

Identifikation von Anisotropien in der räumlichen Verteilung von Eigenschaftskenngrößen unter Anwendung mathematischer Optimierungsalgorithmen

Martin KRESSNER, Jörg MEIER und Carsten DREBENSTEDT

Zusammenfassung

Für die Schätzung und Bewertung von Rohstoffvorkommen ist es von entscheidender Bedeutung, die vorhandene Datengrundlage im Sinne der Maximierung des Informations- bzw. Erkenntniszuwachses optimal auszuwerten. In Verbindung mit vorbereitenden statistischen Analysen bietet die Variographie die Voraussetzungen für eine umfassende Charakterisierung der Variabilität ortsabhängiger Eigenschaftskenngrößen. Auf der Grundlage der Ergebnisse dieser Charakterisierung können geologische Interpretationen untermauert, erkundungs- und gewinnungstechnische Schlussfolgerungen abgeleitet und fortgeschrittene Schätzverfahren (z.B. Kriging) zur Anwendung gebracht werden.

Die Schwierigkeit der Variographie besteht im zeit- und arbeitsaufwändigen Prozess der Parameterermittlung und -validierung, weshalb oftmals nicht das volle Informationspotential der Erkundungsdaten ausgeschöpft werden kann.

Mathematische Optimierungsmethoden bieten Algorithmen für die automatisierte Anpassung der Variogrammmodellparameter an die Variationscharakteristik der verfügbaren Erkundungsdaten und stellen statistische Bewertungsgrößen zur Einschätzung der Anpassungsergebnisse zur Verfügung. Die ermittelten Variogrammmodellparameter charakterisieren die Richtungsabhängigkeit der räumlichen Kennwertvariabilität und ermöglichen weiterführende Berechnungen und Interpretationen.

Beispiele für die Anwendung einzelner Optimierungsmethoden sind aus der Fachliteratur bekannt. Die inverse Bestimmung der optimalen Anpassung des Variogrammmodells an die verfügbaren Erkundungsdaten erfolgt unter Anwendung der Punkt- und Kreuzprüfung. Am Beispiel verschiedener Datensätze werden Arbeitsprinzipien und Vorteile der Anwendung von verschiedenen Optimierungsverfahren demonstriert, Ergebnisse diskutiert sowie Perspektiven der Anwendung aufgezeigt.

1 Einführung

Eine der Hauptaufgaben der Variographie ist die Ermittlung und optimale Anpassung von Variogrammmodellparametern. Die Formulierung mathematischer Regressionsfunktionen auf der Basis von Einzelstützpunkten wird in der Fachliteratur mit verschiedenen wissenschaftlichen Ansätzen diskutiert. Verbesserte Regressionsfunktionen zur Minimierung der Abweichungen zwischen empirischen und parameterischen Variogrammen werden z.B. von Lee & Soumendra 2002 vorgeschlagen.

Ein weiterer Ansatz verwendet inverse Methoden der Parameterermittlung in Verbindung mit mathematischen Optimierungsverfahren (z.B. Dahle et al. 2004). Dabei werden in einer

sog. „Vorwärtsrechnung“ die Eigenschaftskennwerte bekannter Stützpunkte unter Verwendung der Variogrammmodellparameter geschätzt (Punkt- und Kreuzprüfung). Der Vergleich zwischen dem Schätzwert einer Eigenschaftskenngröße mit dem tatsächlichen Wert am Stützpunkt ist die Voraussetzung für eine gezielte Variation der Schätzparameter bzw. der Variogrammmodellparameter. Die mathematischen Optimierungsalgorithmen nutzen verschiedene Strategien der iterativen Parametervariation zur Minimierung der Abweichung zwischen dem berechneten und gemessenen Eigenschaftskennwert. Auf diese Weise ermöglichen die Optimierungsalgorithmen eine vollständig automatisierte Ermittlung der Variogrammmodellparameter ohne Anpassung der Vorwärtsrechnung und liefern statistische Kenngrößen sowie Informationen zur Bewertung der Anpassungsqualität.

Der sich über Fachgebietsgrenzen immer weiter verbreitende Einsatz der inversen Methoden zur Bestimmung von Modellparametern spiegelt sich auch in der verfügbaren Fachliteratur wieder: es finden sich eine Vielzahl von Beiträgen beispielsweise für die Themenbereiche Strukturanalyse (z. B. MATOUŠ et al. 2000, SCHLEGEL & WILL 2006), Maschinen- und Automobilbau (z. B. FLORES SANTIAGO & BAUSINGER 1998, FLEISCHER & BROOS 2004), Hydrogeologie (z. B. BITTERLICH & KNABNER 2002, CARRERA et al. 2005) und Strömungsmechanik (z. B. FINSTERLE 1998 and 2000, JEONG 2003). Eine große Anzahl von Publikationen zu den theoretischen Grundlagen kann weiterhin in der mathematischen Literatur gefunden werden (z. B. HADAMARD 1902, BIALY & OLBRICH 1975, LOUIS 1989, SPALL 2003, BOYD & VAN DEN BERGHE 2006). Eine Anwendung in den Bereichen der Geotechnik, des Bergbaus und Prospektion erscheint evident und wird durch verschiedene Autoren gezeigt (z. B. SCHANZ et al. 2006, CUI & SHENG 2006, Meier et al. 2008).

Alle zitierten Autoren stimmen darin überein, dass für den Fall der Existenz einer „geeigneten“ Vorwärtsrechnung Optimierungsstrategien erfolgreich genutzt werden können. „Geeignete“ Vorwärtsrechnung heißt an dieser Stelle, dass das numerische Modell bezüglich der realistischen Abbildung der vorliegenden physikalischen Phänomene im Vorgang validiert wurde. In diesem Kontext haben sich der Partikel Schwarm Algorithmus und der Shuffled Complex-Evolutionary-Algorithmus als effiziente Werkzeuge zur Findung von Parametersätzen gezeigt, die zu einer möglichst guten Übereinstimmung zwischen Realität und Simulationsergebnissen führen.

Die Aufgabe dieses Beitrages ist es, die Erweiterung der konventionellen Variographie durch Anwendung verschiedener Optimierungsalgorithmen zu demonstrieren und Anwendungsaspekte aus der automatisierten Durchführung der Berechnungen und der Verfügbarkeit statistisch bewerteter Optimierungsergebnisse darzustellen.

Zu diesem Zweck werden in diesem Beitrag Ergebnisse aus den Berechnungen an topografischen Daten und einem Datensatz einer Lagerstättenexploration vorgestellt. Die topografischen Daten wurden aus hoch aufgelösten Laservermessungsdaten extrahiert und ermöglichen einen direkten Vergleich zwischen dem Optimierungsergebnis und der Richtungsabhängigkeit der realen Kennwertverteilung (Höhe ü. NN) in Form der sichtbaren topografischen Strukturen. Da der untersuchte Kennwert im Fall der topografischen Daten die Höhe ü. NN ist, vereinfachen sich die Variogrammuntersuchungen auf ein zweidimensionales Problem aus Sicht des Schätzers.

