}\left(-(d_i - f(x_i;p^0))\frac{\partial^2 f(x_i;p^0)}{\partial p_j^0 \partial p_k^0}\right) \quad (16b)$$

elemanları tanımlanır ise

$$h_{jq} = 2\ t_{jq} + 2\ q_{jq}$$

yazılabilir. Toplamdaki sıra numaraları aynı olduğundan, bu bağıntı dizey toplamı olarak verilebilir (Lines and Tretiel, 1984):

$$\boldsymbol{H} = 2\,\boldsymbol{T} + 2\,\boldsymbol{Q}. \quad (17)$$

$\boldsymbol{T}$ dizeyinin elemanları ile Jacobian dizeyinin elemanları benzerdir. Daha önce verilen (11a) bağıntısından izleyen toplam bulunabilir:

$$t_{jq} = \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial f_i}{\partial p_j}\frac{\partial f_i}{\partial p_k}\right) = \sum_{i=1}^{n} a_{ij}\ a_{ik}\ .$$

Buradan $\boldsymbol{T}$ dizeyi,

$$\boldsymbol{T} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} a_{i1}a_{i1} & \sum_{i=1}^{n} a_{i1}a_{i2} & . & \sum_{i=1}^{n} a_{i1}a_{im} \\ \sum_{i=1}^{n} a_{i2}a_{i1} & \sum_{i=1}^{n} a_{i2}a_{i2} & . & \sum_{i=1}^{n} a_{i2}a_{im} \\ . & . & . & . \\ \sum_{i=1}^{n} a_{im}a_{i1} & \sum_{i=1}^{n} a_{im}a_{i2} & . & \sum_{i=1}^{n} a_{im}a_{m2} \end{pmatrix}_{mxm} \quad (18)$$

şeklinde gösterilebilir ve $\boldsymbol{T}$ dizeyinin

$$\boldsymbol{T} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A} \quad (19)$$

bağıntısı ile Jacobian dizeyinden hesaplanabileceği görülür. ***Q*** dizeyi ise (16) bağıntısından,

$$\boldsymbol{Q} = -\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} e_i \frac{\partial^2 f(x_i;p^0)}{\partial p_1^0 \partial p_1^0} & \sum_{i=1}^{n} e_i \frac{\partial^2 f(x_i;p^0)}{\partial p_1^0 \partial p_2^0} & . & \sum_{i=1}^{n} e_i \frac{\partial^2 f(x_i;p^0)}{\partial p_1^0 \partial p_m^0} \\ \sum_{i=1}^{n} e_i \frac{\partial^2 f(x_i;p^0)}{\partial p_2^0 \partial p_1^0} & \sum_{i=1}^{n} e_i \frac{\partial^2 f(x_i;p^0)}{\partial p_2^0 \partial p_2^0} & . & \sum_{i=1}^{n} e_i \frac{\partial^2 f(x_i;p^0)}{\partial p_2^0 \partial p_m^0} \\ . & . & . & . \\ \sum_{i=1}^{n} e_i \frac{\partial^2 f(x_i;p^0)}{\partial p_m^0 \partial p_1^0} & \sum_{i=1}^{n} e_i \frac{\partial^2 f(x_i;p^0)}{\partial p_m^0 \partial p_2^0} & . & \sum_{i=1}^{n} e_i \frac{\partial^2 f(x_i;p^0)}{\partial p_m^0 \partial p_m^0} \end{pmatrix}_{mxm} \tag{20}$$

olarak yazılabilir. Böylece, Hessian dizeyi, Jacobian ve ***Q*** dizeylerinden yararlanılarak,

$$\boldsymbol{H} = 2\,\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A} + 2\boldsymbol{Q} \tag{21}$$

bağıntısından hesaplanabilir. Hessian dizeyinin tersi ise

$$\boldsymbol{H}^{-1} = (\,\boldsymbol{T} + \boldsymbol{Q})^{-1} / 2 \tag{22}$$

verileceğinden, parametre düzeltme yöneyi, (10) ve (22) bağıntılarının (8) bağıntısında yerine yazılması ile

$$\Delta\boldsymbol{p} = (\boldsymbol{T} + \boldsymbol{Q})^{-1}\ \boldsymbol{A}^T(\boldsymbol{d}\text{-}\boldsymbol{f}) \tag{23}$$

$$\Delta\boldsymbol{p} = (\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A} + \boldsymbol{Q})^{-1}\ \boldsymbol{A}^T\Delta\boldsymbol{d} \tag{24}$$

şeklinde elde edilir. ***A*** ve ***Q*** dizeyleri herhangi bir yineleme adımındaki parametre değerlerine göre kuramsal verinin türevlerinden hesaplanabilir. Böylece parametre kestirimi ön-kestirim değerlerine parametre düzeltme yöneyinin eklenmesine indirgenir:

$$\boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}^0 + \Delta\boldsymbol{p}\,. \tag{25}$$

Ön-kestirim değerleri çözüm parametrelerine çok yakın değil ise (1) bağıntısı ile verilen Taylor açılımı *E(p)* değerine bir yaklaşımı verir. Bu nedenle, (25) bağıntısı da gerçek parametre değerleri yerine, onlara bir yaklaşımı verir. Yeni parametre değerleri ön-kestirim değerlerinden daha küçük yanılgı enerjisi üretir ise çözüme bir adım daha yaklaşıldığı düşünülebilir. Bu durumda, hesaplanan parametre değerleri yeni bir adımın ön-kestirimi olarak kabul edilir ve yanılgı enerjisi önceden belirlenen bir değerden daha küçük olduğunda işlem durdurulur. Yeni bir yinelemede hesaplanacak parametre değerleri, bir önceki yinelemedeki parametre değerlerinden

$$\boldsymbol{p}^{r+1} = \boldsymbol{p}^{r} + ((\boldsymbol{A}^{r})^{T}\boldsymbol{A}^{r} + \boldsymbol{Q}^{r})^{-1}\,(\boldsymbol{A}^{r})^{T}.(\boldsymbol{d}-\boldsymbol{f}^{r}) \tag{26}$$

bağıntısı ile elde edilebilir. Yukarıdaki bağıntıda sağ taraftaki dizeylerin *r* inci adım için verildiği ve *r*+1 inci parametre değerlerinin hesaplanmaya çalışıldığı bilindiğinden, ters-çözüm probleminin çözümü olarak daha yalın olan (23) veya (24) bağıntılarını kullanmak yeterlidir.

Hessian dizeyi yanılgı enerjisi haritasının eğrisellik bilgisini, gradyen yöneyi ise eğim bilgisini içermektedir. Newton yöntemi bu bilgileri kullanarak, doğrudan yanılgı enerjisi haritasının minimumuna yönlenir (Şekil 3). Ancak, bu yönlenme Hessian dizeyinin terslenmesi sırasında çok büyük $\boldsymbol{\Delta p}$ değerlerinin hesaplanması ve parametre uzayında büyük bir adım atılarak, yanılgı enerjisi haritasının minimumundan oldukça uzakta bir noktaya ulaşılmasına neden olabilir. Bu nokta daha büyük yanılgı enerjisi üreteceğinden, algoritma durdurulmak zorundadır. Newton yönteminin diğer zayıf yanı $\boldsymbol{Q}$ dizeyinin hesaplanmasındaki güçlüklerdir. Parametre sayısının yüzlerle ifade edilebildiği yerbilim problemlerinde $\boldsymbol{Q}$ dizeyinin elde edilmesi, çok sayıda ikinci türevin hesabı ve bunların toplanmasını gerektirdiğinden oldukça fazla bilgisayar zamanı alır. Ayrıca, sonlu-farklar yaklaşımı ve benzeri sayısal yöntemlerle ikinci türev hesabında yeterli doğruluğun sağlanması zordur. Bu nedenler ile $\boldsymbol{Q}$ dizeyin (20) bağıntısından doğrudan hesabından kaçınılır. Bunun yerine çeşitli yaklaşımlar kullanılır ve böylece çeşitli ters-çözüm yöntemleri türetilir.

