

摘要

地球物理反演理论和方法发展至今,凝聚了历代科学家和实践者的智慧,已成为今天人们用于揭示地球奥秘的有效工具。地球物理反演作为地球物理学的重要组成部分,已成为地球物理勘探数据处理中的一项核心技术,其反演结果为地质推断解释提供了有利的依据。直流激电法作为地球物理勘探方法的一个重要分支,在能源、矿产及工程勘查中发挥着重要作用。近年来,随着高密度、高精度电法仪器发展,其应用领域也在逐步拓宽,观测位置也从地面向水中、坑道及井中等复杂情况发展。与此同时,人们对其勘探和解释精度的要求也在不断提高,那么作为直流激电数据处理的一项核心技术——反演,也将面临着新的挑战。本文主要针对直流激电数据反演中的线性与非线性方法进行研究,着重探讨如何提高反演结果的分辨率,减少反演的多解性,以及如何增强反演过程的稳定性和健全性等问题。

在第二章中,首先从最小二乘广义线性反演方程出发,引出正则化的概念及正则化技术的基本思想;然后从正则化参数的选择、稳定化泛函的构造、引入某种先验约束及修正迭代步长等几个方面探讨了广义线性反演的正则化技术,以此改善反演方程的病态特征,抑制反演过程的不稳定性,最终达到提高反演分辨率的目的。

在第三章中,考虑到在地球物理勘探过程中,由于受非高斯噪音的影响,使采集的数据含有突变噪音,如果仍然采用基于最小二乘准则的广义线性反演方法进行反演,将会造成反演假象,进而可能导致错误解释。据此,笔者提出了混合范数的最优化方法,即根据观测数据品质的优劣,对数据空间和模型空间分别采用不同的范数进行测度,达到压制干扰突出有用异常的目的。由于混合范数的引入,增加了线性反演方程的复杂性,对其求解更加困难。因此,通过将加权矩阵规范化,并采用混合范数下迭代再加权阻尼共轭梯度算法进行求解,使得问题得到解决。最后,通过对含有和不含有猝发噪音的模拟电阻率数据进行反演,验证了混合范数下最优化反演方法的可行性和有效性。

在第四章中,从最小二乘广义线性反演的角度,探讨了直流激电数据的广义线性反演方法;在偏导数矩阵的计算过程中,通过将互换

原理与 Broyden 拟牛顿技术相结合的计算方式,可大大提高反演的运算速度。然后对三种观测方式的直流激电数据反演中所涉及到一些技术问题加以解决和完善。对于垂直激电测深(VES)二维反演,主要从正反演所采用的双网格系统、正演模拟的误差校正以及反演中初始模型的给定三个方面探讨如何提高正演的精度和反演的分辨率;对于电阻率最小二乘间歇反演,提出了一种同时反演所有不同时刻观测数据的新方法,即通过一次反演过程来获得所有不同时刻的地下模型。在反演过程中,引入时间和空间稳定化泛函,将不同时刻的观测数据联系起来,可极大的提高反演的分辨率和减少反演的多解性;对于复杂条件下的三维直流激电数据反演,可以说它是一个复杂的系统工程,要涉及到多个重要环节,如起伏地表大量网格节点的高程插值、地下介质的网格剖分、正演中刚度矩阵元素的存储及其方程的求解以及正演的计算精度和效率问题等。笔者对这些问题逐一进行了研究,使三维直流激电反演中所涉及的问题得到进一步完善。最后,对起伏地形条件下的三维直流激电数据进行反演,验证方法的有效性。

在第五章中,由于地球物理反问题大多都具有多参数、多极值和非线性的特点,线性或拟线性反演方法往往得到的只是局部最优解,并且反演结果常常与初始模型有关,如果初始模型选择的合适,它可以得到较好的结果,反之,还可能造成反演的假象。而以随机过程为基础的全局最优化反演方法不受确定规则的限制,自由的在模型空间内随机搜索,这种较强的搜索能力能够保证反演结果基本上是全球最优或次最优解。本章主要对非线性全局最优化方法中的模拟退火算法和遗传算法进行研究。在简单介绍方法原理的基础上,着重对全局与局部优化方法以及全局与全局优化方法相结合的混合方法进行深入研究,以提高算法的全局寻优性能。最后通过对直流激电测深曲线进行反演,验证了非线性混合反演方法的有效性。