Die Anwendung der Daten der Lagerstättenexploration gewährt die Betrachtung verschiedener lagerstättegeologischer Einflüsse auf die inverse Aufgabenstellung bzw. die Aus-

wahl des geeigneten Optimierungsverfahrens und beeinflusst somit das Optimierungsergebnis.

2 Inverse Parameteridentifikation

Das grundlegende Berechnungsschema des direkten Ansatzes der Parameterrückrechnung kann Abb. 1 entnommen werden. Für diesen Ansatz muss eine Abweichungs- oder auch Zielfunktion $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ festgelegt werden, die in Abhängigkeit der n gesuchten Parameter ein Messwert für die Abweichung zwischen Messwerten aus der Natur und zugehörigen Berechnungsergebnissen berechnet. Nach der Vorgabe von Startparameterwerten wird die Vorwärtsrechnung ein oder mehrere Male aufgerufen und die relevanten Daten nachfolgend extrahiert. Durch den Vergleich mit vorgegebenen Soll- bzw. Referenzwerten durch die Zielfunktion wird der zugehörige Zielfunktionswert errechnet. Auf der Basis dieses Güterwertes wird durch den Algorithmus ein neuer Satz von Berechnungsparameterwerten festgelegt und ein weiterer Optimierungszyklus begonnen. Alternativ kann bei der Erfüllung eines oder mehrerer Abbruchkriterien die Schleife verlassen werden. Das unmittelbare Ziel ist hier die Minimierung des Zielfunktionswertes.

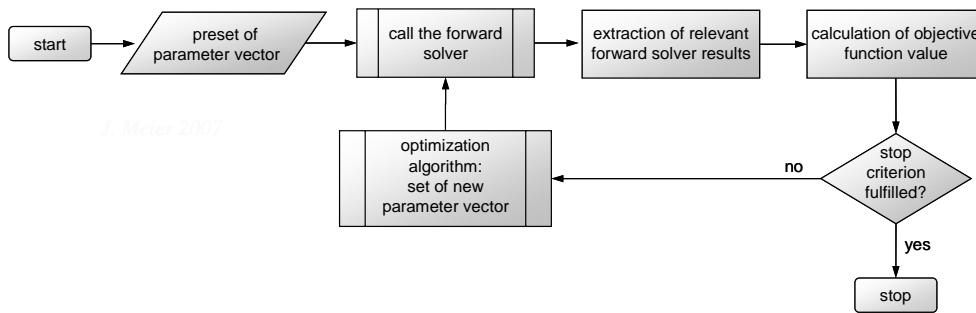


Abb. 1: Ablaufschema der Optimierung

Häufig wird die Berechnung des Zielfunktionswertes in Anlehnung an die Methode der kleinsten Quadrate für mehrere Zeitserien wie folgt definiert:

$$f(x) = \frac{1}{g} \sum_{j=1}^g [w_j \cdot f_j(x)] \quad (1)$$

mit

$$f_j(x) = \frac{1}{m_j} \sum_{h=1}^{m_j} [w_{h,j} \cdot (y_{h,j}^{calc}(x) - y_{h,j}^{meas})^2] \quad (2)$$

In den oben genannten Gleichungen (1) und (2) bezeichnet x den (zunächst unbekannt) Parametervektor mit den Steuergrößen der Vorwärtsrechnung. Die Größen $y_{h,j}^{calc}$ bzw. $y_{h,j}^{meas}$ bezeichnen die aktuell berechnete Systemantwort für x bzw. die Messdaten und w_j positive Wichtungsfaktoren bzw. -funktionen, die entsprechend den Messfehlern von $f'_j(x)$ vorzugeben sind.

Abb. 2 zeigt das prinzipielle Schema des Matrix-Plots zur Ergebnisvisualisierung der Ergebnisse von Abtastverfahren, wie dem Monte-Carlo-Verfahren. Matrix-Plots stellen ein mathematisches Standardwerkzeug für die Untersuchung mehrdimensionalen Datensätze dar (z. B. MANLY 1944). Jedes nichtdiagonale Element der Matrix mit Ausnahme der untersten Zeile zeigt Abhängigkeiten in der Stützpunktverteilung der jeweiligen zwei Parameter. Folglich ist dieser Teil der Matrix, wie in Abb. 2 in Form einer Prinzipskizze verdeutlicht, symmetrisch. Das Matrixelement $x_n - x_2$ deutet beispielsweise darauf hin, dass die beteiligten Parameter x_2 und x_n nicht voneinander unabhängig sind, sondern eine Korrelation aufweisen. Die Elemente in der untersten Zeile des Matrixplots zeigen Plots, in denen der Wert der Zielfunktion über dem der jeweiligen Spalte zugeordneten Parameter dargestellt ist. Diese Plots können entsprechend als Projektionen der Zielfunktionstopologie angesehen werden. Falls die Optimierungsaufgabe als „gut gestellt“ (well-posed) bezeichnet werden kann, wird jeder dieser Zielfunktionsprojektions-Plots einen deutlichen Extremwert aufweisen, wie dies beispielsweise im Diagramm der Spalte x_n dargestellt ist. Andernfalls kann der jeweilige Parameter nicht zuverlässig mittels inverser Verfahren bestimmt werden. Die Punktverteilung in einem solchen Matrix-Plot kann einen Hinweis auf die Größe und Form des Extremalbereichs geben.

