高性能地震求解器的非侵入式微分

Xi Wang[1], **Zhanwen Li**[1], 和 **Xin Liu**[1*]

[1]香港大学地球与行星科学系，香港薄扶林道

arXiv:2611.30524v1 [physics.geo-ph] 23 Nov 2026

*通讯作者，liuxine@hku.hk。

摘要

可微地震层析成像框架无需手工推导伴随源即可计算模型梯度。有些框架通过波传播过程进行微分，在大规模计算中可能耗费大量时间和内存。另一些框架则采用原生伴随算子并自动构造伴随源，其效率主要取决于正演与伴随求解。成熟的地震求解器能够高效且可靠地模拟波传播，但仍需要可复用的工作流程，将其与用户定义的失配函数连接起来。本文提出了一种非侵入式工作流程和一项智能体技能，用于将现有地震求解器适配到可微反演中。我们对预处理和失配函数应用自动微分（AD），并在合成数据处停止反向传播。求解器在接收器处注入该数据导数以构成伴随源，然后利用原生正演与伴随模拟计算模型梯度。为评估精度和计算代价，我们在使用相同正演求解器的条件下，将混合实现（HybridADFWI）与 ADFWI 中的全自动微分进行了比较。在六种设置下，梯度的相对 L_2 范数误差均在 1.4×10^{-6} 以内。单次迭代中，HybridADFWI 的速度是 ADFWI 的 2.4–4.6 倍，峰值预留 GPU 内存则少用 5–22%。在该 Skill 的指导下，编码智能体会补充缺失的伴随例程、验证梯度，并针对用户选择的模型参数运行恢复测试。我们将该 Skill 应用于两个独立的求解器，构建了 DiffSPECFEM2D 和 DiffAxiSEM3D。在 P波速度测试中，DiffSPECFEM2D 恢复了 Marmousi-II 的主要倾斜层，而 DiffAxiSEM3D 恢复了 SEG/EAGE盐体的整体形状。两个框架都支持用户定义的失配函数，同时保留原生内核和并行执行能力。

GitHub： 智能体技能、 DiffSPECFEM2D和 DiffAxiSEM3D。

1 引言

基于梯度的地震反演通过最小化比较合成数据与观测数据的失配函数来估计模型参数。在全波形反演（FWI）中，平方 L_2 波形失配比较对应时刻的振幅。当合成波形与观测波形之间的相位差较大时，最小化这一失配可能导致周跳。这一局限促使研究者探索其他波形比较方法（Bozdağ等，2011年；Warner和Guasch，2016年；Sun和Alkhalifah，2022年），包括走时测量（Tromp等人，2005年；X. Liu，2020年）、最优传输（Métivier等人，2016年）和软动态时间规整（soft-DTW）（Cuturi和Blondel，2017年；Blondel 等，2021年；F. Liu等，2025年）。

伴随状态法利用取决于所选失配函数的伴随源，高效地计算模型梯度（Plessix, 2006年）。传统实现根据手动推导的失配函数相对于合成数据的导数表达式来构造该伴随源。推导过程必须考虑对合成波形进行的任何预处理，例如滤波、加窗或转换到其他域。因此，更改失配函数或预处理方式都可能需要重新进行推导、实现和数值检查。

自动微分（AD）使研究人员能够直接从可微代码中获取失配导数（Sambridge et al., 2007; Zhu et al., 2021）。在 ADFWI 等全自动微分框架中，用户在代码中指定失配函数，自动微分会对从模型参数到波传播再到失配的整个计算过程求导（F. Liu et al., 2025）。然而，对于长时间域模拟，记录和遍历计算图会显著增加运行时间和内存占用。另一种成熟的方法是利用自动微分构建伴随源，再通过原生伴随模拟计算模型梯度（Chen & Saygin, 2021; Richardson, 2026; Louboutin et al., 2022, 2023）。采用原生伴随算子时，每次计算梯度都需要进行正演和伴随波传播，因此反演速度很大程度上取决于底层求解器。

地震学领域积累了多种成熟且高性能的正演波传播求解器。这些代码将经过充分测试的数值方法与历经多年优化的并行实现相结合。例如，SPECFEM 系列谱元求解器（Komatitsch & Vilotte, 1998）和 AxiSEM3D（Leng et al., 2019; Szenicer et al., 2020）。其在实测数据中的应用涵盖南加州地壳成像（Tape et al., 2009），以及解析夏威夷下方核幔边界附近的结构（Li et al., 2022）。重复利用这些求解器的数值内核和并行实现，可以省去从头构建同等求解器所需的大量验证与优化工作。

然而，原生求解器缺少用于用户定义的失配函数的自动微分接口。即使已有伴随实现，使用新的失配函数仍需要用户手动推导并实现其伴随源。如果缺少伴随例程，则必须根据正演代码中的离散运算来实现。随后还必须验证所得梯度。因此，需要一种可复用的工作流，以便在独立开发的地震求解器之间创建并验证这些扩展。