关键词 正则化, 广义线性反演, 混合范数, 间歇反演, 全局最优化

ABSTRACT

Theory and methods of geophysical inversion developed up to now, agglomerating the intelligence of many scientists and practicers, and it had become a valid tool that people revealed the profound mystery of the Earth. Geophysical inversion was an important section of geophysical branch of knowledge, and it had become a core technique of the geophysical data processing, the inverted result provided a beneficial basis for the geological interpretation. Direct current induced polarization method was an important branch of geophysical exploration methods, which played an important part in the energy, mineral resources and engineering exploration. In recent years, with the development of the high density and high precision instrument of electrical method, the applied field of electrical surveying is in continuous evolution, the survey space is gradually expanding from ground to some complex quomodo of underwater, sap and borehole etc. At the same time, people's request for the exploration and interpretation precision is also raising continuously, so, the inversion acting as a core technique of data processing of direct current induced polarization, which will be also facing with new challenge. In this dissertation, we will carry on an investigation in the linear and nonlinear inversion methods of direct current induced polarization measurements, emphasizing to study how to improve the resolution and reduce the multisolution of inverted result, and how to enhance the stabilization and robustness etc.

In the chapter 2, firstly, the concept of regularization and idea of regulation technique were introduced beginning with the generalized linear inversion equation of least squares method. Then, we studied the regularization techniques of generalized linear inversion from several aspects, for instance, the choice of regularization parameter, the design of stabilizing functionals, the introduce of some prior restriction and the modification of iteration step etc, whicd can improve the ill-posedness of inversion equation and restrain the non-stability of inversion process and heighten the resolution of inversion result finally.

In the chapter 3, we considered that geophysical exploration work was often influenced by the non-Gaussian noise and made the data set of acquisition contain some false data, it could lead to the artifact of inversion and the mistake of interpretation if the data set containing non-Gaussian noise was inverted using generalized linear inversion method based on the least squares principle. Thereby we put forward the

optimized inversion method using mixed norm, that is to say, according to the good or poor quality of observed data, the data and model space is measured by different norm, which can gain the ends of inhibiting the disturbance and giving prominence to the useful abnormality. Because of the introduction of mixed norm, which increases the complexity of linear inversion equation, it is more difficult to solve the linear equation than ever. Therefore the problem was settled by normalizing the weighted matrix and solving the linear inversion equation of mixed norm using the iteratively reweighted damping conjugate gradient algorithm. At last, we verified that the optimized inversion method based on mixed norm is workable and effective through inverting the simulated resistivity data containing and not containing abrupt noise.

In the chapter 4, we discussed the generalized linear inversion method of direct current IP data from the angle of the least squares method. The computed speed of inversion can be greatly raised by calculating the partial derivatives matrix combining the reciprocity principle with Broyden's quasi-Newton method. Then we solved and improved some technique problems concerning direct current IP data inversion for three observed methods. For the 2D inversion of vertical IP sounding data, we studied how to raise the precision of forward and resolution of inversion from three aspects of using dual-grid system, modifying the forward error and giving the initial inversion model. For the least squares time-lapse inversion of resistivity data, we put forward a new method to invert all data sets collected at different time simultaneously, namely get all earth models of different time through only one inversion process. In the inversion, we combined all data sets acquired at different time by introducing the stability functional in time and space to objective function, which could greatly improve the stability and reduced the multi-solution. For the 3D inversion of direct current IP data in complex earth condition, we can say that it is a complex systemic engineering being involved to many important taches, for example, the elevation interpolation of large numbers of gridding nodes on the rolling ground, gridding division of underground, the storage of rigid matrix elements and the solution of its equation in the forward and the precision and efficiency of forward simulation etc. We studied these problems one by one, which made some problems concerning 3D inversion of direct current IP data be improved further. At last, we verified the effectiveness of method by means of inverting the direct current IP data of 3D rolling

terrain.

In the chapter 5, linear and quasi-linear inversion method can only get the local optimum solution because the geophysical inverse problems are of the characters of multi-parameters, multi-extrema and non-linearity, and the inversion result is related to the initial modeling, we can get good solution if the initial model choose is suitable, otherwise can lead to the artifact of inversion. Whereas the global optimum inversion method based on random process is not limited by the fixed rule, it can freely search the optimized solution in the model space, this powerfully searching ability ensures that the inversion solution basically is the global optimum or hypo-optimum solution. This chapter mainly studied the simulated annealing algorithm and genetic algorithm belonging to non-linear global optimum method. We deeply studied the mixed methods of combining the global with the global and the global with the global optimum method on the foundation of simply introducing the methods and principles, the mixed method can raise the global searching ability of algorithm. At last, we verified the effectiveness of mixed inversion method by inverting the direct current IP sounding data.