5. ÇEŞİTLİ TERS ÇÖZÜM YÖNTEMLERİ

a. En-dik iniş yöntemi

Bu yöntem sadece eğim bilgisinden yararlanır. Ön-kestirim değerlerine karşılık gelen $E(p^0)$ konturu üzerindeki bir noktadan başlayarak, yanılgı enerjisi haritasında kontura dik yönde eğim aşağı gidilir ise yanılgı enerjisi daha küçük olan bir kontura erişilir. Böylelikle, çözüm yönünde bir adım atılmış olur. Bu adımın atılması ile parametrelerde oluşan değişiklik, $E(p^0)$ değerinin parametrelere göre gradyeni ile orantılıdır. Eğrisellik bilgisini kapsayan Hessian dizeyini katkısını yok etmek için (8) bağıntısında yerine μ sabiti ile çarpılmış birim dizey yerleştirilirse en-dik iniş yönteminin parametre düzeltme yöneyi elde edilir:

$$\boldsymbol{\Delta p} = -\mu.\boldsymbol{\gamma}. \tag{27}$$

Burada, $\boldsymbol{\gamma}$ yöneyi, yanılgı enerjisinin ön-kestirim parametrelerine göre kısmi türevlerini kapsamaktadır. Gradyen (10) bağıntısı ile verildiğinden yerine yazılarak,

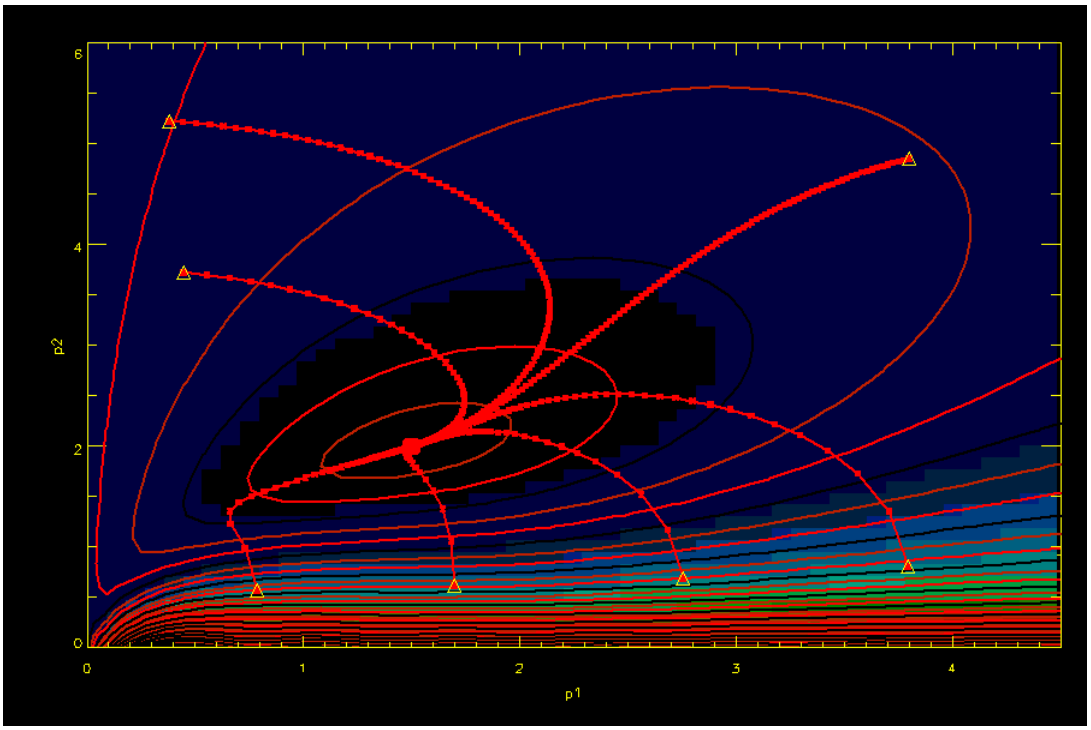
$$\boldsymbol{\Delta p} = \mu\,\boldsymbol{A}^{T}\boldsymbol{\Delta d} \tag{28}$$

bulunur. Burada, yanılgı enerjisinin gradyeni yukarıda değinildiği gibi parametre uzayında atılan adımın yönünü belirler. Şekil 4'de, çeşitli ön-kestirim değerleri için

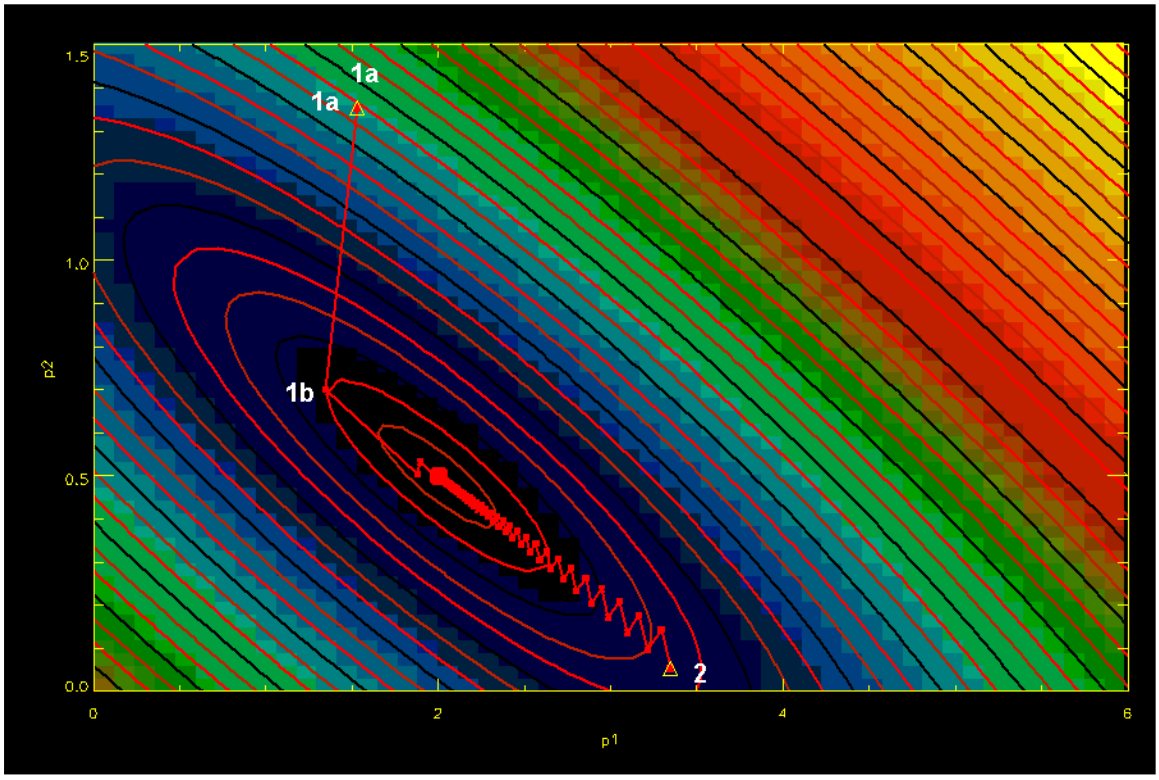
yanılgı enerjisi haritası konturlarına dik yönde ilerleyerek minimuma ulaşılması görüntülenmiştir. Bu strateji minimuma erişilmesini garantilemekle birlikte, yöntemin hızı adım büyüklüğüne bağlıdır. En uygun adım büyüklüğüne μ gerçel sabitinin değerinin ayarlanması ile bir yaklaşım yapılabilir. Bu amaç için parametre düzeltme yöneyinin doğrultusundaki en yakın minimum noktası saptanmaya çalışılır. Bu minimum için bir yaklaşım Tarantola(1987) tarafından izleyen bağıntı ile verilmiştir:

$$\mu = \frac{\boldsymbol{\gamma}^T \boldsymbol{\gamma}}{\boldsymbol{\gamma}^T \boldsymbol{\gamma} + (A.\boldsymbol{\gamma})^T (A.\boldsymbol{\gamma})}. \tag{29}$$