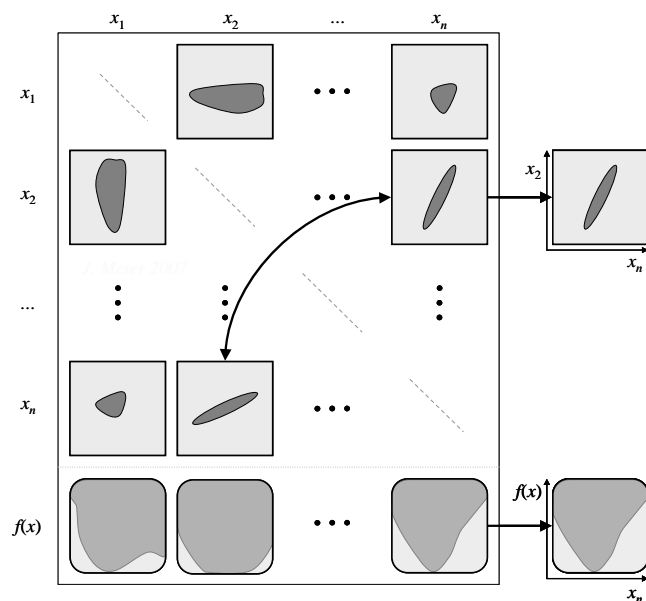


Abb. 2: Statistische Analyse mittels Scatter-Plot-Matrix: Prinzipschema

3 Durchführung der Untersuchungen

Die Anwendung der mathematischen Optimierungsalgorithmen ergänzt die konventionelle Arbeitsweise für den Einsatz der fortgeschrittenen Schätzverfahren wie z.B. Kriging. Auf der Grundlage der statistischen Analyse der Datensätze und der Berechnung der empirischen Variogramme und anschließenden Modellierung werden Startwerte und definierte Suchintervalle für eine stochastische Parametervariation ermittelt (Abb. 3). Die stochastische Parametervariation hat zum Ziel, die angewandten Parameter hinsichtlich ihres Einflusses auf das Ergebnis und Abhängigkeiten zwischen den Parametern zu charakterisieren und begrenzte Suchintervalle für den anschließenden Einsatz der mathematischen Optimierungsalgorithmen abzuleiten.

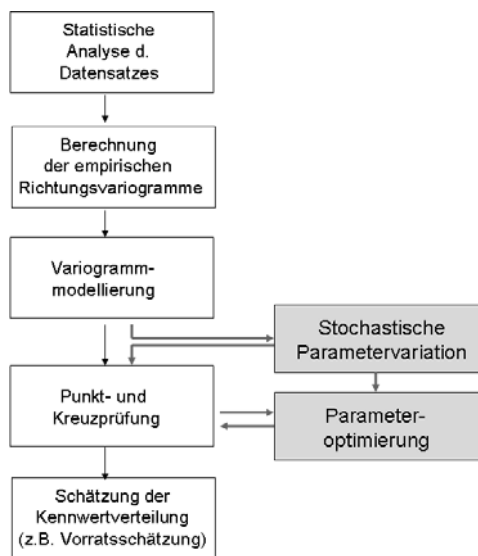


Abb. 3: Konventionelle Arbeitsmethode und Schnittstellen der Parameteroptimierung

Das jeweilige Parameteroptimierungsverfahren liefert sequenziell einen Parametersatz an die Punkt- und Kreuzprüfung, wertet das Berechnungsergebnis aus und generiert gemäß dem zugrunde liegenden Optimierungsalgorithmus einen neuen Parametersatz.

3.1 Optimierte Parameter und Definition des Zielfunktionswertes

Die variierten Parameter entsprechen den Variogrammmodellparametern zur räumlichen Beschreibung von Richtungsabhängigkeiten in der Verteilung der Eigenschaftskennwerte und sind die Grundlage für die Schätzung der Kennwerte an den Stützpunktstellen. Zu den Variogrammmodellparametern zählen:

- Variogrammodell
- Schwellenwert
- Reichweite in Richtung der Hauptachse A
- Reichweite in Richtung der Nebenachse B
- Reichweite in Richtung der vertikalen Achse C
- Richtung der Hauptachse A
- Neigung der Hauptachse A
- Neigung der Nebenachse B

Innerhalb der hier vorgestellten stochastischen Parametervariation und der Parameteroptimierung wurden die Richtung der Hauptachse und die Reichweiten sowie die Neigungen der Haupt- und Nebenachsen variiert. Das Variogrammodell und der Schwellenwert wurden in den durchgeführten Untersuchungen als konstant angenommen.

Die Abweichung zwischen den mittels Kriging ermittelten Schätzwerten für die Stützpunkte (Punkt- und Kreuzprüfung) und den tatsächlichen Werten kann durch verschiedene statistische / geostatistische Kenngrößen charakterisiert und bewertet werden. Als Zielfunktionswert $f(x)$ der Parameteroptimierung wird hier das Minimum der Abweichung zwischen der Gesamtheit der geschätzten Kennwerte an den Stützpunktstellen und den tatsächlichen Werten definiert. Im Falle der vorliegenden Untersuchungen wurden die Kenngrößen „Gewichteter quadratischer Fehler (Wweighted Squared Error, *WSE*) und „Standardfehler der Schätzung“ (Standard Error of Estimation, *SEE*) mit jeweils gleicher Wichtung zu einem Zielfunktionswert zusammengefasst.

Der Gewichtete quadratische Fehler (Wweighted Squared Error, *WSE*) berechnet sich nach

$$WSE = \frac{\sum \left[\frac{1}{\sigma_i^2} e_i^2 \right]}{\sum \frac{1}{\sigma_i^2}} \quad (3)$$

...wobei e_i die Differenz zwischen dem geschätzten und dem tatsächlichen Probenwert (Schätzfehler) und σ_i^2 die Krigingvarianz für die Schätzung der Probe i bezeichnet. Die Wichtung nach dem Reziproken der Krigingvarianz gewährleistet, dass Schätzungen mit kleinen Krigingvarianzen (kleinen Probenabständen) verstärkt in die Berechnung des WSE eingehen.

Die Standardfehler der Schätzung (Standard Error of Estimate, *SEE*) wird nach folgender Formel ermittelt:

$$SEE = \frac{1}{n-2} \sum (q_i' - (a + bq_i))^2 \quad (4)$$

...wobei q_i den wahren und q_i' den geschätzte Probenwert bezeichnet. Die Parameter a und b entsprechen den Gliedern einer linearen Regressionsfunktion.

In dem durch die Variogrammodellparameter aufgespannten Suchraum kann für jeden Punkt bzw. für jede Parameterkombination ein Zielfunktionswert berechnet werden, so dass die Verteilung der Zielfunktionswerte als Skalarfeld aufgefasst werden kann. Im Kontext der mathematischen Optimierung wird dieses Skalarfeld auch als Zielfunktionstopologie bezeichnet. Durch das jeweilige Optimierungsverfahren sollten auf der Basis möglichst weniger Vorwärtsrechnungen die Extremwertstellen dieser Topologie identifiziert werden. Die verwendeten Optimierungsalgorithmen nutzen hierzu spezielle Strategien für eine gezielte Parametervariation bzw. -suche, für deren nähere Beschreibung auf weiterführende Literatur verwiesen wird (z. B. MEIER 2008).

3.2 Auswahl der Optimierungsalgorithmen

Für die in diesem Beitrag vorgestellte Parameterrückrechnung wurde ein Partikel Schwarm Algorithmus (PSO) mit 10 Individuen verwendet (EBERHARDT & KENNEDY 1995 und KENNEDY & EBERHART 1995). Weiterhin wurde der Shuffled-Complex-Evolutionary-Algorithmus (SCE) nach DUAN et al. 1993 eingesetzt. Beide Verfahren gelten als schnell und robust hinsichtlich lokaler Extrema (Rauhigkeit) und unterscheiden sich u.a. in der Möglichkeit zur Identifikation von globalen Extrema innerhalb der Zielfunktionstopologie.