Key words: regularization, generalized linear inversion, mixed norm, time-lapse inversion, global optimum

原创性声明

本人声明，所呈交的学位论文是本人在导师的指导下进行的研究工作及取得的研究成果。尽我所知，除了论文中特别加以标注和致谢的地方外，论文中不包含其它人已经发表或撰写过的研究成果，也不包含为获得中南大学或其它单位的学位或证书而使用过的材料。与我共同工作的同志对本研究所作的贡献均已在论文中作了明确的说明。

作者签名：刘海飞 日期：2007年9月10日

关于学位论文使用授权说明

本人了解中南大学有关保留、使用学位论文的规定，即：学校有权保留学位论文，允许学位论文被查阅和借阅；学校可以公布学位论文的全部或部分内容，可以采用复印、缩印或其它手段保存学位论文；学校可根据国家或湖南省有关部门规定送交学位论文。

作者签名：刘海飞 导师签名：陈石光 日期：2007年9月10日

第一章 绪 论

1.1 地球物理反演的发展概况

在早期,由于人们对自然界未知事物的好奇心,开始萌发根据自然界的物理现象来揭示事物发展的内在规律。牛顿根据万有引力定律推测地球密度,开尔文研究地球的弹性和热传导,这些都可以说地球物理反演研究的范例^[1]。但是到了19世纪人们才将物理学的方法应用到矿产勘查,而勘探地球物理方法的研究和试验直到第一次世界大战后才随着现代工业的发展而兴起,并且地球物理方法的有效性也通过一些成功的勘探实例得到证实,随着数据采集系统和分析技术的迅速发展,使之逐渐成为一门独立学科也是必然趋势。然而在50年代以前,由于计算工具的限制,对反演问题的研究还没有受到足够的重视。到了50年代,电子计算机的诞生对地球物理数据分析产生了巨大的推动作用,并且开始尝试用计算机来完成一些简单的反演工作,但是适用于各种地球物理方法的反演理论还没有形成,反演研究还只是作为正演研究的自然延伸分散在单一的地球物理分支之中。

直到60年代,并且仅在1967到1970的三年时间,被喻为反演之父的美国地球物理学家Backus和应用数学家Gilbert连续发表了三篇经典的地球物理反演方面的论文^[2-4],他们的反演思路别具一格,极具开创性,形成了经典的BG反演理论,为建立统一的地球物理反演理论和方法奠定了扎实的基础,从此地球物理反演才真正在地球物理学家的头脑中扎下了根。然而,BG反演理论讨论的模型为连续的情况,因此总是导致欠定的方程组,不便于在计算机上快速实现。在1972年,由Wiggins和Jackson等人先后提出了与BG反演理论对应的离散模型情况下的反演方法^[5-6],即广义线性反演方法。经Parker等人的介绍和推广^[7],BG反演理论和方法在70年代后期逐渐普及。

自80年代以来,偏微分方程反问题的研究进一步深化了反演的内涵^[1]。反演的实践证明,由于正问题拟微分算子具有不同程度的奇异性,反问题求解过程同时制造人为的假象。因此地球物理反演研究面临着相互矛盾的两个方面:一方面要从数据中提取尽可能多的信息,如最大限度地提高反演模型的分辨率;另一方面要尽可能压制难以避免的人造假象。因此反演的含义应该研究从数据中提取尽可能多的信息以及同时压制人造假象的理论和方法。原苏联学者Tikhonov很早就意识到这个问题,并建立了一套正则化理论用于反问题的研究。在BG理论中最佳折衷的思想也是正则化理论对地球物理反演的发展。但是,这些方法都属于调和反演面临矛盾的方法,这一矛盾还没有得到深入解决^[1]。法国地球物理学家Taramtola从概率的角度出发,将模型和数据的协方差矩阵作为先验信息引入到反演公

式当中,并对反问题中用到的多种优化方法进行了系统深入的论述,其中包括梯度法、牛顿法、拟牛顿法及Monte Carlo法等^[8],为地球物理反演理论的发展和推广起到了促进作用。