Şekil 5'den de görülebileceği üzere başlangıçta büyük olan parametre düzeltme yöneyinin değeri minimuma yaklaştıkça küçülmektedir. Çünkü ölçülen ve kuramsal veri arasındaki farklar ve çözüm civarında eğim değeri gittikçe küçülmektedir. Bu nedenlerle yöntem minimuma erişmek için çok fazla sayıda yineleme gerektirir. Yöntemin diğer zayıf yanı ise yanılgı enerjisi haritasında dar bir vadi boyunca ilerlemek gerektiğinde zig-zag çizerek ilerlemesi ve bunun da aşırı sayıda yinelemeye yol açmasıdır.



Şekil 4. Çeşitli ön-kestirim değerleri (üçgenler) için en-dik iniş yöntemi adımları. Herhangi bir adımın büyüklüğü iki nokta arasında kalan değer kadardır.



Şekil 5. Parametre düzeltme yöneyi yönündeki en yakın minimumu bularak ilerleme (1a-1b). Dar bir vadi boyunca zig-zag çizerek ilerleme (başlangıç 2 nolu ön-kestirim).

b. Eşlenik Gradyen Yöntemi

Bu yöntemde parametre düzeltme yöneyinin doğrultusu bir önceki yinelemedeki doğrultuya Hessian dizeyi uzayında dikgen (orthogonal) olacak şekilde seçilir. Yineleme işlemi izleyen bağıntı ile yürütülür:

$$\boldsymbol{p}^{r+1} = \boldsymbol{p}^{r} + \mu\, \boldsymbol{\Phi}^{r} . \qquad (30)$$

Burada, $\boldsymbol{\Phi}$; ardışık adımlar arasında dikgen olma koşulunu sağlayan arama doğrultusu (search direction) yöneyidir. μ gerçel sayısı adım büyüklüğüdür ve en-dik iniş yönteminde olduğu gibi arama doğrultusundaki en yakın minimuma erişimi sağlamayı amaçlar:

$$\mu = \frac{\boldsymbol{\gamma}^{T}\boldsymbol{\gamma}}{\boldsymbol{\Phi}^{T}\boldsymbol{\Phi} + (\boldsymbol{A}.\boldsymbol{\Phi})^{T}(\boldsymbol{A}.\boldsymbol{\Phi})} .$$

Ardışık iki yinelemeye ait arama doğrultusu yöneyinin $\boldsymbol{H}$ uzayında dikgen olma koşulu,

$$(\boldsymbol{\Phi}^{r})^{T}\ \boldsymbol{H}\,\boldsymbol{\Phi}^{r-1} = 0 \qquad (32)$$

ile verilir. Gradyen yöneyi ve bu koşulun gerçekleşmesini sağlayan bir α katsayısı yardımı ile herhangi bir yinelemeye ait arama doğrultusu,

$$\boldsymbol{\Phi}^r = \boldsymbol{\gamma}^r + \alpha.\boldsymbol{\Phi}^{r-1} \tag{33}$$

bağıntısı ile verilebilir. Başlangıç için bir $\boldsymbol{\Phi}^{-1}$ yöneyi tanımlı olmadığından, yöntemin ilk adımı en-dik iniş yöntemi ile gerçekleştirilir. Bu durumda, ilk arama doğrultusu yöneyi, gradyen yöneyine eşit alınır ($\boldsymbol{\Phi}^0 = \boldsymbol{\gamma}^0$). Diğer adımlar için (33) bağıntısı kullanılır. α katsayısı için bir yaklaşım veren çeşitli bağıntılar geliştirilmiştir. Bunlardan, Polak-Ribiere bağıntısı,

$$\alpha = \frac{(\boldsymbol{\gamma}^r)^T \boldsymbol{\gamma}^r - (\boldsymbol{\gamma}^{r-1})^T \boldsymbol{\gamma}^r}{(\boldsymbol{\gamma}^{r-1})^T \boldsymbol{\gamma}^{r-1}} = \frac{(\boldsymbol{\gamma}^r)^T \left[\boldsymbol{\gamma}^r - \boldsymbol{\gamma}^{r-1}\right]}{(\boldsymbol{\gamma}^{r-1})^T \boldsymbol{\gamma}^{r-1}} \tag{34}$$

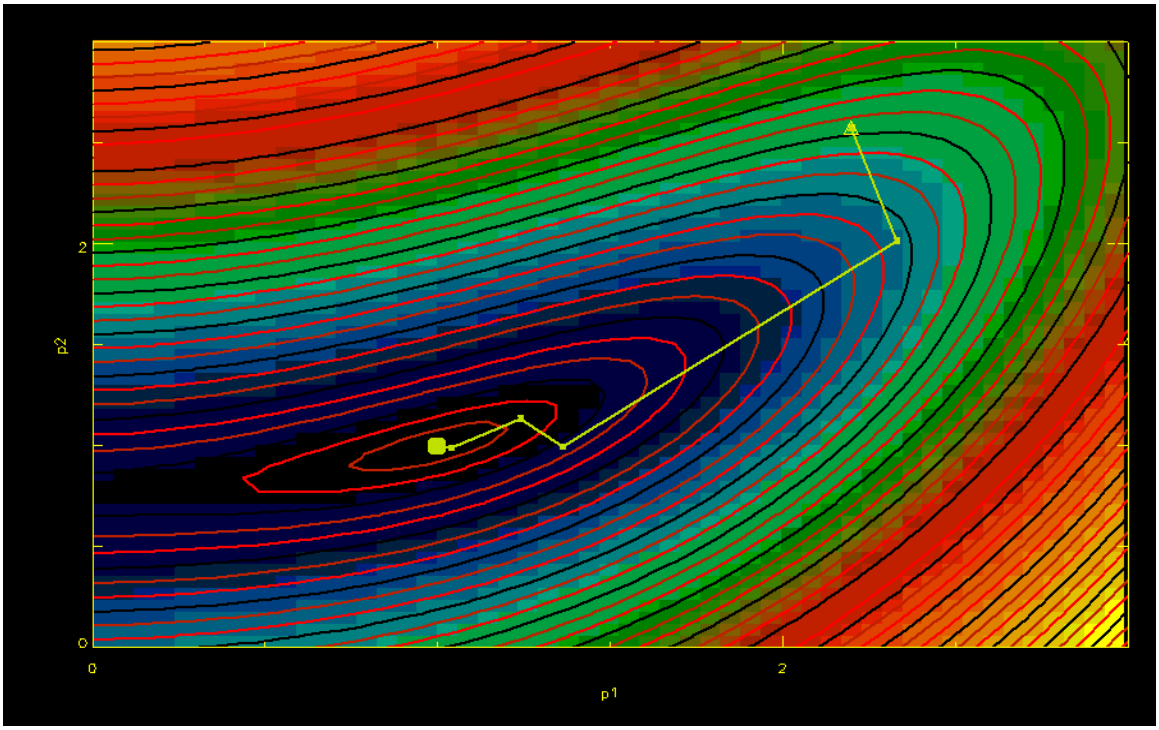
ve aşağıda verilen Fletcher-Reeves bağıntısı,

$$\alpha = \frac{(\boldsymbol{\gamma}^r)^T \boldsymbol{\gamma}^r}{(\boldsymbol{\gamma}^{r-1})^T \boldsymbol{\gamma}^{r-1}} \tag{35}$$