Die genannten Algorithmen wurden in eine eigene Software zur Extremwertsuche implementiert und mit der Bergbauplanungssoftware „MineSight“ gekoppelt, deren Kriging-Engine als Vorwärtsrechnung verwendet wurde.

3.3 Charakterisierung der verwendeten Datensätze

Topografische Daten

Abb. 4 bildet die untersuchte Topografie ab, deren Einzelpunkte durch luftgestütztes Laser-Scanning ermittelt wurden. Der maximale Punktabstand beträgt 8 m und wurde je nach Höhengradient bis auf 2 m verdichtet. Für die nachfolgenden Berechnungen wurden aus der Gesamtheit der topografischen Punkte 170 Stützpunkte in einem regelmäßigen 56 x 56 m Raster extrahiert.

Die statistische Auswertung der Stützpunktdaten zeigt eine Normalverteilung des untersuchten Kennwertes „Höhe ü. NN“.

Bedingt durch die Verwendung eines topografischen Ausschnittes entstehen einzelne Richtungsvariogramme ohne Schwellenwerte (Abb. 5). Vor dem Hintergrund der Schätzungen innerhalb des regelmäßigen Stützpunktrasters mit definierten Suchbereichen, begrenzt auf Reichweiten < 300 m, ist die Modellierung der schwellenwertlosen empirischen Vari-

ogramme mittels sphärischer Variogrammmodelle und somit die Anwendung der Kri-
gingverfahren zulässig.

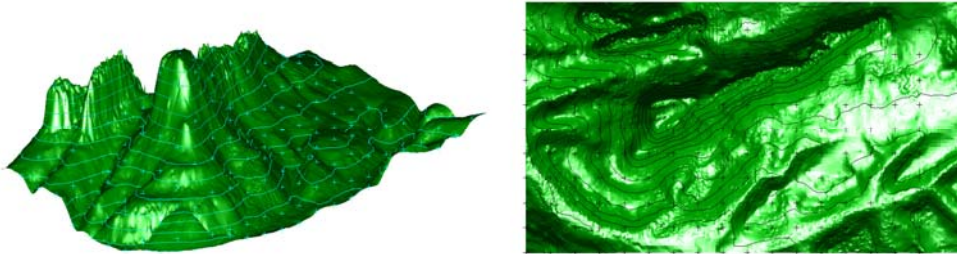


Abb. 4: Datensatz der untersuchten Topografie

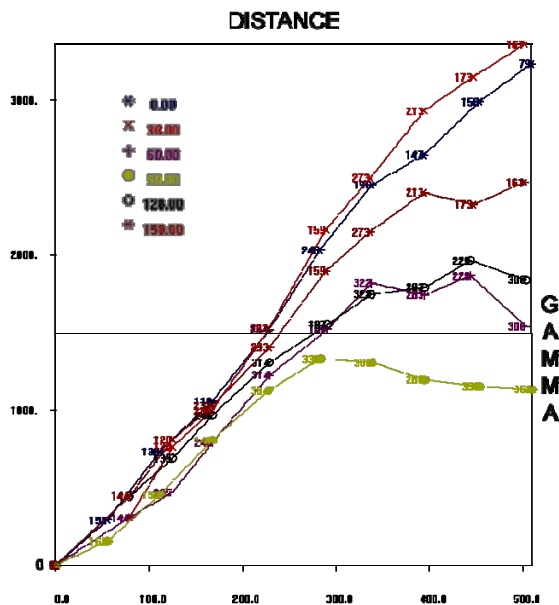


Abb. 5: Richtungsvariogramme der topografischen Daten (Eigenschaftskenngröße: Höhe
ü. NN)

Datensatz der Lagerstättenexploration

Die untersuchten Daten der Lagerstättenexploration umfassten 3023 Proben aus insgesamt 84 Bohrungen, in einem regelmäßigen 100x100 m-Raster kombiniert mit einem unregelmäßig Raster, so dass lokal kleinere Bohrlochabstände auftraten. Der untersuchte Rohstoffkennwert wies eine Tendenz zur Linksschiefheit auf, kann jedoch in guter Näherung als normalverteilt bezeichnet werden.

Die größte Reichweite und einen driftfreien Schwellenwert innerhalb des Betrachtungsgebietes konnte für das Richtungsvariogramm in Südost-Richtung (135°) mit 30° Einfallen identifiziert werden. Alle übrigen Richtungsvariogramme zeigen entweder keine ausgeprägten Anstiegsbereiche oder deutliche Driftkomponenten nach Erreichen des Schwellenwertes. Innerhalb der nachfolgenden stochastischen Parametervariationen und Parametersuche wurden in Anbetracht der Variogramm Informationen die Untersuchungen auf Probenabstände zwischen 10 m und 80 m begrenzt.

4 Ergebnisse der Untersuchungen

4.1 Stochastische Parametervariation

Abb. 6 zeigt beispielhaft die Ergebnisse der stochastischen Parametervariation für den Datensatz der topografischen Daten.

Die Scatter-Plot-Matrix der topografischen Daten stellt aus den insgesamt 1500 untersuchten Parameterkombinationen die Kombinationen mit Zielfunktionswerten $f(x) < 1,5E+04$ dar. Abb. 6 ist folglich eine gefilterte Darstellung. Vorteile einer solchen Entfernung „schlechter“ Parameterkombinationen sind eine bessere Sichtbarkeit evtl. Minimalwertbereiche als auch die Ausweisung von Bereichen mit ungünstigen Zielfunktionswerten in der Form von unbesetzten Regionen in den nicht-diagonalen Elementen der Scatterplot-Matrix.

Besonders deutlich ist die Ausprägung eines Optimalbereiches für den Variogrammmodellparameter „Richtung der Hauptachse“ (Axis Direction) im Bereich von 85° zu erkennen. Die Möglichkeit, dass sowohl die Haupt- als auch die Nebenachse den Bereich eines Optimums während der Variation der Parameter überstreichen kann, verursacht eine Periodizität der Ergebnisse im Abstand der Richtungsachsen von 90° . Dieses Phänomen ist deutlich im Scatter-Plot zu erkennen und ermöglicht eine Begrenzung des Suchintervalls für die Hauptachsrichtung auf $45^\circ \dots 135^\circ$.

Weniger deutlich - aber noch sichtbar - sind die Extremwertbereiche für die Reichweiten der Haupt- und Nebenachse ausgeprägt. Die Zielfunktionswerte für die Reichweite auf der Hauptachse streben gegen den Maximalwert des definierten Suchintervalls, wohingegen die Reichweiten der Nebenachse ein Optimum bei ca. 950 m anzeigen. Im Vergleich zu den Ergebnissen der Variogrammmodellierung liefern die Untersuchungen deutlich größere Reichweiten für die Haupt- und Nebenachsen. Dieser Effekt wird im Abschnitt zu den Ergebnissen der Anwendung der Optimierungsalgorithmen ausführlich diskutiert.