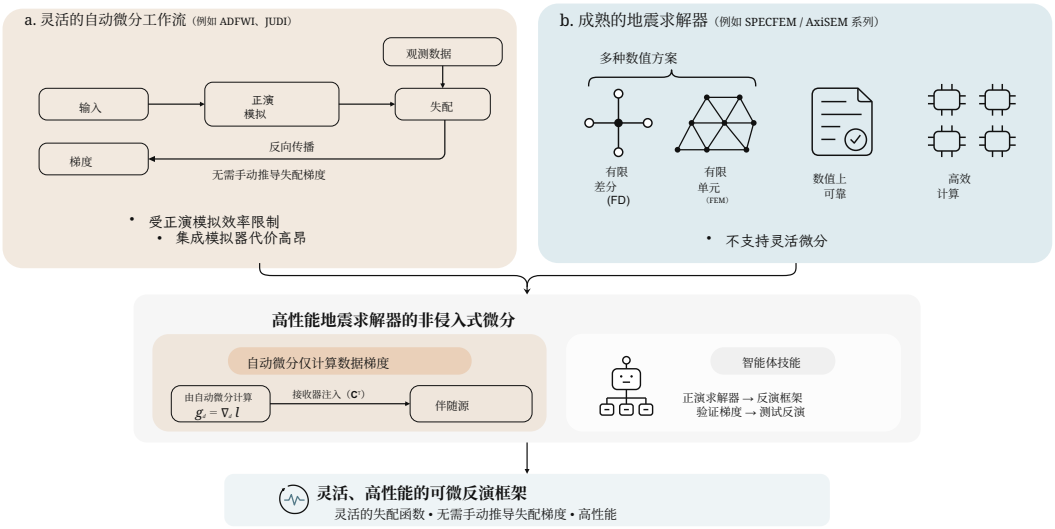


图1. 非侵入式微分将自动微分工作流 (a) 与用于反演的高性能地震求解器 (b) 连接起来。自动微分计算失配函数相对于合成数据 $\boldsymbol{g}_d = \nabla_{\boldsymbol{d}} \ell$ 的导数。求解器对接收器采样的转置 $\boldsymbol{C}^{\mathsf{T}}$ 进行运算，以构造伴随源。

我们提出了一种非侵入式工作流，用于改造现有地震求解器以支持可微反演，同时保留其原生数值内核和并行执行能力（图1）。第2节说明了自动微分为何可以在合成数据处停止。原生求解器将所得导数注入接收器处，以形成伴随源，并利用其正演波场和伴随波场计算模型梯度。第3节介绍了我们的智能体技能如何指导编码智能体复用或新增求解器例程，并验证模型梯度。第4.1节将我们的混合实现 HybridADFWI 与 ADFWI 中的全自动微分进行比较，以评估梯度精度、模型恢复效果、运行时间和 GPU 内存使用情况。第4.2节测试了使用相同 Skill 构建的 DiffSPECFEM2D 和 DiffAxiSEM3D 是否能够在二维和三维中恢复已知结构。第5节讨论了该工作流如何扩展到其他求解器和反问题。

2 地震求解器的非侵入式微分

我们使用自动微分计算失配对合成数据的导数，并使用原生求解器计算模型梯度（图2）。这种改造是非侵入式的，因为它保留了求解器的数值内核和并行执行能力，同时允许添加接口和伴随例程。

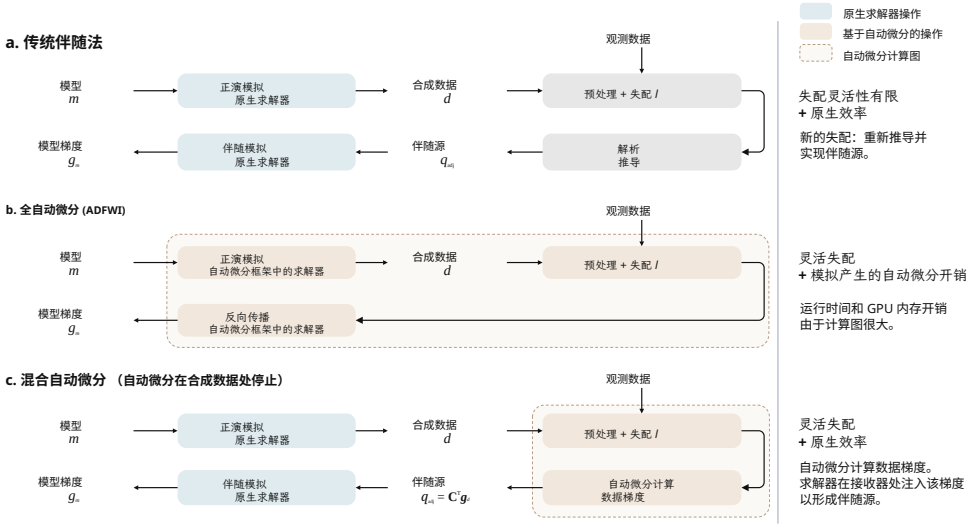


图2. 模型梯度 $\boldsymbol{g}_m = \nabla_{\boldsymbol{m}}\ell$ 可通过 (a) 传统伴随法计算t，(b) ADFWI 中的全自动微分（F. Liu 等，2025），或 (c) 通过失配进行自动微分，同时采用原生波传播。在 (c) 中，自动微分提供数据梯度 $\boldsymbol{g}_d = \nabla_{\boldsymbol{d}}\ell$，求解器将其注入接收器处以形成伴随源 $\boldsymbol{q}_{\mathrm{adj}} = \boldsymbol{C}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{g}_d$。

2.1 伴随源与模型梯度

数据失配通过在接收器处采样的波场依赖于模型。对于模型参数 $\boldsymbol{m}$ 和震源 $\boldsymbol{f}$，正向波场 $\boldsymbol{u}$ 满足

$$A(\boldsymbol{m})\boldsymbol{u} = \boldsymbol{f}, \tag{1}$$

其中 $A(\boldsymbol{m})$ 是离散波动算子。接收矩阵 $\boldsymbol{C}$ 对波场进行采样，以得到合成数据

$$\boldsymbol{d} = \boldsymbol{C}\boldsymbol{u}. \tag{2}$$

数据失配 ℓ 将 $\boldsymbol{d}$ 与观测数据 $\boldsymbol{d}_{\mathrm{obs}}$ 进行比较，并包含任何波形预处理。加入可选的模型正则化项 $r(\boldsymbol{m})$ 后，得到

$$J(\boldsymbol{m}) = \ell(\boldsymbol{d};\boldsymbol{d}_{\mathrm{obs}}) + r(\boldsymbol{m}). \tag{3}$$