90年代,非线性理论在自然科学的各个领域都成为研究的前沿。我们知道,大多数自然现象都是非线性的,地球物理反问题也是如此。实际计算表明,非线性反演要比线性反演复杂的多,而决不像Backus和Gilbert最初想象的那样,只要用线性化加迭代就能解决^[1]。因此当线性化反演方法不能满足解决复杂反问题的需要时,一些非线性反演方法应运而生,如基于物质退火过程的模拟退火方法、基于生物进化的遗传算法和基于人工智能的神经网络方法等。与线性反演方法相比,完全非线性反演方法可以有效的减少多解性,尽量避免反演迭代过程陷入局部极小,可以提高反演的分辨率。但它作为一门新型学科,在理论和方法上还有很多不足,在许多问题上还需进一步深入研究^[9]。目前,地球物理反演的另一发展趋势就是联合反演方法,即多种地质资料联合应用,信息互补,以增强反演过程的稳定性和减少解的非唯一性。在最近几年,联合反演方法已经取得了很大的进展,并且在应用中获得了非常好的地质效果。

1.2 直流激电数据反演的发展概况和研究现状

直流激电法作为地球物理勘探的一个重要分支,主要应用于寻找金属和非金属矿产,进行水文地质、城市环境与建筑基础以及地下管线铺设情况的勘查等。长期以来,它在上述应用领域发挥了很大作用,取得了可喜成就^[10],但这与其先进的数据处理方法是分不开的。反演技术作为地球物理资料处理的一个重要手段,在直流激电数据处理中占有重要地位。然而我们知道,任何一种反演方法都是以正演模拟为基础的,并且直流激电数据的二维和三维正演模拟比较耗费时间和内存,对于早期的计算机是难以实现的。直到上世纪70年代,随着计算机和数值模拟技术的快速发展,直流激电数据的正演模拟取得成功(Coggon, 1971^[11]; Rijo, 1977^[12]; Jeffrey, 1977^[13]; Dey 和 Morrison, 1979^[14]; 周熙襄 1980^[15], 1983^[16])。他们的开创性工作,为激电数据的反演研究奠定了基础。Pelton 等^[17] (1978)实现了二维电阻率和极化率数据的最小二乘反演方法。在反演过程中,对事先提供的数据库进行插值计算偏导数矩阵,它的算法比较简单,但不能用来解释复杂地电断面; Petric 等^[18] (1981)使用 ∂ 中心法对三维电阻率反演进行了研究并取得了一定的效果,但仅适用于电阻率对比度较小的地下模型; Sasaki ^[19](1982)实现了激电数据二维自动反演方法,正演采用有限元法,并且采用电位函数与模型参数之间的简单关系计算偏导数矩阵,大大减少了反演的计算量; Tripp 等^[20], Smith 等^[21] (1984)发展了用有限差分法模拟电阻率的二维反演方法,使激电数据的反演技术逐渐走向实用阶段。

80年代末90年代初,英国伯明翰大学和日本OYO公司首先研制了阵列电探观测系统,使电法勘探能象地震勘探一样使用覆盖式的观测方式,这样可以获得更多关于地下介质的地电信息。由于阵列观测系统的出现,再一次推动了电阻率反演技术的发展,相继出现大量的研究成果(Shima,1987,1988,1989,1990,1992)^[22-26], Shima在正演过程中普遍采用了 θ 中心法,该方法计算量少,但不能进行复杂地形条件下的反演,目前应用较少。Park等^[27](1991)发表了基于有限差分的三维反演算法,在反演过程中采用摄动法计算偏导数矩阵,正式开始了比较系统的三维反演方法的研究。Li和Oldenburg^[28-29](1992,1994)采用基于Born近似的三维反演方法,该算法不必创建和求解三维雅可比矩阵,节省了时间也降低了对机器内存的要求,但该方法难以处理大对比度的模型。庄浩^[30](1998)在此基础上对Born近似反演方法进行了改进,对初始模型的要求不高,在正演时没有使用Born近似,避免了处理大对比度问题时的困难,但总的来说,作为一种近似反演方法,它的分辨率不高。Sasaki(1994)^[31]实现了基于有限单元法的电阻率三维反演,并且可对起伏地形下的复杂模型进行反演。为了解决多解性问题,他将模型参数的梯度光滑约束引入到目标函数中;Zhang等^[32](1995)实现了共轭梯度算法的三维电阻率正反演。在正演过程中,采用有限差分法进行模拟;对于含有大量零元素的带状刚度矩阵方程组,采用一维压缩存储的不完全Cholesky预条件共轭梯度法进行求解,当电极的数量不是很多时,这种方法还是很有优势的。在反演过程中,采用最小二乘共轭梯度法进行求解,避免了矩阵相乘 $A^T A$ 的计算,可加快反演的计算速度。在此基础上,吴小平^[33-37](1998,1999,2000,2001,2003)发展并细化了三维电阻率共轭梯度法的正反演技术。Li和Oldenburg^[38-39](1994,1999)实现了二维和三维极化率数据反演,系统的阐述了多种极化率数据的反演方法,并且探讨了所述反演方法的分辨率问题。