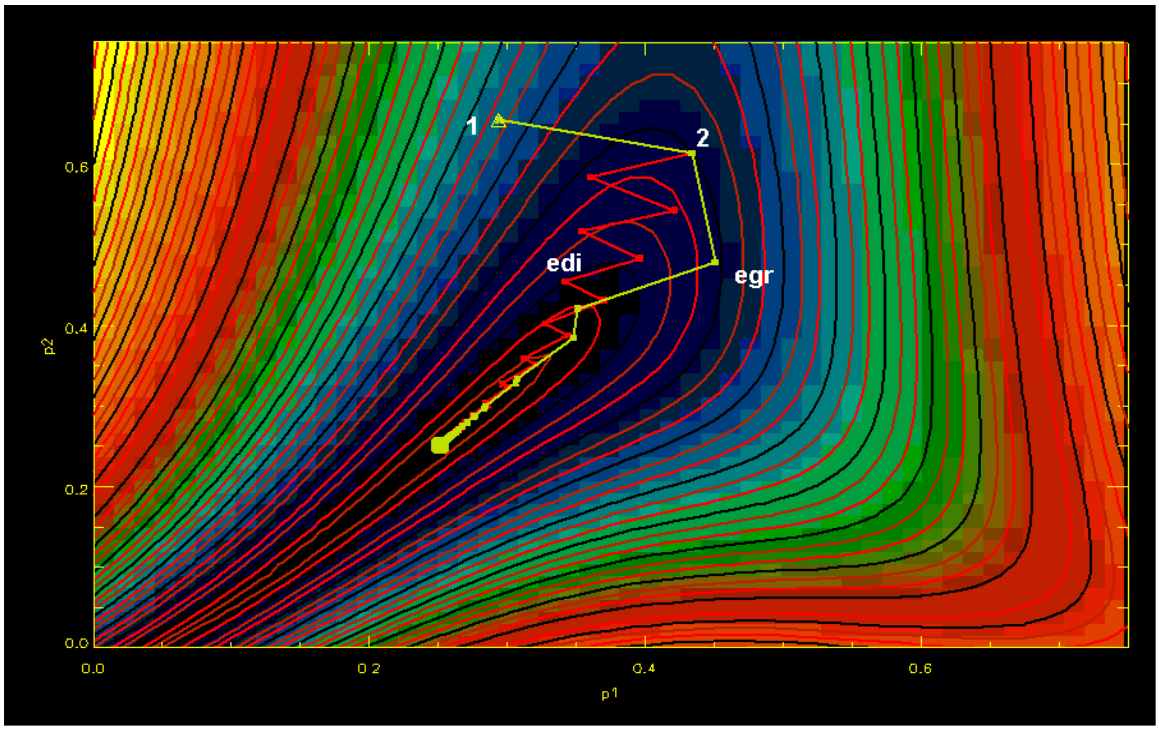
en yaygın kullanılan bağıntılardır. Polak-Ribiere bağıntısı hızlı bir şekilde yakınsamayı sağlar. Fletcher-Reeves bağıntısının hesaplanması biraz daha az zaman gerektirmekle birlikte, sadece çözüm civarında verilmiş ön-kestirim değerleri için yakınsama sağlayabilir.

Şekil 6'da iki parametreli bir probleme ait yanılgı enerjisi haritasında eşlenik gradyen yöntemi ile minimuma erişilmesi gösterilmiştir. Her yineleme adımı, bir önceki adıma göre dikgen olma koşulunu sağlamaktadır. Arama doğrultusunun dikgen olma koşulu $\boldsymbol{H}$ uzayı için verildiğinden, yanılgı enerjisi haritasının konturları eliptik durumdan küresel duruma getirildiğinde birbirine dik olacaktır. Parametre düzeltme yöneyinin büyüklüğü eğim ile orantılı olduğundan eğimin büyük olduğu doğrultularda bu yöney de büyüktür. Eğimin çok küçük olduğu herhangi bir yönde çok küçük bir adım atılacağından, şekiller üzerinde bu yönlerdeki adımlar açık bir biçimde görülemeyebilir.

Şekil 7'de ise en-dik iniş ve eşlenik gradyen yöntemlerinin karşılaştırılmıştır. (1) ile işaretlenen başlangıç noktasından ilk yineleme en-dik iniş yöntemi ile gerçekleştirilerek (2) ile gösterilen noktaya erişilmiştir. Bu noktadan sonra en-dik iniş yöntemi ile yanılgı enerjisi konturuna dik yönde bir yineleme ile (edi) yazılan noktaya gelinmiş ve algoritma zig-zag çizerek ilerlemeye başlamıştır. Eşlenik gradyen yöntemi ise bir önceki doğrultu yöneyine $\boldsymbol{H}$-dikgen yönde, (2) noktasından (egr) yazılan noktaya erişmiştir. Devam eden yineleme adımları aynı kuralın uygulanması ile gerçekleştirilmiştir. Eşlenik gradyen yönteminin en-dik iniş yöntemine göre daha hızlı çalıştığı görülmekte ise de sadece gradyen bilgisinin kullanılması nedeni ile çözüm civarında parametre düzeltme yöneyi küçülmekte ve yineleme sayısı Newton yöntemine göre oldukça büyük kalmaktadır.



Şekil 6. Bir önceki parametre düzeltme yöneyine dikgen ilerleme. Başlangıç üçgen, bitiş noktası ise dolu kare ile gösterilmiştir. Noktalar arası bir adımı göstermektedir.