我们要求数据失配的模型梯度，$\boldsymbol{g}_m = \nabla_{\boldsymbol{m}}\ell$。固定震源 $\boldsymbol{f}$ 和接收矩阵 $\boldsymbol{C}$ 后，根据链式法则，$\boldsymbol{g}_m$ 的第 j 个分量为

$$g_{m,j} = \boldsymbol{g}_d^{\mathsf{T}}\boldsymbol{C}\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial m_j}. \tag{4}$$

这里， $\boldsymbol{g}_d = \nabla_{\boldsymbol{d}}\ell$ 的每个合成数据样本对应一个分量，而 $\partial \boldsymbol{u}/\partial m_j$ 描述波场随模型参数 m_j的变化。对方程 (1) 求导可得

$$A(\boldsymbol{m})\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial m_j} = -\frac{\partial A(\boldsymbol{m})}{\partial m_j}\boldsymbol{u}. \tag{5}$$

伴随状态法避免了针对每个模型参数分别求解波场灵敏度（Plessix，2006）。我们选择一个伴随波场 $\boldsymbol{\lambda}$，使得 $\boldsymbol{\lambda}^{\mathsf{T}} A(\boldsymbol{m}) = \boldsymbol{g}_d^{\mathsf{T}}\boldsymbol{C}$。对该关系进行转置可得到伴随方程

$$A(\boldsymbol{m})^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\lambda} = \boldsymbol{C}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{g}_d = \boldsymbol{q}_{\mathrm{adj}}. \tag{6}$$

转置算子 $\boldsymbol{C}^{\mathsf{T}}$ 将数据导数注入接收器位置，从而形成伴随源 $\boldsymbol{q}_{\mathrm{adj}}$。

现在可以根据正向波场和伴随波场计算模型梯度。将伴随关系代入链式法则，并使用公式（5），可得

$$g_{m,j} = \boldsymbol{\lambda}^{\mathsf{T}} A(\boldsymbol{m})\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial m_j} = -\boldsymbol{\lambda}^{\mathsf{T}}\frac{\partial A(\boldsymbol{m})}{\partial m_j}\boldsymbol{u}. \tag{7}$$

对于固定模型和给定失配，只有算子导数 $\partial A(\boldsymbol{m})/\partial m_j$ 会随公式（7）中的 j 变化。因此，对于每个炮次，一次正向模拟和一次伴随模拟即可为所有选定的模型参数提供波场，例如 P波速度、S波速度或密度。若包含正则化，则完整梯度为 $\nabla_{\boldsymbol{m}} J(\boldsymbol{m}) = \boldsymbol{g}_m + \nabla_{\boldsymbol{m}} r(\boldsymbol{m})$。

2.2 基于自动微分的伴随源与反演流程

在固定模型下，数据失配的选择仅通过数据导数 $\boldsymbol{g}_d$ （方程 (6)）影响伴随方程。因此，一旦自动微分计算出 $\boldsymbol{g}_d$，反向传播便可在合成数据 $\boldsymbol{d}$ 处停止。原生伴随算子和灵敏度计算程序会考虑 $\boldsymbol{d}$ 对模型的依赖关系。传统伴随方法使用解析推导的震源（图2a）。在 ADFWI 中，全自动微分会继续穿过波传播，直至模型参数（图2b）。

我们的工作流程将自动微分与接收器处原生的正演与伴随模拟相连接（图2c）。正演求解器计算 $\boldsymbol{u}$ 并返回合成数据 $\boldsymbol{d}$。PyTorch 将 $\boldsymbol{d}$ 视为可微计算的输入，并通过失配和波形预处理进行反向传播，以获得 $\boldsymbol{g}_d$。随后，求解器应用 $\boldsymbol{C}^{\mathsf{T}}$ 以形成 $\boldsymbol{q}_{\mathrm{adj}}$，并求解方程（6），得到伴随波场 $\boldsymbol{\lambda}$。其灵敏度计算程序使用 $\boldsymbol{\lambda}$ 和已保存的

或重建的正向波场来计算方程（7）。在时域求解器中，此计算会对每个模型参数的时间贡献进行求和。

我们在同一模型下计算所有炮次的梯度，并取其平均值。随后，我们加上正则化梯度（如有），并更新一次模型。算法 1 展示了一次完整的反演更新。

算法 1. 全炮次反演更新

```
g_sum  =torch.zeros_like(m}
for shot in all  _炮次:
    with torch.no_grad():
        d，历史记录  =原生_正演(m, shot)
    d = torch.as_tensor(d).detach().requires_grad_(真)
    loss = 数据_失配(d  ，观测[shot])        # one shot, mean over traces
    g_d, = torch.autograd.grad(loss, d)
    q_伴随 = 接收器_transpose(shot, g_d)
    g_求和 += 原生_伴随_梯度(m, shot, history, q_伴随)
g_m  = g_求和 / len(all_炮次)
g_总计 = g_m +正则化_梯度(m)                  # zero term if unused
更新_模型_一次(m, g_总计)
```

3 使用 AgentSkill 改造地震求解器

智能体技能会引导编码智能体，为现有正演求解器构建并测试可微反演接口（图3）。添加该接口时，智能体会保留求解器的原生数值核和并行执行能力。随后，它会验证所选参数的梯度，并测试模型恢复效果。

3.1 构建并验证梯度接口

为了计算所选模型参数的梯度，智能体会判断哪些伴随程序和灵敏度计算程序可以复用，哪些需要自行实现。它会检查正演代码如何将这些参数映射为材料系数、如何推进波场，以及如何在接收器处采样。如果某个伴随程序实现了相应离散正演运算的转置，智能体就会复用该程序。如果某个灵敏度核能直接给出所选参数的梯度，或可转换为该梯度，智能体就会复用该灵敏度核。