我国地球物理学者们在采纳和发展国外直流激电数据反演方法的同时,也创立了自己的学派风格。主要体现在以下三个研究方向:毛先进等^[40-42](1997,1998,1999)利用改进的边界积分方程法实现了2.5维电阻率层析成像,突破了传统边界积分方程法只适合正演计算的局限性,由于研究区域内任意一点的电位与各单元电导率可用显式表达式联系起来,进而避免了雅可比矩阵的计算,反演速度较快,而且可以对大对比度的地电断面进行反演。底青云等^[43-44](1997,1998)类比地震学中走时射线追踪技术,提出了电流线追踪电位电阻率成像方法。地震走时射线追踪中,通过每个单元的走时只与单元的速度有关而与单元以外的其它单元的速度分布无关;而电位电流线追踪中,通过每个单元的电位差不仅与该单元的电阻率有关,而且与其它电阻率分布有关。她提出了一种改进的两点射线追踪技术,其中电位差的计算考虑到电流密度的变化,分为两个层次:一是由于几何扩

散,和距离的平方成反比;二是由于电流线的折射定律是非线性的,且为互切关系,需由折射定理进行校正。数值模拟的结果表明,该方法比有限元方法快得多,占用内存较少,反演效果较好。同时她还提出了积分法电阻率层析成像方法^[45],该方法对电阻率的成像结果也较好,尤其是反演时可用均匀初始模型,减少了反演时对初始模型的信赖。阮百尧等^[46-51](1998—2002)考虑到地下介质在多数情况下,岩石的组成、温度和湿度等都是连续变化的,电导率和极化率参数也是连续变化的。基于这个前提,采用有限元法对电导率连续变化的地下介质进行数值模拟,突破了前人假定地下模型参数分块均匀的局限性,使其更符合实际情况。在反演过程中,将背景和光滑模型约束引入到目标函数中,即减少了反演的多解性,又使反演结果更接近实际情况。

上述所提到的针对二维或三维直流激电数据的反演方法都是广义线性或拟线性反演方法。而继广义线性反演方法之后发展起来的完全非线性反演方法,随着若干前沿科学的新理论、新思想和新方法不断渗入到地球物理领域,推动了地球物理反演中非线性反演技术的发展,并且已经取得了初步应用。特别是以模拟退火、基因遗传及神经网络算法为代表的智能计算技术很快成为国内外地球物理学界的研究热点,部分研究成果已经应用到地震反演当中^[52-55]。然而,关于直流激电数据反演中的完全非线性反演方法的研究却很少。王兴泰等^[56](1996)首次将遗传算法用于电测深曲线反演和解释,应用效果较好。但是,由于受到寻优条件的限制,一般只能在全局范围内得到次优解。Raghu等^[57](1996)和卢元林等(1999)^[58]将模拟退火方法用于电阻率二维反演,虽然取得了一定的进展,但未能解决模拟退火方法收敛慢的问题,反演比较耗费机时。Carlos等^[59](2000)将两层前馈神经网络和模拟退火法相结合反演一维电测深曲线;Gad等^[60](2001)应用BP算法三层前馈网络进行一维电测深反演,应用四层前馈网络进行二维电测深反演,输入归一化正演数据矢量进行训练,并用一组未经训练的综合数据及一组野外观测数据进行测试,尽管取得了比较好的结果,但误差反转学习算法并没有解决学习效率和初始迭代值的选择问题。