Dieselben Daten stellt die dreidimensionale Abb. 6b) dar. Die verschachtelten konvexen Punkthüllen bezeichnen Klassengrenzen der Zielfunktionswerte, zugehörig zu den entsprechenden Parameterdatensätzen. Ausgehend von der inneren Hülle betragen die Klassengrenzen der Zielfunktionswerte $f(x) < 5.5E+03$, $f(x) < 6.0E+03$, $f(x) < 7.5E+03$ und $f(x) < 1.0E+04$. Aufgrund der erläuterten Periodizität können die Schalensegmente im Bereich der Hauptachsenrichtung von $0^\circ \dots 15^\circ$ als Fortsetzung der Schalensegmente $>90^\circ$ betrachtet werden.

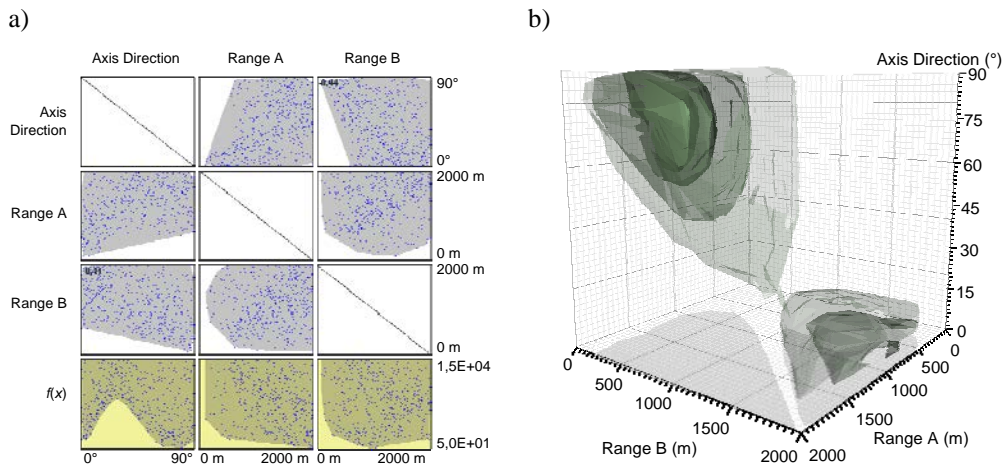


Abb. 6: Ergebnisse der stochastischen Parametervariation als Scatter-Plot-Matrix a) und dreidimensionale Darstellung der geschichteten Hüllen mit Zielfunktionswerten kleiner als $5.5E+03$, $6.0E+03$, $7.5E+03$ und $1.0E+04$

4.2 Parameteroptimierung

Topografische Daten

Tabelle 1 stellt die Ergebnisse der konventionellen Variogrammodellierung den Ergebnissen der Parameteroptimierung gegenüber. Es zeigen sich Verbesserungen der Zielfunktionswerte um eine Zehnerpotenz bei Anwendung der Optimierungsalgorithmen. Die Ähnlichkeit zwischen den identifizierten Parameterkombinationen belegt, dass sowohl der Partikel-Schwarm-Optimierer (PSO) als auch der Shuffled-Complex-Evolutionary-Optimierer (SCE) ein und dasselbe Optima identifizieren konnten. Beide Optimierer beendeten die Variation der Parameter selbständig nach ca. 500 Vorwärtsrechnungen, da weitere Modifikationen der Parameter keine Verbesserungen der Zielfunktionswerte erbrachten. Für den Datensatz der topografischen Daten können beide Optimierungsalgorithmen als geeignet betrachtet werden.

Tabelle 1: Vergleich der Optimierungsergebnisse für den Datensatz der topografischen Daten

Optimierungsalgorithmus	Parameterkombinationen [-]	Richtung d. Hauptachse [°]	Schwellenwert [-]	Reichweite Hauptachse [m]	Reichweite Nebenachse [m]	Zielfunktionswert f(x)
Konventionelle Modellierung	-	90.0	1300	280	210	$4.21E+04$
Partikel-Schwarm-Optimierer (PSO)	500	74.6	1300	2000	930	$4.87E+03$
Shuffled-Complex-Evolutionary (SCE)	495	74.4	1300	1999	953	$4.88E+03$

Die ermittelten Optimierungsergebnisse liegen im Bereich der konventionell ermittelten Parameter und lassen sich an den Strukturformen der Topografie nachvollziehen. Die Längserstreckung der abgebildeten Bergformation verläuft in nordöstliche Richtung und bezeichnet die Richtung der geringsten Parameterveränderlichkeit.

Zu beachten ist ein Effekt, der bereits bei der stochastischen Parametervariation beobachtet werden konnte: Die Reichweiten, ermittelt durch die konventionelle Variogrammmodellierung, sind deutlich kleiner als die vom Optimierungsalgorithmus ermittelten Reichweiten. Dieser Effekt ist ein Ergebnis der Besonderheiten der Punkt- und Kreuzprüfung und der Konfiguration der Suchbereiche. Steigen z. B. die realen Semivarianzen im Bereich kleiner Suchradien langsamer an, als es das verwendete sphärische Variogrammmodell abbildet, werden bei konstanten Schwellenwerten Parameterkombinationen vorteilhaft, die durch große Reichweiten den Anstieg in dem betreffenden Bereich abflachen. Dies trifft augenscheinlich auf die Reichweite der Hauptachse zu.

Schlussfolgernd ist festzuhalten, dass die Anwendung mathematischer Optimierungsalgorithmen nur Ergebnisse liefern kann, die ausschließlich für den definierten Suchbereich Gültigkeit besitzen und keine Aussagen über die Schwellenwerte bzw. Reichweiten für die maximal möglichen Schrittweiten der Untersuchungen bzw. die großräumige Kennwertvariabilität zulassen. Dementsprechend beschränkt sich die Identifikation von Anisotropien ebenfalls auf den vorgegebenen Suchbereich. Dies ist hinsichtlich der Vorbereitung der Schätzung von Vorratsmengen vorteilhaft, da in diesem Fall die Suchradien der Punkt- und Kreuzprüfung zum Einsatz kommen. Für Aussagen zu den großräumig auftretenden Kennwertvariabilitäten im Sinne einer geologischen Interpretation sind die Suchbereiche jedoch entsprechend anzupassen und die Parameteroptimierung zu wiederholen.

Datensatz der Lagerstättenexploration

Für die Optimierung der Variogrammmodellparameter des Datensatzes der Lagerstättenexploration kamen ebenfalls der Partikel-Schwarm-Optimierer (PSO) und der Shuffled-Complex-Evolutionary-Optimierer (SCE) zum Einsatz.