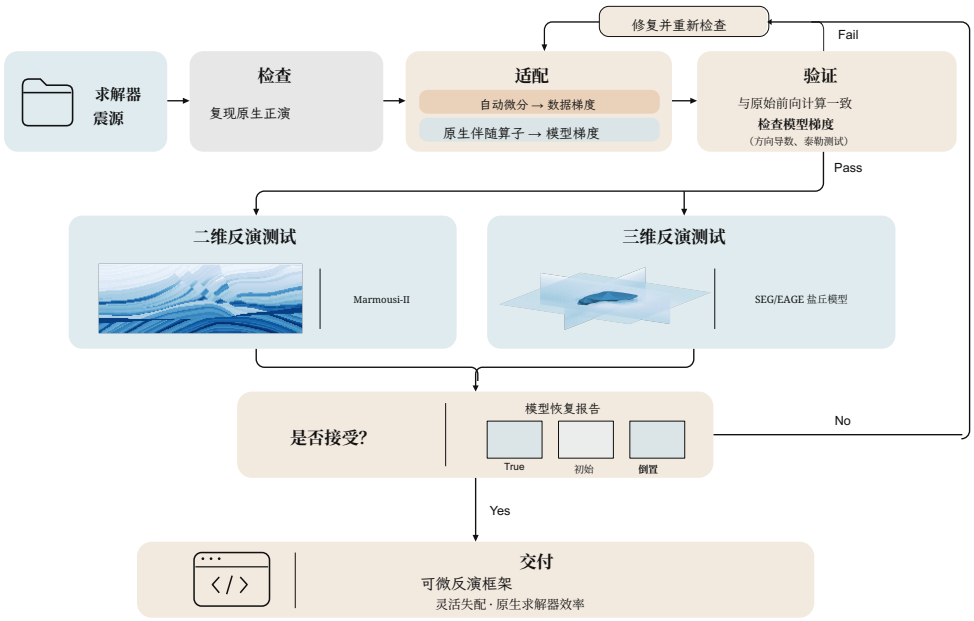


图3。 用于将正演求解器适配至可微反演的智能体技能工作流。在适配步骤中，求解器将在接收器处注入由自动微分计算得到的数据导数，以形成伴随源。默认恢复测试针对 V_{P} Marmousi-II（二维）（Martin 等，2006）和 SEG/EAGE 盐丘模型（三维）（Aminzadeh 等，1997）。

智能体会根据正演代码实现缺失的伴随计算或灵敏度计算，并确定需要保存或重建的波场。

第4.2节中测试的两个求解器说明了现有原生例程如何决定智能体必须添加哪些内容。在 SPECFEM2D 中，智能体复用了原生伴随算子。在本次测试中，V_{S} 和密度保持不变，因此智能体将体积模量核转换为所需的V_{P} 梯度。此处使用的 AxiSEM3D 代码需要一个伴随时间步，智能体通过复用正向 Newmark格式中的刚度算子实现了该功能。在这两种情况下，求解器都会将自动微分计算出的数据导数注入接收器，以形成伴随源。该接口将得到的模型梯度返回给优化器。

验证从接收器开始：求解器在此返回合成数据并注入伴随源。智能体首先在设置相同的条件下，将适配后求解器生成的合成道集与原始正演示例保存的数据进行比较。它对道集施加扰动，以检查自动微分导数能否预测失配的变化：先检查平方L_2 失配，再检查经过预处理的目标失配。内积测试用于确认，在接收器处的震源注入是波场采样的转置。

随后，智能体检验完整的模型梯度能否预测模型扰动引起的失配变化。对于每个待反演的参数族，它沿选定方向施加大小相等、方向相反的扰动，以获得失配的中心有限差分。然后将该方向导数估计值与梯度在同一方向上的投影进行比较。泰勒检验会比较失配的实际变化与梯度沿同一方向给出的线性预测。若梯度正确，在一定的步长范围内，扰动减半应使预测误差约缩小到原来的四分之一。首次更新前，智能体会在初始模型处重复进行方向导数检查，并使用与反演相同的炮次平均值。

3.2 测试二维和三维模型恢复

梯度验证完成后，智能体测试连续的模型更新能否恢复已知结构（图3）。二维和三维测试默认反演 V_{P} 。用户可以选择求解器支持的一个或多个参数，例如 V_{S} 或密度，并为每个参数提供真实模型和初始模型。对于新的参数选择，智能体会复用或实现相应的灵敏度核，并检查每个参数的梯度。对于联合反演，还会在所选参数同时发生扰动时检查方向导数。

两项恢复测试均使用原生求解器根据真实模型生成的合成观测。在此处报告的示例中，反演从经过平滑处理的 V_{P} 模型开始，并最小化去偏软动态时间规整散度（Blondel 等，2021年），同时固定 V_{S} 和密度。在每次迭代中，智能体在同一个当前模型处评估并平均炮次梯度，然后执行一次更新。

对于二维求解器，智能体使用Marmousi-II测试其主要倾斜层的恢复情况（Martin 等，2006）。Skill在间距为45米的 200×68网格上对休斯敦大学AGL模型进行采样，并应用高斯平滑（标准差为180米）以获得初始 V_{P} 模型。在使用40个炮次和200个接收器的情况下，反演从低频逐步推进到完整频带，最多进行300次更新。

对于三维求解器，智能体使用缩减版 SEG/EAGE 盐丘模型，测试盐体整体形状和速度对比的恢复效果（Aminzadeh 等，1996年、1997年）。智能体将 $33 \times 33 \times 17$ 模型网格映射到求解器的原生网格，并测量代价函数