1.3 本文研究的目的、意义及组织结构

1.3.1 本文研究的目的和意义

地球物理反演理论和方法发展至今,凝聚了历代科学家和实践者的智慧,已成为今天人们用于揭示地球奥秘的有效工具。地球物理反演作为地球物理学的重要组成部分,已成为地球物理勘探数据处理中的一项核心技术,其反演结果为地质推断解释提供了有效的依据。直流激电法作为地球物理勘探方法的一个重要分支,在能源、矿产及工程勘查中发挥着重要作用。近年来,随着高密度、高精度电法仪器发展,其应用领域也在逐步拓宽,观测位置也从地面向水中、坑道及

井中等复杂情况发展。与此同时,人们对其勘探和解释精度的要求也在不断提高,那么作为直流激电数据处理的一项核心技术——反演,对其进行研究也将面临着新的挑战。鉴于上述直流激电数据反演的发展现状,本文将在反演的正则化技术、复杂观测方式的二、三维反演以及非线性反演方法方面展开进一步工作。在广义线性反演方面,主要针对问题的不适应性进行研究,将不适定问题转化为适定可解的问题,进而提高反演的稳定性和健全性,并以减少反演的多解性和提高分辨率为最终目的;考虑到数据采集常常含有突变噪音,故对混合范数下的最优化反演方法进行研究;并对复杂观测方式的二、三维直流激电数据的反演方法进行完善和优化。在完全非线性反演方面,主要对模拟退火和遗传算法在如何提高反演的效率和算法的结合上进行深入研究。并将其应用到垂直激电测深反演方面,最后通过算例对比来评价算法的优点和不足。

任何地球物理资料的推断解释在数学上均可归属于反问题的范畴,而反问题的特点就是不适定的,这是由问题的本质决定的。那么,直流激电数据反演技术同样具有不适定的特点。所谓不适定问题,起初人们是在连续空间展开讨论的,并没有给出严格的数学定义,它的定义是从适定问题中延伸出来的。所谓适定性问题是指:对于连续算子方程 $\mathbf{g}(\mathbf{m}) = \mathbf{d}$, 如果 \mathbf{m} 满足:(1)存在;(2)唯一;(3)连续的依赖于 \mathbf{d} , 则称连续算子方程 $\mathbf{g}(\mathbf{m}) = \mathbf{d}$ 为适定的。否则,上述三个条件有一个不满足,则称为不适定的^[61]。

实际问题通常是连续的,属于无限维问题。为了在计算机中进行计算,需要连续模型转化为离散化模型,即将连续算子方程 $\mathbf{g}(\mathbf{m}) = \mathbf{d}$ 转化为有限维线性方程组 $\mathbf{G}\mathbf{m} = \mathbf{d}$ 的形式,才能利用计算机进行求解。然而,随着人们探索自然的不断深入,线性方程组的求解规模越来越大,人们在研究中发现,这种大型的线性方程组同样具有不适定性的特征,尤其从不适应算子方程转化而来的线性方程组。但这时不适定问题的特征主要集中在第三个条件的满足上,对于线性方程组来说,连续性的概念在此已经失去意义。据此, Hansen 等人根据最小二乘问题解的特征,提出了有限维线性方程组不适定的概念,即方程组的系数矩阵 \mathbf{G} 满足:(1)条件数非常大;(2)奇异值逐渐下降并趋于零,则称其为不适定的,否则,称其为适定的。为区别起见, Hansen 称这种有限维不适定问题为离散不适定问题^[62]。

由于不适定性是反问题的显著特征,因此它并不仅局限于地球物理反问题,它还存在于其它学科的反问题当中,如医学、气象学、天文学等。关于不适定问题的正则化,目前无论在理论还是在实际应用问题中均是不够完善的。对于不同的不适定问题,采用什么样的正则化方法进行处理,需要根据问题的不同特征而定。目前在直流激电数据二维或三维反演当中,大都采用 Tikhonov 正则化方法,

这种方法对解的先验信息要求较高,而且正则化参数的选择问题一直还没有得到完善的解决。所以,本文在直流激电的线性化反演方面,主要针对不适定问题的解决方法进行研究,这些研究同样适用于其它领域的不适定问题。因此,从某种意义上说,本文在这方面的研究具有更广泛的意义。由于地球物理数据采集常常受突变噪音的影响,使用传统的最小二乘广义线性反演,难以压制突变噪音,易于得到反演假象。在垂直激电测深二维反演、电阻率间歇反演和复杂条件下的三维直流激电反演等方面,也存在一些不足,所以,在前人基础上继续研究也是一项有实际意义的工作。

