

大地电磁一维反演理论讲义

王培杰

2025 年 11 月 26 日

目录

1 引言	2
1.1 大地电磁法简介	2
1.2 一维反演的基本假设	2
2 MT 正演问题	3
2.1 物理模型	3
2.2 Maxwell 方程与 Helmholtz 方程	4
2.3 向上递推阻抗法	5
2.4 MT 响应计算	8
3 MT 反演问题	9
3.1 反演问题的数学表述	9
3.2 目标函数	10
3.3 正则化矩阵	11
3.4 高斯-牛顿法	12
3.5 Jacobian 矩阵的计算	14
3.6 收敛判据与停止条件	15
4 数值实现要点	15
4.1 数值稳定性	15
4.2 计算效率优化	16
5 总结	17
6 参考文献	17

1 引言

1.1 大地电磁法简介

大地电磁法 (Magnetotelluric, MT) 是一种被动源地球物理勘探方法，利用天然电磁场作为场源，通过观测地表电磁场的变化来推断地下介质的电性结构。该方法由 Tikhonov (1950 年) 和 Cagniard (1953 年) 独立提出，具有以下特点：

- **探测深度大：**利用低频电磁波（周期从毫秒到数千秒），可探测从几米到数百公里的深度
- **成本低：**使用天然场源，无需人工发射设备
- **不受地形限制：**适合复杂地形条件下的勘探
- **对电阻率敏感：**可有效区分导电和电阻层

MT 方法广泛应用于矿产资源勘查、地热资源开发、深部地质结构研究、地震活动带研究等领域。

1.2 一维反演的基本假设

一维 MT 反演假设地下介质在水平方向上均匀，仅在垂直方向上变化，即介质参数只依赖于深度 z 。这种假设适用于：

- 层状地质结构
- 水平层状介质
- 缓变的地质构造（水平尺度远大于垂直尺度）

虽然实际地质结构往往是二维或三维的，但一维反演作为基础方法，具有以下优点：

- **计算效率高：**正演计算速度快，适合大规模数据处理
- **理论成熟：**数学推导完整，数值方法稳定
- **易于理解：**是学习 MT 反演理论的重要起点
- **作为初始模型：**为二维、三维反演提供初始模型

2 MT 正演问题

2.1 物理模型

2.1.1 层状介质模型

一维 MT 正演问题考虑 M 层水平层状介质，每层具有不同的电导率 σ_i （或电阻率 $\rho_i = 1/\sigma_i$ ）和厚度 d_i 。模型参数包括：

- 第 i 层的电导率： σ_i (S/m)，表示介质的导电能力
- 第 i 层的电阻率： $\rho_i = 1/\sigma_i$ ($\Omega \cdot \text{m}$)，表示介质的电阻能力
- 第 i 层的厚度： d_i (m)，表示该层的垂直厚度
- 第 i 层的深度： $z_i = \sum_{j=0}^{i-1} d_j$ (m)，表示该层顶部的深度

在实际计算中，通常使用电阻率的对数形式作为模型参数：

$$m_i = \log_{10}(\rho_i) = \log_{10}(1/\sigma_i) \quad (1)$$

使用对数形式的原因：

- 电阻率通常跨越多个数量级（如 $0.1 \Omega \cdot \text{m}$ 到 $10000 \Omega \cdot \text{m}$ ），对数变换使参数空间更均匀
- 避免数值计算的精度问题
- 使优化算法更容易收敛

2.1.2 频率范围

MT 方法使用宽频带的天然电磁场，频率范围通常从 10^{-3} Hz 到 10^3 Hz（周期从 10^{-3} s 到 10^3 s）。不同频率的电磁波具有不同的穿透深度：

- 高频（短周期）：穿透深度浅，反映浅部结构
- 低频（长周期）：穿透深度深，反映深部结构

频率点数通常取 61 个，在对数尺度上均匀分布：

$$\log_{10}(T_i) = \log_{10}(T_{\min}) + \frac{i-1}{n-1} [\log_{10}(T_{\max}) - \log_{10}(T_{\min})] \quad (2)$$

其中 $T_i = 1/f_i$ 为第 i 个频点的周期， n 为频率点数（通常 $n = 61$ ）， T_{\min} 和 T_{\max} 分别为最小和最大周期。