Der PSO erbrachte unter denselben Randbedingungen für drei unabhängige Durchläufe drei unterschiedliche Optimierungsergebnisse. Dies deutet auf eine raue bzw. mit mehreren lokalen Minima besetzte Zielfunktionstopologie hin. In diesem Fall „verfängt“ sich der Schwarm der Individuen des PSO in einem lokalen Minimum, ohne dies wieder verlassen zu können.

Abb. 7 zeigt das Ergebnis des dritten Durchlaufs und bildet die Annäherung an das jeweilige lokale Minimum in Form der trichterförmigen Punktformationen auf der letzten Zeile der Scatter-Plot-Matrix ab. Der PSO ist demnach nur bedingt geeignet, mehrere lokale Minima der Zielfunktionswerte zu identifizieren und ist für die Untersuchung von Datensätzen mit unbekannter Rauigkeit der Zielfunktionstopologie als kritisch einzustufen.

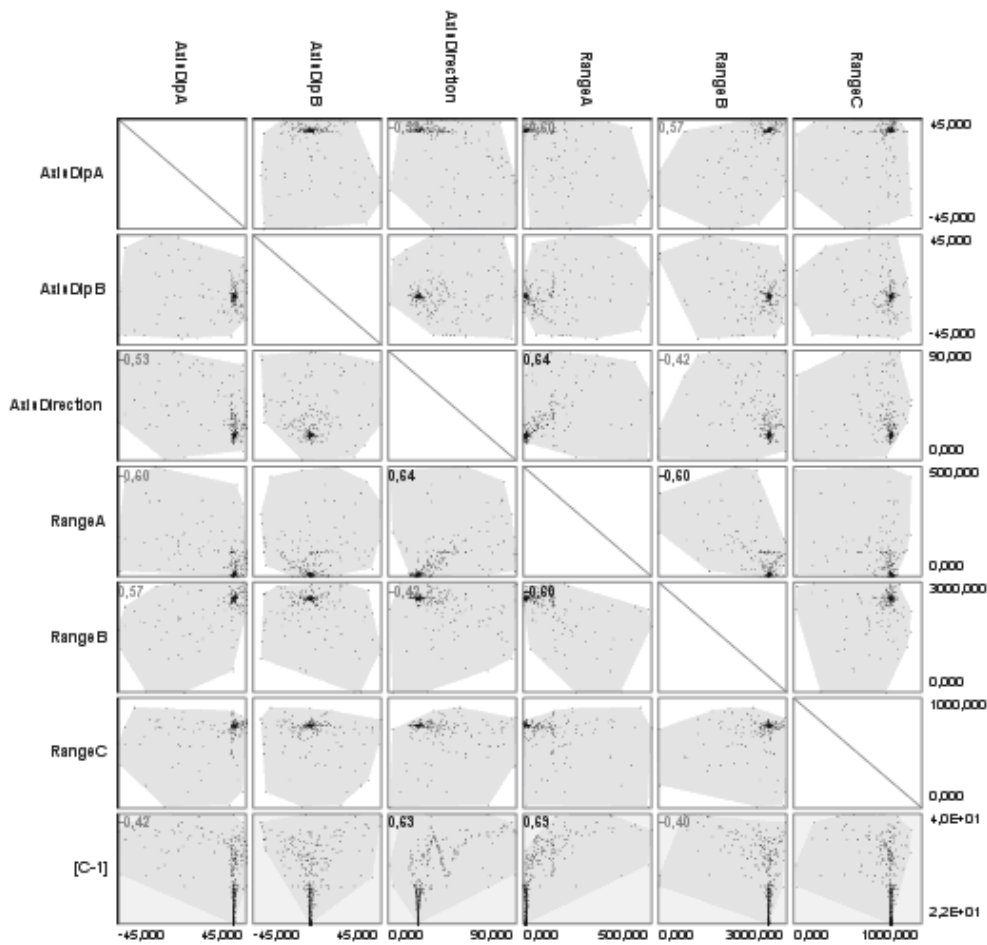


Abb. 7: Scatter-Plot-Matrix der Parameterkombinationen und deren Zielfunktionswerte für die Anwendung des Partikel-Schwarm-Optimierers (3. Durchlauf) auf den Datensatz der Lagerstättenexploration

Eine Scatter-Plot-Matrix mit den 759 besten Zielfunktionswerten als Ergebnis der Anwendung des Shuffled-Complex-Evolutionary-Optimierers ist in Abb. 8 wiedergegeben. Im Gegensatz zu dem PSO ist der SCE-Optimierer in der Lage, mehrere lokale Minima der Zielfunktionsstopologie simultan zu analysieren. Die Wahrscheinlichkeit für die Konvergenz im globalen Optimum bzw. einem sehr günstigen Extremwertbereich ist entsprechend höher.