反演前对所有炮次进行一次梯度评估的代价。标准测试使用九个炮次和 169 个接收器，经过 125 次接受的更新。

在这两项测试中，智能体通过测量反演前后的模型误差来评估模型恢复情况。报告使用统一的色标展示真值、初始模型和最后一个接受的模型；对于二维，展示完整的二维剖面；对于三维，则展示相匹配的水平剖面和垂直剖面。报告说明反演恢复了哪些结构，并记录反演停止的原因。

只有通过梯度验证和恢复测试后，智能体才会交付反演框架。如果任一检查发现实现错误，智能体会修复扩展，并在交付前重新执行受影响的检查。可运行的框架包含恢复报告，以及复现结果所需的测试和命令。

4 验证与应用

我们测试了将自动微分限制在伴随源构造环节，是否能在减少运行时间和 GPU 内存使用量的同时，保持梯度精度和模型恢复能力。ADFWI 中的全自动微分为此次比较提供了参考。随后，我们使用智能体技能构建了 DiffSPECFEM2D 和 DiffAxiSEM3D，并测试这些基于原生求解器的框架能否恢复二维和三维中的已知速度结构。

4.1 全自动微分与用于伴随源的自动微分

我们基于 ADFWI 的正演求解器构建了 HybridADFWI，使两种方法求解相同的波传播问题。ADFWI 通过对波传播过程进行微分，获得参考模型梯度（F. Liu 等，2025）。在 HybridADFWI 中，自动微分在合成数据处停止。求解器在接收器处注入由此得到的数据导数，以构成伴随源，并通过相同时间推进格式的离散伴随计算模型梯度。两种实现均采用单精度波传播，并使用相同的 Marmousi-II 模型（Martin 等，2006）、合成观测和失配函数。

共享的正演问题描述了各向同性介质中的耦合压缩波（P 波）和垂直极化剪切波（SV 波）。ADFWI 和 HybridADFWI 使用相同的四阶有限差分格式求解该问题。控制平面应变方程同样适用于第4.2节中的 SPECFEM2D 示例（Komatitsch & Vilotte,

1998）。面内位移 $\boldsymbol{u} = (u_x, u_z)^{\mathsf{T}}$ 和应力 $\boldsymbol{\sigma}$ 满足

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 \boldsymbol{u}}{\partial t^2} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} &= \boldsymbol{f}, \\ \boldsymbol{\sigma} &= \lambda_{\mathrm{L}} (\nabla \cdot \boldsymbol{u}) \boldsymbol{I} + \mu \big[\nabla \boldsymbol{u} + (\nabla \boldsymbol{u})^{\mathsf{T}} \big]. \end{aligned} \tag{8}$$

这里 $\boldsymbol{f}$ 是方程（1）中离散源对应的等效力密度， ρ是密度， $\boldsymbol{I}$ 是面内单位张量。拉梅′参数为 $\lambda_{\mathrm{L}} = \rho(V_{\mathrm{P}}^2 - 2V_{\mathrm{S}}^2)$和 $\mu = \rho V_{\mathrm{S}}^2$。

我们选择 soft-DTW 散度（Blondel 等，2021年），因为每个合成样本都可能参与多个时间对齐，因此难以手动推导伴随源。对于预处理后的合成道集 $\boldsymbol{p}$ 和观测道集 $\boldsymbol{o}$，散度为

$$D_\gamma(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{o}) = S_\gamma(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{o}) - \tfrac{1}{2} S_\gamma(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}) - \tfrac{1}{2} S_\gamma(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{o}). \tag{9}$$

这里 S_γ 是对齐代价的软最小值（Cuturi & Blondel，2017）。我们采用振幅平方差，并设置 $\gamma = 0.1$。对于每个炮次，我们将每条道的散度除以其处理后的样本数，再对接收器取平均。随后，两种方法都对全部40个炮次取平均，无论批次大小如何。自动微分会考虑预处理，并对依赖于 $\boldsymbol{p}$的两个项分别求导，包括 $S_\gamma(\boldsymbol{p},\ \boldsymbol{p})$的两个参数。

在平滑初始模型下，HybridADFWI 得到的完整 V_{P} 梯度与全自动微分参考结果高度吻合。表1中的六种设置下，最大的相对 L_2差异为 1.35×10^{-6}。将全部 40 个炮次放在一个批次中并启用检查点时，两种实现还得到了完全相同的波形。

这种梯度一致性也体现在模型恢复上。从相同的平滑模型出发并使用相同的优化器，两种方法经过 300 次更新后都恢复出了 Marmousi-II 的主要倾斜层（图4a–d）。

仅在伴随源构造中使用自动微分，也降低了全部六种配置下的正演与梯度计算代价函数。在 NVIDIA GB10 上对全部 40 个炮次进行一次计算时，在测试的批次大小和检查点设置下，HybridADFWI 的速度是 ADFWI 的 2.4–4.6 倍，峰值预留 GPU 内存则减少了 5–22%（表1）。

4.2 使用智能体技能构建 DiffSPECFEM2D 和 DiffAxiSEM3D

ADFWI 对比测试在单个正演求解器上验证了该方法。接下来，我们测试了一个智能体技能能否指导两个独立开发的求解器进行适配

表1。 在 NVIDIA GB10 上对全部 40 个炮次进行一次正演与梯度计算。时间为配对运行结果的均值 ± 样本标准差。GPU 内存为 PyTorch 保留内存的峰值（GiB；若标准差非零则显示该值）。向下箭头表示相对于 ADFWI，运行时间更短或内存使用量更低。每个梯度均为 40 个炮次的均值。梯度差异是完整 V_P 梯度向量之间配对相对L_2 差异的最大值，以 ADFWI 为参考。每种设置均进行了三次配对运行。