从事完全非线性反演方法的研究,主要考虑到绝大多数地球物理问题都是多元、非线性函数的极值问题,采用广义线性化反演方法进行求解,使反演过程陷入局部极值是不可避免的。这主要由于线性化反演方法求解线性反问题是强烈的依赖于初始模型,初始模型的好坏直接影响着反演结果的优劣。幸运的是,对于许多地球物理问题,我们已经有了不少先验知识或信息,这也就是为什么线性化反演方法能够解决许多地球物理非线性问题的原因。但是,当我们没有先验信息时,也就难以正确的选择初始模型。为了解决这些问题,必须采用完全非线性反演方法。因此,研究和发非线性反演方法是地球物理工作者的一项重要任务。而对于非线性反演方法,目前,它仍然属于一门新兴学科,必然还有许多不足,许多问题还需要开展深入的研究。特别是在直流激电数据的反演方面,完全非线性反演方法的研究成果更是少之又少,所以本文在完全非线性反演方面开展工作也是有一定意义的。

1.3.2 本文研究的组织结构

本文共分为六章,围绕关于直流激电数据的线性和非线性反演方法,在以下几个方面展开研究工作:

一、全面的概述了地球物理反演发展的概况;系统的综述了直流激电数据反演的发展概况和研究现状;阐述了本文研究的目的和意义;为论文展开研究工作奠定基础 and 明确研究方向。

二、从第二章开始,进入论文研究的正题。首先从概率的角度论述了最小二乘法的应用条件,并建立了最小二乘线性反演方程。由于最小二乘反演方程的不适定性(或病态),必须通过正则化将其转化为适定可解的问题,进而简要阐述了正则化的概念及正则化技术的基本思想。接着从正则化参数的选择、稳定化泛函的构造、引入某种先验约束及修正迭代步长等几个方面探讨了广义线性反演的正则化技术。在正则化参数的选择方面,主要从几个角度探讨自适应正则化参数的选择方法:(1)用目标函数拟合差构造自适应正则化参数;(2)根据线性方程求解方法的不同给出多种正则化参数的计算方法,其中包括截断奇异值正则化方

法、L—曲线法、广义交叉验证法 (GCV)、变阻尼共轭梯度法等。在稳定化泛函的构造方面,给出了一阶和二阶 Tikhonov 稳定化泛函,可将其作用于模型参数或模型参数修正量。在施加约束方面,如果事先了解工区局部区域待反演物性参数的准确值、整个工区物性参数的背景值及上下界限值,都可将其作为反演的约束,以提高反演的分辨率和稳定性。在修正迭代步长方面,由于在反演迭代过程中,存在修正过量的问题,进而通过增加一次或两次正演的计算量,以一维搜索或插值的方式给出较优的修正步长,可增强反演过程的稳定性。通过正则化技术改善线性反演方程的病态特征,抑制反演过程的不稳定性,最终达到提高反演分辨率的目的。

三、考虑到在地球物理勘探过程中,由于受非高斯噪音的影响,使采集的数据含有突变噪音,如果仍然采用基于最小二乘准则的广义线性反演方法进行反演,将会造成反演假象,进而导致错误解释。因此,在第三章中,笔者提出了混合范数的最优化方法,即根据观测数据品质的优劣,对数据空间和模型空间分别采用不同的范数进行测度,达到压制干扰突出有用异常的目的,最终使反演结果能够更真实的反映地下介质情况。由于混合范数的引入,增加了线性反演方程的复杂性,对其求解更加困难。因此,通过对加权矩阵进行规范化,并采用混合范数下迭代再加权阻尼共轭梯度算法进行求解,使得问题得到解决。最后,通过对含有和不含有猝发噪音的模拟电阻率数据进行反演对比,验证了混合范数下最优化反演方法的可行性和有效性。