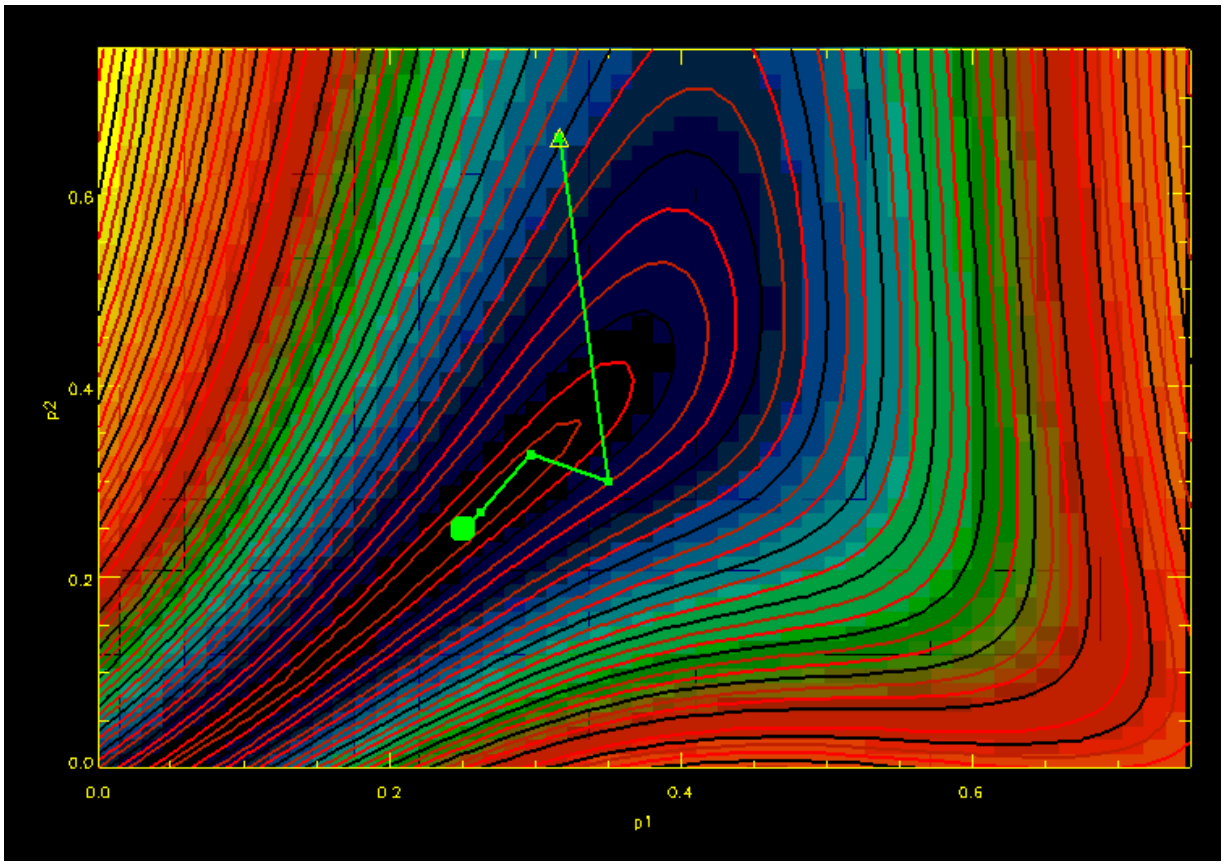
Şekil 7. En-dik iniş ve eşlenik gradyen yöntemlerinin karşılaştırılması. Başlangıç noktası üçgen (1), birinci yineleme adımı nokta (2) ve minimum ise dolu kare ile gösterilmiştir. (2) nolu noktadan sonra en-dik iniş algoritması (edi) ve eşlenik gradyen algoritması (egr) yazılan noktalara erişerek farklı yol izlemektedir.

c. Gauss- Newton Yöntemi

Yukarıda değinildiği gibi Newton yöntemi hızlı olmakla birlikte ön-kestirim parametrelerinin çözüm parametrelerine yakın olmadığı durumlarda Taylor serisi açılımında ikinci dereceli türevlerin hesaplanmasında yeterli doğruluk sağlanamaz. Ayrıca veri fakları da büyük olduğundan $\boldsymbol{Q}$ dizeyinin elemanları da büyük olacak ve (24) bağıntısında $\boldsymbol{Q}$ dizeyi baskın hale gelecektir. Ancak bu durum parametre düzeltme yöneyinin çok büyük olmasına yol açarak, algoritmanın ıraksamasına neden olabilir. Öte yandan, çözüme yakın bir ön-kestirim için hem ikinci türevler hem de veri farkları küçük olacağından $\boldsymbol{Q}$ dizeyinin hesaplanmasındaki zorluklara oranla çözüme katkısı çok önemli olmayacaktır. Bu nedenler ile (24) bağıntısında $\boldsymbol{Q}$ dizeyi ihmal edilerek,

$$\boldsymbol{\Delta p} = (\boldsymbol{A}^T \boldsymbol{A})^{-1}\ \boldsymbol{A}^T \boldsymbol{\Delta d} \tag{36}$$

yazılabilir. Şekil 8'de, üçgen ile gösterilen ön-kestirim değerinden başlayarak dört yineleme ile minimuma erişilmesi gösterilmiştir. Şekil 7'de aynı problem için verilen en-dik iniş ve eşlenik gradyen yöntemleri ile karşılaştırıldığında Gauss-Newton yöntemini oldukça hızlı bir şekilde sonuca yakınsadığı görülmektedir.

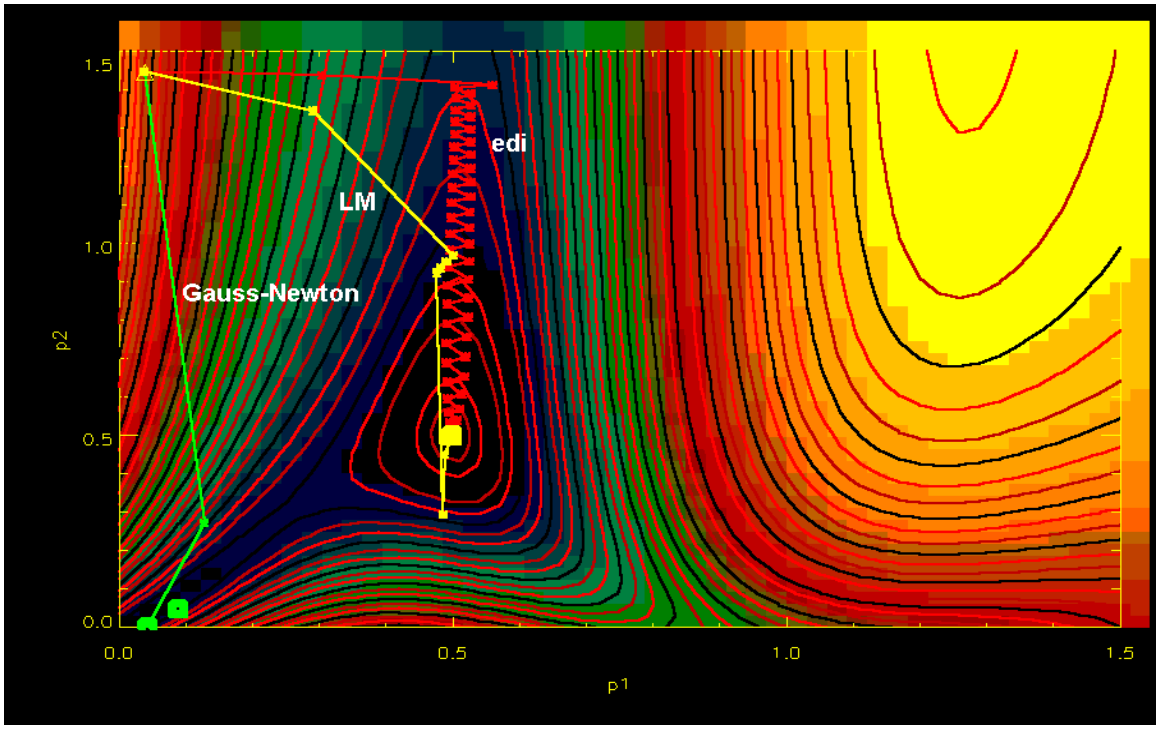


Şekil 8. Gauss-Newton yöntemi ile doğrudan minimuma yönlenmeye çalışarak ilerleme. Şekil 7 de verilen en-dik iniş ve eşlenik gradyen yöntemleri ile karşılaştırınız.