2.2 Maxwell 方程与 Helmholtz 方程

2.2.1 Maxwell 方程组

对于 TE (横电) 极化模式, 电场垂直于传播方向。在一维情况下, 假设电场沿 x 方向, 磁场沿 y 方向, 传播沿 z 方向 (垂直向下)。Maxwell 方程组简化为:

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} = i\omega\mu_0 H_y \quad (3)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial z} = \sigma E_x \quad (4)$$

其中:

- $E_x(z)$: x 方向的电场分量 (V/m)
- $H_y(z)$: y 方向的磁场分量 (A/m)
- $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$ H/m: 真空磁导率
- $\omega = 2\pi f$: 角频率 (rad/s)
- σ : 电导率 (S/m)

2.2.2 Helmholtz 方程的推导

从方程 (3) 和 (4) 可以推导出 Helmholtz 方程。

首先, 对方程 (3) 两边关于 z 求导:

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} = i\omega\mu_0 \frac{\partial H_y}{\partial z} \quad (5)$$

将方程 (4) 代入上式, 得到:

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} = i\omega\mu_0\sigma E_x \quad (6)$$

整理得到 Helmholtz 方程:

$$\frac{d^2 E_x}{dz^2} + k^2 E_x = 0 \quad (7)$$

其中 k 为波数 (复数), 定义为:

$$k = \sqrt{i\omega\mu_0\sigma} \quad (8)$$

2.2.3 波数的物理意义

波数 k 是复数，可以表示为：

$$k = (1 + i) \sqrt{\frac{\omega \mu_0 \sigma}{2}} = \alpha + i\beta \quad (9)$$

其中：

- $\alpha = \beta = \sqrt{\frac{\omega \mu_0 \sigma}{2}}$: 衰减系数和相位系数（实数部分和虚数部分相等）
- 电磁波在导电介质中传播时会衰减，衰减长度（趋肤深度）为 $\delta = 1/\alpha = \sqrt{\frac{2}{\omega \mu_0 \sigma}}$
- 趋肤深度决定了该频率电磁波的探测深度

重要物理意义：频率越低、电导率越小，趋肤深度越大，即穿透深度越深。这解释了为什么 MT 方法能够探测深部结构。

2.3 向上递推阻抗法

2.3.1 基本思想

向上递推阻抗法是一种解析方法，基于传输线理论，利用层间阻抗的连续性条件，从最底层（半空间）开始，逐层向上递推到地表，计算地表阻抗。

核心思想：

1. 每层介质可以看作一个传输线，具有特征阻抗
2. 在层界面处，阻抗必须连续（物理边界条件）
3. 从最底层（已知）开始，利用连续性条件逐层向上计算

2.3.2 阻抗的定义

在 MT 方法中，阻抗定义为电场与磁场的比值：

$$Z(z) = \frac{E_x(z)}{H_y(z)} \quad (10)$$

阻抗的单位是欧姆 (Ω)，反映了介质的电性特征。

2.3.3 特征阻抗和波数

对于第 i 层均匀介质，求解 Helmholtz 方程 (7) 可以得到电磁场的解析解。在第 i 层中，电场可以表示为：

$$E_x(z) = A_i e^{-k_i z} + B_i e^{k_i z} \quad (11)$$

其中 A_i 和 B_i 为待定系数， k_i 为第 i 层的波数：

$$k_i = \sqrt{i\omega\mu_0\sigma_i} = (1+i)\sqrt{\frac{\omega\mu_0\sigma_i}{2}} \quad (12)$$

第 i 层的特征阻抗定义为：

$$Z_{0i} = \frac{i\omega\mu_0}{k_i} = \sqrt{\frac{i\omega\mu_0}{\sigma_i}} = (1+i)\sqrt{\frac{\omega\mu_0}{2\sigma_i}} \quad (13)$$

特征阻抗反映了介质的固有电性特征，类似于传输线的特性阻抗。

2.3.4 阻抗递推公式的推导

考虑两层介质系统：第 i 层（厚度 d_i ）覆盖在第 $i+1$ 层之上。在层界面处，电场和磁场必须连续，因此阻抗也连续。

在第 i 层内部，考虑向上和向下传播的波的叠加。经过推导（基于传输线理论），可以得到从第 $i+1$ 层的阻抗 Z_{i+1} 计算第 i 层顶部阻抗 Z_i 的递推公式：

$$Z_i = Z_{0i} \cdot \frac{Z_{i+1} + Z_{0i} \tanh(k_i d_i)}{Z_{0i} + Z_{i+1} \tanh(k_i d_i)} \quad (14)$$