批次 size	ADFWI		HybridADFWI		梯度差异
	时间（秒）	GPU 内存	时间（秒）	GPU 内存	
已启用检查点					
40	202.78 ± 0.06	6.36	**63.95** ± 0.03 (3.17× ↓)	**5.89** (7.25% ↓)	5.27×10^{-7}
20	195.67 ± 0.90	2.89	**55.40** ± 0.24 (3.53× ↓)	**2.67** (7.44% ↓)	7.34×10^{-7}
1	1015.50 ± 0.96	1.82	**420.81** ± 0.36 (2.41× ↓)	**1.73** (5.05% ↓)	4.73×10^{-7}
检查点已禁用					
40	185.32 ± 0.80	35.73	**49.71** ± 0.56 (3.73× ↓)	**29.34** (17.88% ↓)	4.45×10^{-7}
20	187.21 ± 0.16	16.76	**40.62** ± 0.27 （4.61× ↓）	**15。40** (8.08% ↓)	1.35×10^{-6}
1	866.82 ± 0.29	2.93	**286.03** ± 0.16 (3.03× ↓)	**2.28** (22.08% ↓)	5.00×10^{-7}

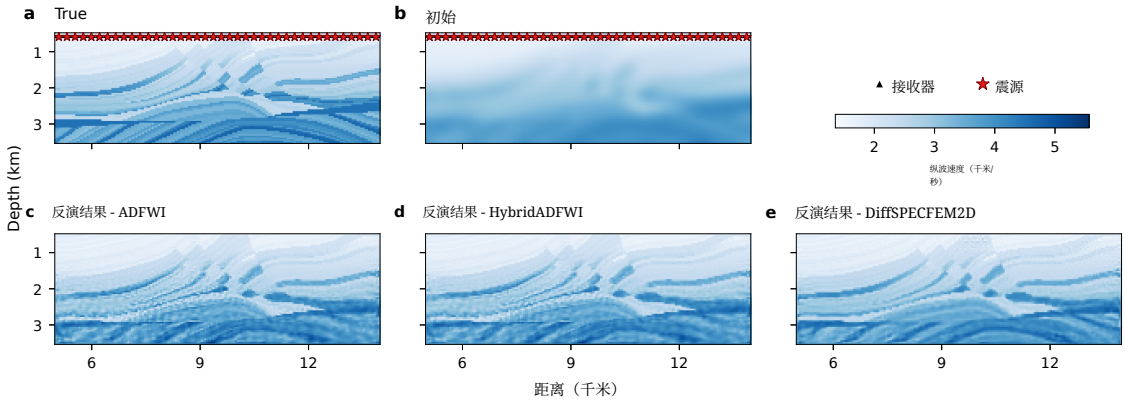


图4。 V_P Marmousi-II（Martin 等，2006）经过 300 次更新后的恢复结果。从相同的初始模型（b）出发，ADFWI 中的全自动微分（c）和 HybridADFWI 中仅对伴随源进行自动微分（d）均恢复了真实模型（a）的主要倾斜层。使用 Skill 构建的 DiffSPECFEM2D（e）则根据 SPECFEM2D 自身生成的合成位移观测恢复了这些地层。

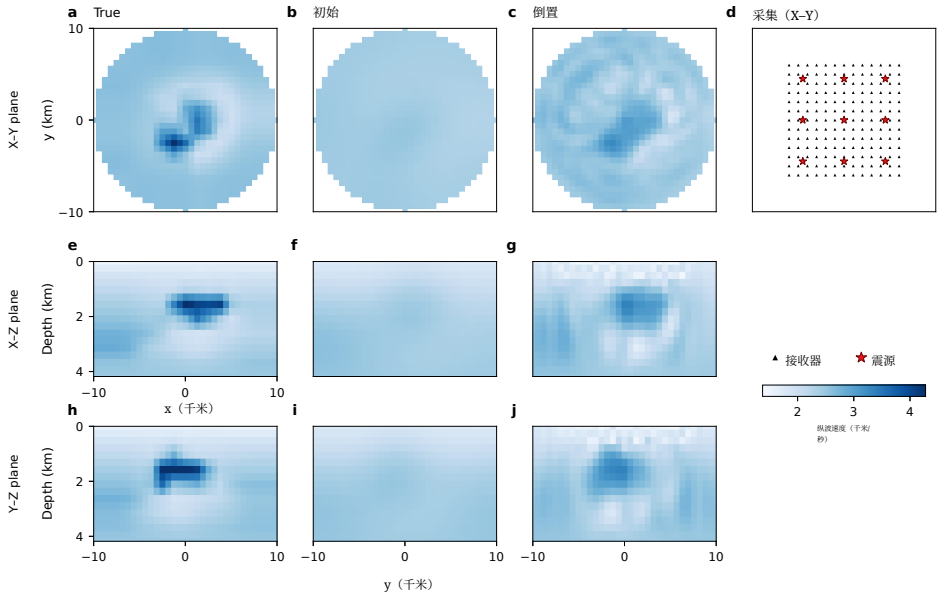


图 5。 DiffAxiSEM3D恢复了SEG/EAGE盐体的整体形状（Aminzadeh 等，1997）。匹配的剖面显示了2.09千米深度处的真模型（a、e、h）、初始模型（b、f、i）和倒置模型（c、g、j）：（a–c）、$y = 0$（e–g）以及 $x = 0$（h–j）。垂直剖面采用三倍垂向夸大。面板（d）显示了震源（星形）和接收器（三角形）。

具有不同的原生伴随算子功能。智能体通过复用原生SPECFEM2D伴随算子构建了DiffSPECFEM2D，并通过向AxiSEM3D代码添加伴随时间步构建了DiffAxiSEM3D。每个框架都为恢复测试生成了各自的合成观测。

在反演之前，我们检查了每个框架在所有炮次上的平均软DTW散度的方向导数。在平滑初始模型处，我们将 V_P 梯度与测试方向的内积同相应的中心有限差分进行了比较。在最大速度扰动为1 m/s的情况下，相对于每次测试中绝对值较大的导数，两个标量导数之差分别为DiffSPECFEM2D的 6.45×10^{-6} 和DiffAxiSEM3D的 1.36×10^{-5} 。