d. Sönümlü En-küçük Kareler (Levenberg-Marquardt) Yöntemi

Gauss-Newton yöntemi hızlı yakınsayan bir yöntem olmakla birlikte ön-kestirim değerleri çözüm parametrelerine yakın değil ya da yanılgı enerjisi haritası karmaşık bir topografya oluşturmakta ise $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ dizeyinin bazı özdeğerleri (eigenvalues) çok küçük olabilir ve dizeyin terslenmesi sırasında yeterli sayısal doğruluğun sağlanamaması nedeni ile parametre düzeltme yöneyinin bu özdeğerlere karşılık gelen elemanları çok büyür. Başka bir olasılıkta eğrisellik bilgisinin yanılgı enerjisi haritasının minimumunun bulunduğu yönden farklı bir yöne adım atılması sonucuna yol açan parametre düzeltme yöneyi üretmesidir. Her iki durumda da yineleme ile daha büyük yanılgı enerjisi üreten bir model elde edilir. Şekil 9 da aynı ön-kestirimden başlamak üzere en-dik iniş, Gauss-Newton ve sönümlü en-küçük kareler yöntemleri karşılaştırılmıştır. Gauss-Newton yönteminde üçüncü yinelemeden sonra çözüme çok uzak bir noktada yineleme işlemi durdurulmaktadır. En-dik iniş yöntemi çözüme erişmekle birlikte dar bir vadi boyunca ilerlemek durumunda kaldığından çok sayıda yineleme yapmak zorunda kalmıştır. Sönümlü en-küçük kareler ise gerektiğinde hem Gauss-Newton hem de en-dik iniş yöntemi gibi davranarak çözüme daha az sayıda yineleme ile erişebilmiştir. Bu davranış (36) bağıntısında $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ dizeyinin köşegenlerine ε^2 gibi bir gerçel sabitin eklenmesi ve bu sabitin değerinin yineleme işlemi sırasında özdeğerlerin küçük değerler almasını engelleyecek şekilde değiştirilmesi ile gerçekleştirilebilir. Bu durumda, $\boldsymbol{I}$ birim dizey olmak üzere parametre düzeltme yöneyi izleyen bağıntı ile verilir:

$$\Delta\boldsymbol{p} = (\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}+\varepsilon^2\boldsymbol{I})^{-1}\ \boldsymbol{A}^T\Delta\boldsymbol{d}\,. \qquad (37)$$



Şekil 9. En-dik iniş (edi), Gauss-Newton ve sönümlü en-küçük kareler yöntemlerinin (LM) aynı ön-kestirim değeri için karşılaştırılması.

Şekil 9 dan görülebileceği gibi sönümlü en-küçük kareler algoritması, ilk yineleme adımlarında en-dik iniş ve Gauss-Newton algoritmalarının arasında bir davranış göstermiştir. Üçüncü yinelemede yanılgı enerjisinin az olduğu düz topografyalı bir bölümde en-dik iniş yönteminin davranışına uygun olarak küçük düzeltme yöneyi ile zig-zag çizerek ilerleme sağlanılmıştır. Bu bölgeden sonra Gauss-Newton davranışına geçiş sağlanarak birkaç adımda minimuma varılmıştır.

e. Tikhonov Düzgünleştiricisi

Bazı jeofizik problemlerde parametrelerin değişiminin birbirlerine bağımlı olması istenilir. Örneğin iki- ve üç-boyutlu problemlerde komşu hücrelere ait fiziksel özelliklerinde keskin değişimlere izin verilmek istenmeyebilir. Bu durumda bir yuvarlatıcı işlemciye gereksinim duyulur. Bu amaç için (37) bağıntısındaki birim dizey, $\boldsymbol{L}^T\boldsymbol{L}$ şeklinde bir dizey ile yer değiştirilir:

$$\Delta \boldsymbol{p} = (\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A} + \varepsilon^2 \boldsymbol{L}^T\boldsymbol{L})^{-1}\ \boldsymbol{A}^T\Delta \boldsymbol{d}\,. \tag{38}$$

$\boldsymbol{L}$ dizeyin birinci veya ikinci türev işlemcisi olarak seçimi ile komşu parametre değerlerinin birbirlerine bağımlı olarak değişmeleri sağlanabilir. Bu yöntem algoritmaların duraylılığını (stability) sağlamak amacı ile de kullanılmaktadır. Çeşitli duraylayıcı (stabilizer) dizeyler Zhadanov(2002) tarafından verilmiştir.

6. AĞIRLIK ATAMA

Yorum için kullanılan yöntemin yanı sıra, ölçü yanılgıları ve gürültüler parametre kestirimine önemli ölçüde etki eder. Bu etkilerin uygun yöntemler ile azaltılması, ters-çözüm yöntemlerinin hız ve yakınsamasını iyileştirir.

Ölçme koşullarından kaynaklanan, iki tür gürültü kaynağı vardır. Bunlar, rasgele ve sistematik gürültüler olarak adlandırılır (Bevington, 1969). Rasgele gürültüler, değişkenin bir değeri için yinelenen ölçümlerdeki kararsız değişmelerdir. Ölçüm aygıtlarının duyarlılığının sınırlı olması, rasgele gürültülerin başlıca kaynağıdır. Ölçüler, değişkenin bir değeri için yinelenir ise, ölçü değerlerindeki görece belirsizlik istatistik analiz yardımı ile tanımlanabilir. Örneğin, bu amaç için ölçü değerlerinin standart sapmaları kullanılabilir. Her ölçüm değerine, standart sapması ile ters orantılı bir ağırlık katsayısı atanarak, gürültülü verinin duyarlı ölçülere göre ters-çözüm sonuçlarına daha az etki etmesi sağlanabilir. Eğer, arazi uygulamalarında, ölçüler yinelenmemiş ise standart sapmalar bilinemez ve bu durumda rasgele gürültüyü temsil etmek üzere bütün ölçülerin genel niteliğine bağlı bir ağırlık katsayısı bütün ölçü noktalarına atanır.

Sistematik yanılgılar, ölçüm sisteminin ayarlarının yanlış yapılmasından, ölçüm aygıtlarının yanlış konumlara yerleştirilmesinden, ölçü sistemi ile ona bağlı aygıtların bağlantılarının kötü veya yanlış yapılmasından ve gözlemcinin yaptığı gözlem yanılgılarından oluşur. Bu koşullarda, istatistik analize başvurmak, genellikle kullanışlı değildir. Ölçülerin tekrar edilmesi, ölçülerin duyarlılığını (precision) arttırmakla birlikte

doğruluğunu (accuracy) arttırma konusunda yardımcı olmaz. Arazi çalışmasının yapıldığı sırada, sistematik yanılgılar fark edilebilirse, bunlar hesapla veya başka bir çare düşünülerek, ölçülerden giderilebilir ve ölçü doğruluğu arttırılabilir. Aksi takdirde, sistematik yanılgıların düzeltilme fırsatı ortadan kalkar. Sistematik yanılgılar birçok ölçme işleminde bir bilinmeyen olarak kalabilir (Bevington, 1969). Hem rasgele hem de sistematik yanılgılar nedeni ile veride küçük saçılmalar gözlenir ise sistematik yanılgılar, rasgele yanılgılar ile birleştirilerek, ölçü belirsizlikleri istatistik yöntemler ile incelenebilir.