其中：

- Z_i : 第 i 层顶部的阻抗
- Z_{i+1} : 第 $i+1$ 层顶部的阻抗（即第 i 层底部的阻抗）
- Z_{0i} : 第 i 层的特征阻抗
- k_i : 第 i 层的波数
- d_i : 第 i 层的厚度
- $\tanh(k_i d_i)$: 复双曲正切函数

2.3.5 复双曲正切函数

对于复数 $z = x + iy$, 双曲正切函数定义为:

$$\tanh(z) = \frac{\sinh(z)}{\cosh(z)} = \frac{e^z - e^{-z}}{e^z + e^{-z}} \quad (15)$$

对于 $z = k_i d_i$, 其中 $k_i = (1+i)\alpha_i$, $\alpha_i = \sqrt{\frac{\omega\mu_0\sigma_i}{2}}$:

$$e^{k_i d_i} = e^{\alpha_i d_i} e^{i\alpha_i d_i} = e^{\alpha_i d_i} [\cos(\alpha_i d_i) + i \sin(\alpha_i d_i)] \quad (16)$$

因此:

$$\sinh(k_i d_i) = \frac{1}{2}(e^{k_i d_i} - e^{-k_i d_i}) \quad (17)$$

$$\cosh(k_i d_i) = \frac{1}{2}(e^{k_i d_i} + e^{-k_i d_i}) \quad (18)$$

2.3.6 递推算法

初始化: 最底层 (第 $M-1$ 层) 作为半空间, 其阻抗等于特征阻抗:

$$Z_{M-1} = Z_{0,M-1} = \sqrt{\frac{i\omega\mu_0}{\sigma_{M-1}}} \quad (19)$$

递推过程:

1. 从 $i = M-2$ 开始 (倒数第二层)
2. 使用公式 (14) 计算 Z_i
3. $i = i - 1$, 重复步骤 2
4. 直到 $i = 0$ (地表层), 得到地表阻抗 Z_0

算法伪代码:

步骤 1 初始化: $Z_{M-1} = Z_{0,M-1}$ (最底层阻抗)

步骤 2 循环: i 从 $M-2$ 递减到 0

- (a) 计算 $k_i = \sqrt{i\omega\mu_0\sigma_i}$
- (b) 计算 $\tanh(k_i d_i)$
- (c) 使用公式 (14) 计算 Z_i

步骤 3 输出地表阻抗 Z_0

2.4 MT 响应计算

计算得到地表阻抗 Z_0 后，可计算 MT 响应（视电阻率和相位）：

2.4.1 视电阻率

视电阻率

视电阻率定义为：

$$\rho_a = \frac{|Z_0|^2}{\omega\mu_0} = \frac{Z_0 \cdot Z_0^*}{\omega\mu_0} \quad (20)$$

其中 Z_0^* 为 Z_0 的共轭复数， $|Z_0|^2 = [\text{Re}(Z_0)]^2 + [\text{Im}(Z_0)]^2$ 。

物理意义：

- 视电阻率 ρ_a 是综合反映地下一定深度范围内介质电性的等效电阻率
- 它不是某一层的真实电阻率，而是多层介质的综合响应
- 视电阻率的大小反映了介质的导电能力： ρ_a 大表示电阻性强（导电性差）， ρ_a 小表示导电性强
- 不同频率的视电阻率反映不同深度的电性结构（高频反映浅部，低频反映深部）

推导说明：对于均匀半空间，阻抗 $Z = \sqrt{i\omega\mu_0/\sigma}$ ，代入上式可以得到 $\rho_a = 1/\sigma = \rho$ ，即视电阻率等于真实电阻率。对于层状介质，视电阻率是等效值。

2.4.2 相位

相位

相位定义为：

$$\phi = \arctan \left(\frac{\text{Im}(Z_0)}{\text{Re}(Z_0)} \right) \quad (\text{弧度}) \quad (21)$$

或

$$\phi = \frac{180}{\pi} \arctan \left(\frac{\text{Im}(Z_0)}{\text{Re}(Z_0)} \right) \quad (\text{度}) \quad (22)$$