在二维中，DiffSPECFEM2D 使用现有的伴随方法和 soft-DTW散度，恢复了 Marmousi-II 的主要倾斜层（Martin 等，2006）。利用合成位移观测进行 300 次更新后，全网格 V_P 均方根误差比初始模型低 47.3%（图4a、b、e）。

在三维中，DiffAxiSEM3D 恢复了简化版 SEG/EAGE盐丘模型（Aminzadeh 等，1997）中盐体的整体形状及其部分速度差异（图5）。用于通过平方 L_2 失配验证梯度的同一伴随时间步，也支持了基于 soft-DTW散度的反演。经过 125 次更新后，soft-DTW散度比初始值低 86.1%。

使用同一 Skill，我们将两个求解器适配用于反演，同时保留其原生波传播与并行执行。两个软件包均接受 PyTorch 中用户定义的可微失配函数，此处以 V_{P} 反演为例加以说明。

5 讨论与结论

在本研究中，我们开发了一种非侵入式工作流和一个智能体技能，用于将现有高性能地震求解器适配到采用用户定义的失配函数的反演。自动微分仅计算失配相对于合成数据的导数。求解器在接收器处注入该导数以形成伴随源，并利用其原生数值核和并行执行计算模型梯度。在相同的正演求解器下，HybridADFWI 与 ADFWI 中的全自动微分得到了高度吻合的模型梯度和相似的反演速度模型。在所测试的各项配置中，HybridADFWI 每次正演与梯度计算的耗时更短，峰值预留 GPU 内存也更低（表1）。我们使用同一 Skill，由 SPECFEM2D 构建了 DiffSPECFEM2D，并由 AxiSEM3D 构建了 DiffAxiSEM3D。两个框架均通过了方向梯度检查。在合成反演中，DiffSPECFEM2D 恢复了 Marmousi-II 的主要倾斜层，DiffAxiSEM3D 恢复了 SEG/EAGE盐体的整体形态及其部分速度对比。

求解器完成适配后，研究人员可以更改波形失配，并复用经过验证的伴随和灵敏度计算程序。例如，在 DiffAxiSEM3D 中将平方 L_2 切换为软 DTW 散度后，伴随源也随之改变。相同的原生程序传播了新的震源，并计算出模型梯度。

对于新的求解器，适配工作量取决于其代码已提供哪些伴随和灵敏度计算程序。给定源代码和一个可运行的正演示例后，智能体可以复用与离散波传播、接收器采样及所选模型参数相匹配的程序。它会实现缺失的操作，并检查所得的模型梯度。

这一工作流程还可扩展到其他已使用伴随模型的反问题。例如，估算海洋环流（Stammer 等，2002），以及根据卫星测量推断地表 CO_2 通量（Chevallier 等，2005）。光子逆向设计已将自动微分与伴随模拟相结合（Luce 等，2024）。每种应用都需要根据其科学目标设计相应测试。在地震学中，已知结构恢复可直接检验成熟的求解器是否能够支持采用用户定义失配函数的反演。

数据和代码可用性

以下 GitHub 仓库包含智能体技能和两个可微反演框架的源代码。

- 用于适配地震求解器的智能体技能： https://github.com/Wangxi404/differentiate-seismic-solver
- DiffSPECFEM2D：https://github.com/Wangxi404/DiffSPECFEM-native
- DiffAxiSEM3D：https://github.com/Wangxi404/DiffAxiSEM3D-native

两个框架仓库都说明了如何复现实例，以及如何使用用户定义的失配函数运行反演。

每个示例均根据已发表的参考模型生成各自的合成观测。二维示例从休斯敦大学AGL模型定义档案库下载Marmousi-II V_P、 V_S和密度网格（Martin 等，2006），并在准备反演输入数据之前验证其校验和。三维示例包含由SEG/EAGE盐丘速度模型（Aminzadeh 等，1997）导出的重采样参考模型和平滑初始模型。勘探地球物理学家协会以知识共享署名 4.0 国际版分发该源模型。

参考文献

Aminzadeh, F., Brac, J., & Kunz, T. (1997). *SEG/EAGE*三维盐丘与逆冲断层模型（第1号）。勘探地球物理学家协会。

Aminzadeh, F., Burkhard, N., Long, J., Kunz, T., & Duclos, P. (1996). 三维SEG/EAEG模型——更新。《*The Leading Edge*》，*15*(2)，131–134。数字对象标识符：10.1190/1.1437283

Blondel, M.、Mensch, A. 和 Vert, J.-P.（2021）。可微分的 tim e

序列。载于第*24*届人工智能与统计国际会议论文集 （第130卷，第3853–3861页）。PMLR。检索自 https://proceedings.mlr.press/v130/blondel21a.html

Bozdağ, E., Trampert, J., & Tromp, J.（2011）。基于瞬时相位和包络测量的全波形反演失配函数。《国际地球物理学杂志》，*185*(2), 845–870. 数字对象标识符：10.1111/j.1365-246X.2011.04970.x

Chen, Y., & Saygin, E.（2021）。利用混合机器学习进行地震反演。《地球物理研究杂志：固体地球》，*126*(9), e2020JB021589. 数字对象标识符：10.1029/2020JB021589

Chevallier, F., Fisher, M., Peylin, P., Serrar, S., Bousquet, P., Bréon, F.-M., . . . Ciais, P.（2005）。利用卫星观测推断CO_2 震源和汇：方法及其在TOVS数据中的应用。《地球物理研究杂志：大气》，*110*(D24), D24309. 数字对象标识符：10.1029/2005JD006390