Ölçü noktalarının gürültü içerikleri farklı olduğundan, ölçü değerlerine atanacak ağırlık katsayıları ile gürültü içeriği fazla ölçü noktalarının parametre kestirimini daha az etkilemesi istenir. Bu amaç için (1) bağıntısı ile verilen amaç fonksiyonu, en-küçük kareler için toplam ve dizey denklemleri olarak,

$$E_2(p) = \sum_{i=1}^{n} \left[w_i (d_i - f(x_i; p)) \right]^2 = \left[\boldsymbol{W}(\boldsymbol{d} - \boldsymbol{f}) \right]^T \left[\boldsymbol{W}(\boldsymbol{d} - \boldsymbol{f}) \right] \tag{39}$$

şeklinde yazılabilir. Burada, w_i; ölçü noktalarına uygulanacak ağırlık katsayılarını göstermektedir. $\boldsymbol{W}$; köşegen bireyleri ağırlık katsayıları ve diğer öğeleri sıfır olan *nxn* boyutunda bir kare dizeydir. (39) bağıntısı ile verilen yanılgı enerjisinin enküçüklenmesi ile Gauss-Newton çözümü elde edilir:

$$\boldsymbol{\Delta p} = ((\boldsymbol{WA})^T (\boldsymbol{WA}))^{-1} \ (\boldsymbol{WA})^T (\boldsymbol{W \Delta d}). \tag{40}$$

Bu bağıntı, (36) ile verilen Gauss-Newton çözümü ile karşılaştırılır ise $\boldsymbol{A}$ dizeyinin yerine $\boldsymbol{W.A}$ dizeyinin ve $\boldsymbol{\Delta d}$ dizeyinin yerine $\boldsymbol{W.\Delta d}$ dizeyinin kullanıldığı görülmektedir. Diğer yöntemlerde enküçüklenecek amaç fonksiyonu farklı olmakla birlikte, Jacobian ve veri farkları dizeylerinin ağırlık dizeyleri ile çarpılması ile belirli bir yönteme ait ağırlıklı parametre kestirim bağıntıları elde edilir.

Ağırlık katsayılarını saptamak amacı ile çeşitli yöntemler kullanılabilir. Örneğin, ölçülerin tekrarlanma olanağının bulunduğu durumlarda, bir ölçü noktasındaki gürültünün, diğer ölçü noktalarındaki gürültülerden bağımsız ve standart sapmasının σ_i olduğu düşünülür ve ağırlık dizeyi,

$$\boldsymbol{W} = diag(1/\sigma_i) = \begin{pmatrix} 1/\sigma_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/\sigma_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & . & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/\sigma_{n-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/\sigma_n \end{pmatrix}_{nxn} \tag{41}$$

olarak tanımlanır. Ölçü tekrarlarının bulunmadığı koşullarda, Başokur(1999) tarafından önerilen ağırlık atama yöntemi uygulanabilir. Bu yöntemde ölçülen verinin davranışına göre seçilen bir fonksiyondan *m* adedi, yatay eksen boyunca yerleştirilir ve bunların doğrusal bileşimi (linear combination) ile yuvarlatılmış bir veri elde edilir.

Yuvarlatma işlemi için farklı bir yöntemlerden de yararlanılabilir. Bu durumda ağırlık katsayıları izleyen bağıntı ile verilebilir:

$$w_i = exp\left\{-\left(d_i - d_i^*\right)^2 / 2\alpha^2\right\}. \tag{42}$$

Burada, d_i ve d_i^* sırası ile ölçülen ve yuvarlatılan veri noktalarını göstermektedir. α ise biçim etmeni olup, izleyen

$$\alpha = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left|d_i - d_i^*\right| \tag{43}$$

bağıntısı ile hesaplanır ve bir veri noktasına ait ağırlık katsayısının hesaplanmasında tüm verinin gürültü içeriğinin göz önüne alınmasını sağlar. (41) bağıntısı sıfır ile bir arasında ağırlık katsayıları üretir. Eğer, ölçülen ve yuvarlatılan veriler arasındaki fark küçük ise bu noktadaki ağırlık katsayısı birime yakın olur.

7. DİZEY DENKLEMLERİNİN ÇÖZÜMÜ

En-dik iniş ve eşlenik gradyen çözümlerinde Jacobian dizeyinin tümü ile bellekte tutulmasına gerek bulunmamaktadır. Bir hesaplama adımında Jacobian dizeyinin bir sütunu ile çarpma işlem gerçekleştirildiğinden, bellek kullanımının sorun olduğu çok parametreli problemlerde bir sütun ile işlem yapıldıktan sonra ardışık sütunun hesaplanmasına geçilebilir.

Kuramsal verilerin, parametre dizeyi ile Jacobian dizeyinin çarpımı,

$$\boldsymbol{f} = \boldsymbol{A.p} \tag{44}$$

şeklinde tanımlanma olanağı var ise bunlar doğrusal problemler olarak adlandırılır. Bu tür problemlerde Jacobian dizeyi, veri çekirdek dizeyi adını alır ve parametreleri kapsamaz. Bu nedenle kuramsal verinin parametrelere göre birinci türevi, veri çekirdek dizeyine ve ikinci türevi ise sıfıra eşit olur :

$$\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{p}} = \boldsymbol{A}, \qquad \frac{\partial^2 \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{p^2}} = 0. \tag{45}$$

Newton yönteminde yineleme bağıntısı (26), birinci yineleme için yazılır ise ikinci türevler sıfır olduğundan ($\boldsymbol{Q}$=0),

$$\boldsymbol{p^1 - p^0 = (A^T A)^{-1}\ A^T.(d\text{-}f^0) = (A^T A)^{-1}\ A^T d - (A^T A)^{-1}\ A^T f^0}$$

elde edilir. (44) bağıntısından,

$$\boldsymbol{p^1 - p^0 = (A^T A)^{-1}\ A^T.d - (A^T A)^{-1}\ A^T A p^0}$$

yazılabilir. Burada, $(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A})^{-1}\,\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ işlemi birim dizeye eşit olduğundan denklemin her iki yanındaki ön-kestirim parametreleri ($\boldsymbol{p}^0$) sadeleşir. Böylece, doğrusal problemlerde parametrelerin tek bir adımda çözülebileceği görülür:

$$\boldsymbol{p} = (\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A})^{-1}\,\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{d}\,. \tag{47}$$

Newton (24), Gauss-Newton (36), sönümlü en-küçük kareler (37), Tikhonov düzgünleştiricisi (38) yöntemlerinde, parametre düzeltme yöneyi ($\Delta\boldsymbol{p}$), ilgili bağıntılardan çarpma, dönüğünü ve tersini alma gibi dizey işlemleri ile çözülebilir. Dizeylerin tersini alma için çok çeşitli yöntemler önerilmiştir. Gauss-Newton ve sönümlü en-küçük kareler yöntemleri ile birlikte yaygın olarak kullanılan dizey işlemlerinden biri 'Tekil Değer Ayrışımı' dır (Singular Value Decomposition, SVD). Bu yöntemde ağırlık dizeyi ile çarpılmış Jacobian dizeyi $\boldsymbol{A}^* = \boldsymbol{wA}$ başka üç dizeyin çarpımı olarak ifade edilir:

$$\boldsymbol{A}^* \;=\; \boldsymbol{U}\,\boldsymbol{S}\,\boldsymbol{V}^T\,. \tag{48}$$

Burada, $\boldsymbol{U}$ ve $\boldsymbol{V}$ sırası ile veri ve parametre özyöneyleri (eigenvectos) olarak adlandırılır. $\boldsymbol{U}$ dizeyi *nxm* ve $\boldsymbol{V}$ dizeyi *mxm* boyutlarındadır. $\boldsymbol{S}$ ise *mxm* boyutunda ve parametre özdeğerlerini (λ) içeren bir köşegen dizeydir. Böylece, parametre düzeltme yöneyi izleyen toplamdan hesaplanabilir:

$$\Delta p_k = \sum_{j=1}^{m} v_{kj}\,\frac{\lambda_j}{\lambda_j^2 + \varepsilon^2}\;a_j \qquad\qquad k=1,\ldots,m \tag{49}$$

$$a_j = \sum_{i=1}^{n} u_{ij}\;w_i\;\Delta d_i \qquad\qquad j=1,\ldots,m.$$

Burada, v_{kj}, u_{ij} ve w_i sırasıyla $\boldsymbol{U}$, $\boldsymbol{V}$ ve $\boldsymbol{W}$ dizeylerinin öğelerini göstermektedir.