物理意义：

- 相位 ϕ 表示电场和磁场之间的相位差，反映了电磁场在传播过程中的延迟
- 相位是复数阻抗的幅角，范围通常在 0° 到 90° 之间

- 对于均匀半空间，相位为 45°
- 相位对电阻率变化非常敏感，是反演的重要约束信息
- 相位信息有助于减少反演的非唯一性

实际应用：在实际计算中，通常以 $\log_{10}(\rho_a)$ 和相位 ϕ （度）的形式存储，便于后续处理和可视化。MT 数据通常绘制为视电阻率和相位随频率（或周期）变化的曲线，称为 MT 曲线或视电阻率-相位曲线。

3 MT 反演问题

3.1 反演问题的数学表述

3.1.1 问题定义

给定观测数据 $\mathbf{d}_{obs} \in \mathbb{R}^n$ (n 为数据点数，通常 $n = 2n_{freq}$ ，包含视电阻率和相位)，寻找模型参数 $\mathbf{m} \in \mathbb{R}^M$ (M 为模型层数)，使得合成数据 $\mathbf{d}_{syn}(\mathbf{m})$ 与观测数据 \mathbf{d}_{obs} 的差异最小。

正演算子定义为：

$$\mathbf{d}_{syn} = F(\mathbf{m}) \quad (23)$$

其中 $F : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}^n$ 为非线性正演算子，将 M 维模型参数映射到 n 维数据空间。

数据向量结构： \mathbf{d}_{obs} 通常包含

- 前 n_{freq} 个元素： $\log_{10}(\rho_a)$ （对数视电阻率）
- 后 n_{freq} 个元素： ϕ （相位，单位：度）

其中 n_{freq} 为频率点数。

模型向量结构： \mathbf{m} 包含

- $m_i = \log_{10}(\rho_i)$ ：第 i 层电阻率的对数 ($i = 0, 1, \dots, M - 1$)
- 每层的厚度 d_i 通常预先设定（在对数深度尺度上等间距分布）

3.1.2 不适定性问题

反演问题通常是不适定的 (ill-posed)，表现为：

- **解不唯一：**多个不同的模型可能产生相同或非常相似的观测数据。这是由于：
 - 数据量有限（通常几十到上百个数据点）

- 模型参数较多（通常几十层）
- 数据对深部的敏感度较低
- **解不稳定：**观测数据的小扰动（测量误差）可能导致模型的大变化。这要求：
 - 引入先验信息约束模型
 - 使用正则化方法稳定解
- **过度拟合：**模型可能过度复杂，包含虚假结构（由噪声引起的）。需要通过正则化惩罚复杂模型。

因此，需要引入正则化约束来稳定反演过程，得到合理的、稳定的解。

3.2 目标函数

3.2.1 数据拟合项

数据拟合项衡量合成数据与观测数据的差异，使用 L2 范数（最小二乘）：

$$\Phi_d(\mathbf{m}) = \|\mathbf{d}_{obs} - \mathbf{d}_{syn}(\mathbf{m})\|^2 = \sum_{i=1}^n [d_{obs,i} - d_{syn,i}(\mathbf{m})]^2 \quad (24)$$

数据拟合项的物理意义：

- 衡量模型预测与观测的吻合程度
- 越小表示模型越能解释观测数据
- 但过小的拟合误差可能表示过度拟合

3.2.2 正则化项

正则化项引入先验信息，约束模型的平滑性或简单性：

$$\Phi_m(\mathbf{m}) = \|L\mathbf{m}\|^2 \quad (25)$$

其中 L 为正则化矩阵，编码先验信息。

正则化项的物理意义：

- 反映我们对模型的先验认知（如：模型应该平滑）
- 惩罚复杂模型，防止过度拟合
- 使解更稳定，更符合地质实际情况

3.2.3 总目标函数

阻尼最小二乘 (Tikhonov 正则化) 目标函数为:

$$\Phi(\mathbf{m}) = \Phi_d(\mathbf{m}) + \lambda \Phi_m(\mathbf{m}) = \|\mathbf{d}_{obs} - \mathbf{d}_{syn}(\mathbf{m})\|^2 + \lambda \|L\mathbf{m}\|^2 \quad (26)$$

其中:

- $\Phi_d(\mathbf{m})$: 数据拟合项, 衡量数据拟合程度
- $\Phi_m(\mathbf{m})$: 模型约束项 (正则化项), 衡量模型的复杂程度
- $\lambda > 0$: 正则化参数, 平衡数据拟合和模型约束
 - λ 大: 更重视模型平滑, 可能牺牲数据拟合
 - λ 小: 更重视数据拟合, 模型可能振荡
- L : 正则化矩阵, 编码先验信息