Cuturi, M., & Blondel, M. (2017). Soft-DTW：一种用于时间序列的可微损失函数。载于第*34*届国际机器学习会议论文集 （第70卷，第894–903页）。PMLR。检索自 https://proceedings.mlr.press/v70/cuturi17a .html

Komatitsch, D., & Vilotte, J.-P. (1998). 谱元法：一种高效模拟二维和三维地质结构地震响应的工具。《美国地震学会会刊》，*88*（2），368–392。数字对象标识符：10.1785/BSSA0880020368

Leng, K., Nissen-Meyer, T., van Driel, M., Hosseini, K., & Al-Attar, D. (2019). AxiSEM3D：在具有起伏不连续面的三维全球地球模型中模拟宽频带地震波场。《国际地球物理学杂志》，*217*（3），2125–2146。数字对象标识符：10.1093/gji/ggz092

Li, Z., Leng, K., Jenkins, J., & Cottaar, S. (2022年). 夏威夷附近核幔边界的公里尺度结构。《自然通讯》，*13*(1), 2787。数字对象标识符：10.1038/ s41467-022-30502-5

Liu, F., Li, H., Zou, G., & Li, J. (2025). 基于自动微分的灵活工作流全波形反演。《地球物理研究杂志：机器学习与计算》，*2*(1), e2024JH000542。数字对象标识符：10.1029/2024JH000542

Liu, X. (2020年). 基于差分走时测量的地震噪声干涉法有限频率灵敏度核。《地球物理研究杂志：固体地球》，*125*(4), e2019JB018932。数字对象标识符：10.1029/2019JB018932

Louboutin, M., Witte, P. A., Siahkoohi, A., Rizzuti, G., Yin, Z., Orozco, R., & Herrmann, F. J.（2022年）。通过软

件抽象加速可扩展的计算地球物理学。载于第二届应用地球科学与能源国际会议扩展摘要。检索自 https://slim.gatech.edu/Publications/Public/Conferences/SEG/2022/louboutin2022SEGais/louboutin seg22.html 数字对象标识符：10.1190/image2022 -3750561.1

Louboutin, M., Yin, Z., Orozco, R., Grady, T. J., II, Siahkoohi, A., Rizzuti, G., . . . Herrmann, F. J.（2023年）。利用可微编程和机器学习进行学习型多物理场反演。《*The Leading Edge*》，*42*（7），474–486。取自 https://slim.gatech.edu/Publications/Public/Journals/TheLeadingEdge/2023/louboutin2023lmi/le software.html 数字对象标识符：10.1190/tle42070474.1 Luce, A., Alaee, R., Knorr, F., & Marquardt, F.（2024年）。融合自动微分与伴随法进行光子逆向设计。《*Machine Learning: Science and Technology*》，*5*（2），025076。数字对象标识符：10.1088/2632-2153/ad5411 Martin, G. S., Wiley, R., & Marfurt, K. J.（2006）。Marmousi2：Marmousi 的弹性升级版。《*The Leading Edge*》，*25*（2），156–166。数字对象标识符：10.1190/1.2172306 M´etivier, L., Brossier, R., M´erigot, Q., Oudet, E., & Virieux, J.（2016）。利用最优传输距离测量地震图之间的失配：在全波形反演中的应用。《国际地球物理学杂志》，*205*（1），345–377。数字对象标识符：10 .1093/gji/ggw014 Plessix, R.-E.（2006）。利用伴随状态法计算具有地球物理应用的泛函梯度：综述。《国际地球物理学杂志》，*167*（2），495–503。数字对象标识符：10.1111/j.1365-246X.2006.02978.x Richardson, A.（2026年）。*Deepwave*（版本 *0.1.0*）。Zenodo。取自 https:// doi.org/10.5281/zenodo.3829886（软件）数字对象标识符：10.5281/zenodo.3829886 Sambridge, M., Rickwood, P., Rawlinson, N., & Sommacal, S.（2007）。地球物理反问题中的自动微分。《国际地球物理学杂志》，*170*（1），1–8。数字对象标识符：10.1111/j.1365-246X.2007.03400.x Stammer, D., Wunsch, C., Giering, R., Eckert, C., Heimbach, P., Marotzke, J., . . . Marshall, J.（2002）。根据海洋观测和大气环流模式估计的1992—1997年全球海洋环流。《*Journal of Geophysical Research: Oceans*》，*107*（C9），3118。数字对象标识符：10.1029/2001JC000888 Sun, B., & Alkhalifah, T.（2022年）。ML-misfit：用于全波形反演的失配函数神经网络表述

函数。《地球科学前沿》，*10*，1011825。数字对象标识符：10.3389/feart.2022.1011825 Szenicer, A., Leng, K., & Nissen-Meyer, T.（2020年）。用于离散伴随波形层析成像的复杂度驱动框架。《国际地球物理学杂志》，*223*（2），1247–1264。数字对象标识符：10.1093/gji/ggaa349 Tape, C., Liu, Q., Maggi, A., & Tromp, J.（2009）。南加州地壳的伴随层析成像。《科学》，*325*（5943），988–992。数字对象标识符：10.1126/science.1175298 Tromp, J., Tape, C., & Liu, Q.（2005）。地震层析成像、伴随方法、时间反转与香蕉甜甜圈核。《国际地球物理学杂志》，*160*（1），195–216。数字对象标识符：10.1111/j.1365-246X.2004.02453.x Warner, M., & Guasch, L.（2016）。自适应波形反演：理论。《地球物理学》，*81*（6），R429–R445。数字对象标识符：10.1190/GEO2015-0387.1 Zhu, W., Xu, K., Darve, E., & Beroza, G. C.（2021）。利用自动微分进行地震反演的一般方法。《计算机与地球科学》，*151*，104751。数字对象标识符：10.1016/j.cageo.2021.104751