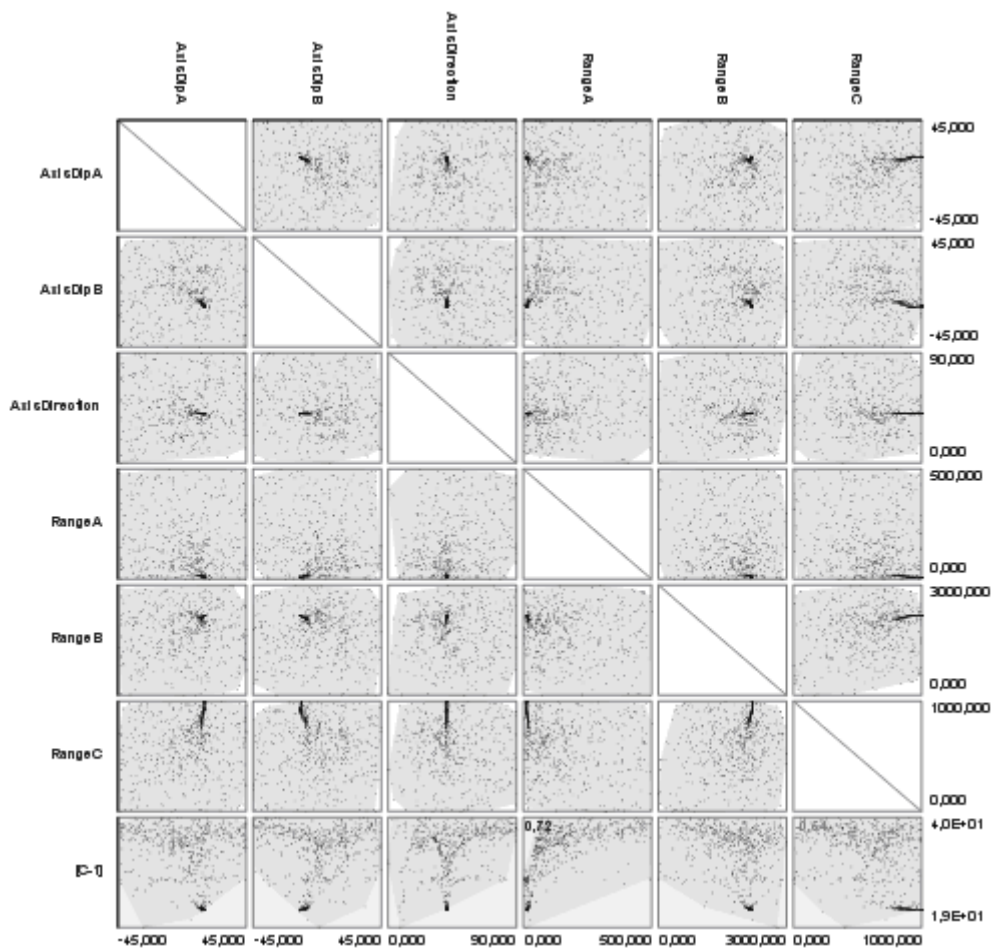


Abb. 8: Scatter-Plot-Matrix der Parameterkombinationen und deren Zielfunktionswerte für die Anwendung des SCE-Optimierers

Die Darstellung der Zielfunktionswerte bei veränderlichen Hauptachsrichtungen stimmt im Wesentlichen mit den Ergebnissen der Variographie und der stochastischen Parametervariation überein. Im Bereich der Hauptachsrichtung von ca. 45° zeigt die Scatter-Plot-Matrix eine deutliche „Trichterfigur“ der Zielfunktionswerte (Tabelle 2, Zeile SCE 01a). Der beste Parametersatz liegt jedoch bei ca. 10° (Tabelle 2, Zeile SCE 01). Die Ausprägung der Trichterstruktur bei 45° weist auf einen großflächig wirksamen Extremalbereich der Zielfunktionswerte hin, wohingegen der Bereich um 10° als sehr begrenztes Optimum gedeutet werden kann, was die Schlussfolgerung erlaubt, dass eine geringe Variationen der besten Parameterkombination zu vergleichsweise schlechten Zielfunktionswerten führt.

Die Trichterstruktur im Bereich 45° zeigt hingegen eine größere Stabilität hinsichtlich der Variation der Parameterkombination und ist damit besser geeignet, die Charakteristik der Richtungsabhängigkeit der Kennwertverteilung zu beschreiben.

Die Scatter-Plot-Matrix belegt, dass der Trichterstruktur bzw. dem Extremwertbereich Reichweiten der Hauptachse zugewiesen werden können, die deutlich gegen sehr kleine Probenabstände streben, wohingegen die Reichweiten der Nebenachse eine Anhäufung bei ca. 2500 m zeigen. Weiterhin sind Verdichtungen der Punkte- bzw. Parameterkombinationen im Bereich von Neigungen der Hauptachse bei ca. $+20^\circ$ und der Nebenachse bei ca. -10° ersichtlich. Der für die Vorratsschätzung ausgewählte Parametersatz entspricht demnach nicht einem Zufallswert, sondern ist durch eine Anzahl von ähnlichen Parameterkombinationen in direkter Nachbarschaft gestützt.

Tabelle 2: Gegenüberstellung der Optimierungsergebnisse für den Datensatz der Lagerstättenexploration

Optimierungsalgorithmus	Parameter-variationen	Richtung der Hauptachse (Direction Major Axis A)	Neigung der Hauptachse (Dip A)	Neigung der Nebenachse (Dip B)	Reichweite der Hauptachse (Range A)	Reichweite der Nebenachse (Range B)	Reichweite der vertikalen Achse (Range C)	Mittlere Kriging Varianz (AKV)	Gewichteter quadrierter Fehler (WSE)	Standard Fehler der Schätzung (SEE)	Zielfunktionswert (Deviation)
	[]	[]	[]	[]	[m]	[m]	[m]	[]	[]	[]	[]
Interpretation	-	45	0	-30	10	150	30	9.75	3.47	2.03	28.23
PSO 1	470	60.8	-41.5	22	1050.1	7.7	971.5	8.41	3	2.02	19.84
PSO 2	500	55.7	34.3	-35.8	366.6	1915.2	5.4	8.62	2.12	2.03	18.99
PSO 3	500	20.7	36	-4.9	8.2	2571.2	757.5	9.53	2.87	2.03	21.87
SCE 1	914	8.3	-27.27	0.8	12.4	2774.5	399.9	7.46	2.26	2.03	18.75
SCE 1a	s. oben	40.6	15.5	-11.6	12.2	218	981	8.98	2.59	2.02	22.10

5 Schlussfolgerung

Die Ergebnisse des Einsatzes mathematischer Optimierungsalgorithmen in Verbindung mit der Punkt- und Kreuzprüfung konnten die Eignung der Methode der Parameteroptimierung zur Identifikation von Strukturen und Richtungsabhängigkeiten in natürlichen Kennwertverteilungen aufzeigen. In Kombination mit einer vorbereitenden statistischen Analyse und der konventionellen Variogrammrechnung sowie –modellierung wurden vergleichsweise günstige Parameter ermittelt, die stets eine signifikant bessere Anpassung der Variogrammmodelle an die verfügbaren Stützpunktdaten erzielten, als es die konventionelle Variogrammmodellierung ermöglichte. Für den Datensatz der topografischen Daten verringerte sich der Zielfunktionswert, als zusammenfassende Kenngröße für die Abweichung zwischen dem errechneten und dem realen Wert an den Stützpunktstellen um eine Zehnerpotenz. Im Fall der exemplarisch verwendeten Lagerstättendaten wurden durch den Einsatz der Optimierungsalgorithmen um bis zu 34 % verringerte Zielfunktionswerte, gegenüber dem Ergebnis der konventionellen Variogrammmodellierung erzielt.

Die geringen Rechenzeiten (1 h Rechenzeit im PC-Cluster entspricht ca. 1000 berechneten Parameterkombinationen) gewährleisteten eine effiziente Identifikation räumlicher Kennwertverteilungen. Damit ist die vorgestellte Arbeitsmethode als ein wirkungsvolles und performantes Werkzeug der Datenanalyse einzustufen.

Die Eignung der Optimierungsalgorithmen hängt u. a. von der Rauigkeit der Zielfunktionstopologie ab, die nur in Ausnahmefällen abschätzbar ist. Im Fall der topografischen Daten identifizierten beide Optimierungsverfahren dasselbe Minimum. Im Fall der Explorationsdaten mit nachweislich größerer Rauigkeit der Zielfunktionstopologie ermittelte der Partikel-Schwarm-Optimierer mit jeder Berechnung ein unterschiedliches Optimierungsergebnis, weshalb dieses Optimierungsverfahren als schlechter geeignet eingeschätzt werden muss. Der Shuffled-Complex-Evolutionary-Algorithmus zeigt sich hier deutlich robuster.