3.3 正则化矩阵

3.3.1 平滑度约束 (SMOOTHNESS)

二阶差分矩阵, 惩罚模型参数的二阶导数, 使模型平滑:

$$L_{ij} = \begin{cases} 1, & j = i \\ -2, & j = i + 1 \\ 1, & j = i + 2 \\ 0, & \text{其他} \end{cases} \quad (27)$$

对应的约束为:

$$\Phi_m(\mathbf{m}) = \sum_{i=1}^{M-2} (m_i - 2m_{i+1} + m_{i+2})^2 \quad (28)$$

这惩罚相邻层之间的二阶差分 (即二阶导数), 使模型平滑。正则化矩阵 L 的维度为 $(M - 2) \times M$ 。

物理意义: 假设真实地球的电性结构变化是平滑的, 避免出现剧烈跳跃的虚假结构。

3.3.2 平坦度约束 (FLATNESS)

一阶差分矩阵，惩罚模型梯度：

$$L_{ij} = \begin{cases} -1, & j = i \\ 1, & j = i + 1 \\ 0, & \text{其他} \end{cases} \quad (29)$$

对应的约束为：

$$\Phi_m(\mathbf{m}) = \sum_{i=1}^{M-1} (m_{i+1} - m_i)^2 \quad (30)$$

这惩罚相邻层之间的变化，使模型变化平坦。正则化矩阵 L 的维度为 $(M-1) \times M$ 。

3.3.3 最小范数约束 (MINIMUM_NORM)

单位矩阵，最小化模型参数的 L2 范数：

$$L = I \quad (31)$$

对应的约束为：

$$\Phi_m(\mathbf{m}) = \sum_{i=1}^M m_i^2 \quad (32)$$

这使模型参数尽可能小（接近参考模型）。正则化矩阵 L 为 $M \times M$ 单位矩阵。

实际应用：平滑度约束 (SMOOTHNESS) 最为常用，因为它最符合大多数地质结构的实际情况。

3.4 高斯-牛顿法

3.4.1 非线性问题的线性化

正演算子 $F(\mathbf{m})$ 是非线性的，无法直接求解。在模型 $\mathbf{m}^{(k)}$ 附近进行一阶泰勒展开：

$$\mathbf{d}_{syn}(\mathbf{m}) \approx \mathbf{d}_{syn}(\mathbf{m}^{(k)}) + J^{(k)}(\mathbf{m} - \mathbf{m}^{(k)}) \quad (33)$$

其中 $J^{(k)}$ 为 Jacobian 矩阵（也称为灵敏度矩阵或梯度矩阵），元素为：

$$J_{ij}^{(k)} = \frac{\partial d_{syn,i}}{\partial m_j} \Big|_{\mathbf{m}=\mathbf{m}^{(k)}} \quad (34)$$

Jacobian 矩阵的维度为 $n \times M$ ，表示每个数据对每个模型参数的灵敏度（即：模型参数变化时，数据的变化率）。

物理意义：

- J_{ij} 大: 数据 i 对模型参数 j 敏感
- J_{ij} 小: 数据 i 对模型参数 j 不敏感
- 通常浅层参数对高频数据敏感, 深层参数对低频数据敏感

3.4.2 残差向量

定义残差向量 (数据拟合误差):

$$\mathbf{r}^{(k)} = \mathbf{d}_{obs} - \mathbf{d}_{syn}(\mathbf{m}^{(k)}) \quad (35)$$

线性化后的数据拟合项为:

$$\Phi_d(\mathbf{m}) \approx \|\mathbf{r}^{(k)} - J^{(k)}\delta\mathbf{m}\|^2 \quad (36)$$

其中 $\delta\mathbf{m} = \mathbf{m} - \mathbf{m}^{(k)}$ 为模型更新量。

3.4.3 正规方程的推导

将目标函数在 $\mathbf{m}^{(k)}$ 附近线性化:

$$\Phi(\mathbf{m}) \approx \|\mathbf{r}^{(k)} - J^{(k)}\delta\mathbf{m}\|^2 + \lambda\|L(\mathbf{m}^{(k)} + \delta\mathbf{m})\|^2 \quad (37)$$