Parametre düzeltme yöneyinin hesaplanması için diğer bir yol doğrusal denklem sistemlerinin çözümünden yararlanmaktır. Bu amaç için ters-çözüm problemi,

$$\boldsymbol{B}_{mxm}.\Delta\boldsymbol{p}_{mx1} = \boldsymbol{x}_{mx1} \tag{50}$$

doğrusal denklem sistemi ile ifade edilir. Burada,

$$\boldsymbol{x}_{mx1} = (\boldsymbol{A}^T)_{mxn}\Delta\boldsymbol{d}_{nx1}$$

$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A} + \boldsymbol{Q} \qquad \text{(Newton)}$$

$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A} \qquad \text{(Gauss-Newton)}$$

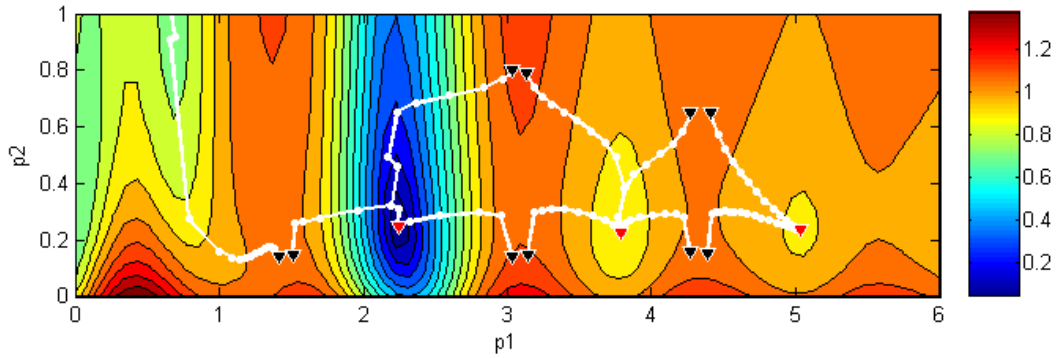
$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}^T \boldsymbol{A} + \varepsilon^2 \boldsymbol{I}$ (sönümlü en-küçük kareler))

$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}^T \boldsymbol{A} + \varepsilon^2 \boldsymbol{L}^T \boldsymbol{L}$ (Tikhonov)

olarak tanımlanır. ***B***; kare ve bakışımlı bir dizeydir. Böylece, doğrusal denklem sistemlerini çözebilen herhangi bir algoritma yardımı ile parametre düzeltme yöneyi hesaplanabilir.

8. YEREL MİNİMUMLAR SORUNU

Birçok problemde yanılgı enerjisi haritasında birden fazla minimumlar bulunabilir. Bunlardan en küçük yanılgı enerjisi değeri olanı 'global minimum' diğerleri ise 'yerel minimum' olarak adlandırılır. Bir problemde birden fazla yerel minimum olması olası iken bir adet global minimum vardır. Parametrelerin doğru çözümü, ters-çözüm algoritmasının global minimuma erişmesi ile olanaklıdır. Ancak, global minimuma erişim ön-kestirime bağımlıdır. Şekil 10'da çeşitli ön-kestirim değerlerinden başlayarak sönümlü en-küçük kareler yöntemi ile problemin çözülmeye çalışılması görüntülenmiştir. Yan yana duran iki ön-kestirim değerini temsil eden siyah üçgenlerden de anlaşılabileceği gibi birbirine yakın ön-kestirim değerleri kullanımı ile algoritmanın farklı minimuma yönlenmesi olasıdır. Bu durum kullanılan yöntem ile ilişkili olmayıp, tüm türev tabanlı algoritmaların ortak sorunudur. Ayrıca, bazı durumlarda gürültü nedeni ile yerel minimumlardan birinin yanılgı enerjisi, global minimumun yanılgı enerjisinden daha küçük hale gelebilir. Bu tür problemleri aşmanın en önemli aracı, ele alınan problemin doğasının iyi bilinmesi ve hesaplanan parametre değerlerinin fiziksel olarak olası olup, olmadığının denetlenmesidir.



Şekil 10. Çözümü p_1=2.25 ve p_2=0.25 olan bir problemde global (mavi) ve yerel (sarı) minimumlar. Kırmızı üçgenler minimumları ve siyah üçgenler ön-kestirim değerlerini göstermektedir. Beyaz çizgiler sönümlü en-küçük kareler yönteminin izlediği çözüm yolunu göstermektedir. Noktalar arasında kalan doğrular, adım büyüklüğünü göstermektedir (Başokur, Akça ve Siyam, 2007).

9. SONUÇLAR

Türev tabanlı ters-çözüm algoritmaları yanılgı enerjisinin eğim ve/veya eğrisellik bilgisini kullanır. Sadece eğim bilgisini kullanan en-dik iniş yöntemi yanılgı enerjisi haritası üzerindeki en yakın minimuma erişir. Çoğu problemde yakınsama elde edilmesine rağmen düzeltme yöneyinin küçük olması nedeni ile çok sayıda yineleme gerektirir. Eşlenik gradyen yöntemi, en-dik iniş yöntemine benzer şekilde hareket etmekle birlikte yakınsamayı hızlandırmak için yanılgı enerjisi haritasında bir önceki yinelemeye dikgen olan düzeltme yöneyleri kullanır. Newton ve Gauss-Newton algoritmaları doğrudan minimuma erişmeyi hedefleyen hızlı yöntemler olmakla birlikte kötü ön-kestirim veya karmaşık yanılgı enerjisi topografyasının bulunduğu durumlarda minimuma yakınsamayabilirler. Sönümlü en-küçük kareler ve Tikhonov yöntemlerinde Gauss-Newton algoritmasının karşılaştığı duraylılık sorunları giderilmeye çalışılır. Uygulanacak duraylaştırıcılar probleme özgü olduğundan çeşitli uygulama örnekleri konu ile ilgili dergilerde bulunabilir. Türev tabanlı kestirim yöntemlerinde, parametre ayrımlılığı standart sapma dizeyinin hesaplanması ile incelenebilir. Parametre ayrımlılığı ile ilgili konular çeşitli kaynaklardan incelenebilir (örneğin Başokur, 2002). Yazar tarafından geliştirilen FORTRAN ve PV-WAVE dillerinde yazılmış bilgisayar programlarının kaynak kodlarına http://jeofizik.ankara.edu.tr adresinden erişilebilinir.

KAYNAKLAR

Başokur, A. T., 1999, Automated 1-D interpretation of resistivity soundings by simultaneous use of the direct method and iterative methods. Geophysical Prospecting 47, 149-177.

Başokur, A. T., 2002, Doğrusal ve Doğrusal Olmayan Problemlerin Ters-Çözümü, TMMOB Jeofizik Mühendisleri Odası, 166 sayfa.

Başokur, A. T., Akça, İ. and Siyam, W. A., 2007, Hybrid genetic algorithms in view of the evolution theories with application for the electrical sounding method, Geophysical Prospecting 55, 393–406.

Bevington, P. R. 1969, Data reduction and error analysis for the physical sciences, McGraw-Hill Book Co.

Lines L.R. and Treitel S., 1984. Tutorial: A review of least-squares inversion and its application to geophysical problems, Geophysical Prospecting **32,** 159–186.

Tarantola, A. 1987. Inverse Problem Theory, Elsevier, ISBN 0-444-42765-1.

Zhadanov, M. S., 2002, Geophysical inverse theory and regularization problems, Elsevier.