Ein weiterer Vorteil der Anwendung von Optimierungsverfahren besteht in der Aufbereitung der Optimierungsergebnisse. Im Gegensatz zur konventionellen Variogrammmodellierung stehen durch statistische Hilfsmittel wie z. B. die Scatter-Plot-Matrix Werkzeuge zur Verfügung, die den Vergleich einer Vielzahl unterschiedlicher Optimierungsergebnisse ermöglichen, Tendenzen der Veränderlichkeit des Zielfunktionswertes sichtbar machen, Rückschlüsse auf Parametersensitivitäten erlauben und somit die Bewertung des Optimierungsergebnisses vereinfachen.

Weiterhin wurde herausgearbeitet, dass die vorgestellten Optimierungsergebnisse ausschließlich für die angewandten Suchbereiche gültig sind, was die weitere Anwendung innerhalb der Schätzung von Kennwertverteilungen wie z. B. Vorratsberechnungen einschließt. Für die Interpretationen von Struktureigenschaften jenseits der Suchbereichsgrenzen sind die Optimierungsberechnungen mit entsprechend angepassten Grenzen zu wiederholen.

Literatur

- BIALY, H.; OLBRICH, M. (1975): Optimierung – eine Einführung mit Anwendungsbeispielen. VEB Fachbuchverlag Leipzig, 1. Auflage.
- BOYD, S.; VANDENBERGHE, L. (2006): Convex Optimization. Cambridge University Press.
- BITTERLICH, S.; KNABNER, P. (2002): An Efficient Method for Solving an Inverse Problem for the Richards Equation. Institute for Applied Mathematics, Friedrich-Alexander Universität, Erlangen-Nürnberg.
- CARRERA, J.; ALCOLEA, A.; MEDINA, A.; HIDALGO, J.; SLOOTEN, L. J. (2005): Inverse problem in hydrogeology. Hydrogeological Journal 13, Springer-Verlag, S. 206 – 222.
- CUI, L.; SHENG, D. (2006): Genetic algorithms in probabilistic finite element analysis of geotechnical problems. Computers and Geotechnics, Vol. 32, 555-563.
- DAHLE, P.; KOLBJORNSEN, O.; ABRAHAMSEN, P. (2004): When can shape and scale parameters of a 3D variogram be estimated? Geostatistics Banff 2004. Quantitative Geology and Geostatistics, Vol. 14, Springer Netherlands, pp. 949-958
- DUAN, Q. Y.; GUPTA, V. K.; SOROOSHIAN, S. (1993): Shuffled Complex Evolution Approach for Effective and Efficient Global Minimization. Journal of Optimization Theory and Applications, Vol. 76, No. 3. S. 501 - 521.

-
- EBERHARDT, R. C.; KENNEDY, J. (1995): A new optimizer using particle swarm theory. Proceedings of the Sixth International Symposium on Micro Machine and Human Science, Nagoya, Japan, IEEE Service Center, Piscataway, NJ, 39 – 43.
- FINSTERLE, S. (1998): Multiphase Inverse Modelling: An Overview. U.S. Department of Energy's Geothermal Program Review XVI, Berkeley, California.
- FINSTERLE, S. (2000): Demonstration of Optimization Techniques for Groundwater Plume Remediation. Earth Sciences Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, University of California, Berkeley.
- FLEISCHER, J.; BROOS, A. (2004): Parameteroptimierung bei Werkzeugmaschinen – Anwendungsmöglichkeiten und Potentiale. Weimarer Optimierungs- und Stochastiktage 1.0, Weimar.
- FLORES SANTIAGO, O.; BAUSINGER, R. (1998): Automatische Schweißpunkt-Optimierung an Karosserien. XXV. FEM – Kongress, Baden-Baden.
- HADAMARD, J. S. (1902): Sur les problèmes aux dérivées partielles et leur signification physique. Princeton University Bulletin, S. 49 - 52.
- JEONG, S.-J. (2003): Ein Beitrag zur Erzeugung nichtlinearer Entwurfsseegänge im numerischen Wellenkanal. Dissertationsschrift, Fakultät für Verkehrs- und Maschinensysteme, TU Berlin.
- KENNEDY, J.; EBERHART, R. (1995): Particle swarm optimization. Proceedings of the IEEE International Conference on Neural Networks, Piscataway, NJ:IEEE Press, S. 1942 – 1948.
- LEE, Y. D.; SOUMENDRA, N. L. (2002), Least squares variogram fitting by spatial subsampling. Journal of Royal Statistical Society, 64, Part 4, pp. 837-854
- LOUIS, A. K. (1989): Inverse und schlecht gestellte Probleme. Teubner-Verlag, Stuttgart.
- MANLY, B. F. J. (1994): Multivariate statistical methods – a primer. 3rd Edition, Chapman & Hall / CRC.
- MATOUŠ, K.; LEPŠ, M.; ZEMAN, J.; ŠEJNOHA, M. (2000): Applying genetic algorithms to selected topics commonly encountered in engineering practice. Computer methods in applied mechanics and engineering 190, Elsevier, S. 1629 - 1650.
- MEIER, J.; SCHÄDLER, W.; BORGATTI, L.; CORSINI, A.; SCHANZ, T. (2008): Inverse Parameter Identification Technique using PSO Algorithm Applied to Geotechnical Modeling. . Journal of Artificial Evolution and Applications, <http://www.hindawi.com>.
- Meier, J. (2008): Parameterbestimmung mittels inverser Verfahren für geotechnische Problemstellungen. Dissertation, Bauhaus-Universität Weimar.
- SCHANZ, T.; ZIMMERER, M. M.; DATCHEVA, M.; MEIER, J. (2006): Identification of Constitutive Parameters for Numerical Models via Inverse Approach, Felsbau, VGE, Vol. 24, No. 2, pp. 11 - 21.
- SCHANZ, T.; ZIMMERER, M.; DATCHEVA, M.; MEIER, J. (2006): Identification of constitutive parameters for numerical models via inverse approach. Felsbau- Rock and Soil Engineering, Volume 25, No. 2, 11-21.

- SCHLEGEL, R.; WILL, J. (2006): Parameteridentifikation und Sensitivitätsanalyse zur Ermittlung relevanter Bauwerksbereiche für die Materialprüfung bei historischen Mauerwerkstrukturen. DYNARDO GmbH.
- SPALL, J. C. (2003): Introduction to stochastic search and optimization: estimation, simulation and control. Wiley-Interscience series in discrete mathematics.