展开第一项:

$$\|\mathbf{r}^{(k)} - J^{(k)}\delta\mathbf{m}\|^2 = (\mathbf{r}^{(k)} - J^{(k)}\delta\mathbf{m})^T(\mathbf{r}^{(k)} - J^{(k)}\delta\mathbf{m}) \quad (38)$$

$$= (\mathbf{r}^{(k)})^T\mathbf{r}^{(k)} - 2(\mathbf{r}^{(k)})^TJ^{(k)}\delta\mathbf{m} + (\delta\mathbf{m})^T(J^{(k)})^TJ^{(k)}\delta\mathbf{m} \quad (39)$$

展开第二项 (忽略常数项 $\|L\mathbf{m}^{(k)}\|^2$):

$$\lambda\|L(\mathbf{m}^{(k)} + \delta\mathbf{m})\|^2 \approx \lambda[(\mathbf{m}^{(k)})^T L^T L \mathbf{m}^{(k)} + 2(\mathbf{m}^{(k)})^T L^T L \delta\mathbf{m} + (\delta\mathbf{m})^T L^T L \delta\mathbf{m}] \quad (40)$$

对 $\delta\mathbf{m}$ 求导并令其为零:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \delta\mathbf{m}} = -2(J^{(k)})^T\mathbf{r}^{(k)} + 2(J^{(k)})^T J^{(k)}\delta\mathbf{m} + 2\lambda L^T L(\mathbf{m}^{(k)} + \delta\mathbf{m}) = 0 \quad (41)$$

整理得到正规方程 (Normal Equation):

$$[(J^{(k)})^T J^{(k)} + \lambda L^T L]\delta\mathbf{m} = (J^{(k)})^T \mathbf{r}^{(k)} - \lambda L^T L \mathbf{m}^{(k)} \quad (42)$$

当初始模型 $\mathbf{m}^{(0)}$ 接近零或正则化项较小时, 可忽略 $\lambda L^T L \mathbf{m}^{(k)}$ 项, 得到简化形式:

$$[(J^{(k)})^T J^{(k)} + \lambda L^T L]\delta\mathbf{m} = (J^{(k)})^T \mathbf{r}^{(k)} \quad (43)$$

方程性质:

- 系数矩阵 $(J^{(k)})^T J^{(k)} + \lambda L^T L$ 是对称正定矩阵
- 可使用 Cholesky 分解高效求解
- 正则化项 $\lambda L^T L$ 使矩阵条件数改善, 数值更稳定

3.4.4 迭代更新

模型更新公式为:

$$\mathbf{m}^{(k+1)} = \mathbf{m}^{(k)} + \delta\mathbf{m}^{(k)} \quad (44)$$

迭代过程:

1. 计算当前模型的合成数据 $\mathbf{d}_{syn}(\mathbf{m}^{(k)})$
2. 计算残差 $\mathbf{r}^{(k)} = \mathbf{d}_{obs} - \mathbf{d}_{syn}(\mathbf{m}^{(k)})$
3. 计算 Jacobian 矩阵 $J^{(k)}$
4. 求解正规方程得到 $\delta\mathbf{m}^{(k)}$
5. 更新模型: $\mathbf{m}^{(k+1)} = \mathbf{m}^{(k)} + \delta\mathbf{m}^{(k)}$
6. 检查收敛判据, 如未收敛则返回步骤 1

3.5 Jacobian 矩阵的计算

3.5.1 有限差分法

由于正演算子的解析导数难以计算, 使用有限差分法近似 Jacobian 矩阵。

前向差分法:

$$J_{ij} = \frac{\partial d_{syn,i}}{\partial m_j} \approx \frac{d_{syn,i}(\mathbf{m} + \epsilon\mathbf{e}_j) - d_{syn,i}(\mathbf{m})}{\epsilon} \quad (45)$$

其中:

- \mathbf{e}_j 为第 j 个标准基向量 (第 j 个分量为 1, 其他为 0)
- ϵ 为扰动步长, 通常 $\epsilon = 10^{-5}$ 或 10^{-6}
- 需要 M 次正演计算 (每列一次)

中心差分法 (更精确但计算量加倍):

$$J_{ij} \approx \frac{d_{syn,i}(\mathbf{m} + \epsilon\mathbf{e}_j) - d_{syn,i}(\mathbf{m} - \epsilon\mathbf{e}_j)}{2\epsilon} \quad (46)$$

需要 $2M$ 次正演计算。

计算复杂度:

- Jacobian 矩阵大小为 $n \times M$, 通常 $n \gg M$ (如 $n = 122$, $M = 40$)
- 前向差分法需要 M 次正演计算
- 中心差分法需要 $2M$ 次正演计算
- 正演计算是反演的主要计算开销

3.6 收敛判据与停止条件

3.6.1 收敛判据

模型更新判据: 模型更新量的 L2 范数小于容差

$$\|\delta\mathbf{m}^{(k)}\| < \text{tol_dm} \quad (47)$$

通常使用 $\text{tol_dm} = 10^{-4}$, 表示模型已收敛 (更新量很小)。

残差判据: 数据拟合残差的 L2 范数小于容差

$$\|\mathbf{r}^{(k)}\| = \|\mathbf{d}_{obs} - \mathbf{d}_{syn}(\mathbf{m}^{(k)})\| < \text{tol_residual} \quad (48)$$

相对残差判据: 相对残差小于容差

$$\frac{\|\mathbf{r}^{(k)}\|}{\|\mathbf{d}_{obs}\|} < \text{tol_relative} \quad (49)$$

通常设置 $\text{tol_relative} = 10^{-3}$ 或更小。

最大迭代次数: 防止无限迭代, 通常设置 $\text{max_iter} = 20$ 。

3.6.2 正则化参数的选择

正则化参数 λ 的选择影响反演结果:

- λ 过大: 模型过度平滑, 数据拟合差, 可能丢失真实结构
- λ 过小: 模型可能振荡, 不稳定, 可能包含虚假结构
- 需要通过 L 曲线法或交叉验证选择最优 λ , 平衡数据拟合和模型平滑度

L 曲线法: 绘制 $\log(\|\mathbf{r}\|)$ vs $\log(\|L\mathbf{m}\|)$ 曲线, 选择拐点处的 λ 值。

4 数值实现要点

4.1 数值稳定性

4.1.1 复数运算

MT 正演涉及大量复数运算, 需要注意:

- 使用高精度浮点数 (double 精度, 64 位) 进行所有计算
- 避免除零和数值溢出, 检查分母是否为零

- 检查 NaN (Not a Number) 和 Inf (无穷大) 值
- 对双曲函数计算要注意数值稳定性 (避免 e^x 溢出)

数值稳定性技巧:

- 在计算 $\tanh(z)$ 时, 如果 $|z|$ 很大, 直接使用 $\tanh(z) \approx \text{sign}(z)$
- 使用对数空间进行计算, 避免数值溢出

4.1.2 矩阵求解

正规方程 $(J^T J + \lambda L^T L)\delta\mathbf{m} = J^T \mathbf{r}$ 是对称正定线性方程组, 可使用:

- **Cholesky 分解:** 适用于对称正定矩阵, 效率高, 数值稳定
- **LU 分解:** 更通用但效率略低
- **QR 分解:** 数值稳定性最好, 但计算量大

推荐使用 Cholesky 分解, 因为系数矩阵是对称正定的。

4.2 计算效率优化

4.2.1 矩阵运算优化

使用高性能数学库 (如 Intel MKL、OpenBLAS) 进行矩阵运算:

- `cblas_dsyrk`: 计算 $J^T J$ (对称矩阵的秩 k 更新), 利用对称性加速
- `cblas_dgemv`: 计算 $J^T \mathbf{r}$ (矩阵-向量乘法)
- `LAPACKE_dposv`: 求解对称正定线性方程组 (Cholesky 分解)
- `cblas_dgemm`: 通用矩阵乘法 (备选方案)

这些库通常针对现代 CPU 进行了优化, 包括 SIMD (单指令多数据) 指令集优化。

4.2.2 并行计算

MT 正反演计算具有天然的并行性：

- **频率循环并行化：**不同频率的正演计算相互独立，可并行执行。对于 n_{freq} 个频率，可使用 n_{freq} 个线程并行计算。
- **Jacobian 矩阵并行化：**每个参数的扰动计算独立，可并行计算各列。对于 M 个参数，可使用 M 个线程并行计算。
- **矩阵运算并行化：**BLAS 库内部支持多线程并行，自动利用多核 CPU。
- 建议使用 OpenMP 或 Intel TBB 实现多线程并行。

并行策略：优先并行化频率循环（粗粒度并行），因为每个频率的正演计算时间较长，并行效率高。