四、从最小二乘广义线性反演的角度,探讨了直流激电数据的广义线性反演方法;在偏导数矩阵的计算过程中,通过将互换原理与 Broyden 拟牛顿技术相结合,可大大提高反演的运算速度。对三种观测方式的直流激电数据反演中所涉及到的一些技术问题加以解决和完善。对于垂直激电测深 (VES) 二维反演,主要从正反演所采用的双网格系统、正演模拟的误差校正以及反演中初始模型的给定三个方面进行探讨如何提高正演的精度和反演的分辨率;对于电阻率最小二乘间歇反演,提出了一种同时反演所有不同时刻观测数据的新方法,即通过一次反演过程来获得所有不同时刻的地下模型。在反演过程中,引入时间和空间稳定化泛函,通过将前期所有观测数据的反演结果作为后期数据反演的约束,进而可将不同时刻的观测数据联系起来,使得所有信息得到充分利用,可极大的提高反演的分辨率和减少反演的多解性;对于复杂条件下的三维直流激电数据反演,可以说它是一个复杂的系统工程,要涉及到多个重要环节,如起伏地表大量网格节点的高程插值、地下介质的网格剖分、正演中刚度矩阵元素的存储及其方程的求解以及正、反演的计算精度和效率问题。笔者对这些问题逐一进行了研究,使三维直

流激电反演中所涉及的一些技术问题得到进一步完善。最后,对起伏地形条件下的三维直流激电数据进行反演,验证方法的有效性。

五、由于地球物理反问题大多都具有多参数、非线性的特点,反演过程中的所依据的目标函数含有多个局部极值。线性或拟线性反演方法往往得到的只是局部最优解,并且反演结果常常与初始模型有关,如果初始模型选择的合适,它可以得到较好的结果,反之,还有可能造成反演的假象。而以随机过程为基础的全局最优化反演方法不受确定规则的限制,自由的在模型空间内随机搜索,这种较强的搜索能力能够保证反演结果基本上是全球最优或次最优解。因此,在第五章中,主要对非线性全局最优化方法中的模拟退火算法和遗传算法进行研究。在模拟退火算法方面,首先简单介绍模拟退火算法的发展概况;接着从模拟退火算法的物理背景、Metropolis 接受准则以及冷却进度表的选择三方面探讨了模拟退火算法的基本理论;然后给出了常规模拟退火算法的实现步骤;最后,考虑到模拟退火法在应用中往往只能得到次优解而不是最优解,因此笔者将模拟退火法和局部优化方法(如单纯形法和鲍尔方向法)有机的结合起来,使得相结合的两种方法能够起到取长补短的作用,最终达到提高算法的整体优化性能。在遗传算法方面,首先简单介绍遗传算法的发展概况;接着从模式定理、隐含并行性、积木块假设三个方面介绍遗传算法的理论基础;然后从选择、交叉和变异三个步骤介绍了遗传算法的基本思想,并给出了遗传算法的实现技术和改进措施。接着探讨了遗传算法与其它全局和局部优化方法相结合的混合反演方法,以提高遗传算法的全局和局部寻优性能,并给出结合方式。最后通过对直流激电测深曲线进行反演,验证非线性混合反演方法的可行性和有效性。

六、在第六章中,对本文工作进行了总结,并指出今后的进一步工作。

第二章 最小二乘广义线性反演及正则化技术

自从地球物理这个行业诞生以来,地球物理学家就一直致力于求解反演问题。在地球物理勘探中,解释人员总是基于地面(或井中)观测到的数据(如地震记录或势场记录)来推断地下特性,他们事先在头脑中形成一个粗糙的反映地面记录形成过程的模型,解释时通过这个粗糙的模型和实际观测到的地面记录来重构地下特性。按现代的说法,这种根据观测数据推断地下特性的工作就是求解所谓的“反演问题”。从数学的角度讲,假设地球物理反演问题是以泛函方程组的形式给出的,离散化后便得到某种类型的非线性方程组。由于地球物理数据的有限性和不精确性,涉及的方程组常常不存在精确的唯一解,或者不能用稳定收敛的数值方法求得精确解,这时我们只能根据某种准则(如线性化、Tikhonov 正则化)求出反问题的一个可以接受的解估计。我们把这种情况下反问题的求解方法统称为广义反演方法,它是现代数值分析方法和 BG 反演理论相结合的产物,或者说是在离散地球模型的情况下 BG 反演理论的简化和应用。而广义线性反演是利用泰勒级数展开把非线性问题线性化的广义反演方法^[1],它作为地球物理反演的一个重要分支,是目前发展较早并且在理论和应用上较成熟的方法之一。

下面将在简单阐述最小二乘广义线性反演方法的基础上,着重探讨不适定问题的正则化技术。

2.1 最小二乘广义线性反演

2.1.1 最小二乘法的应用条件

最小二乘法是基于以数据拟合差的 l_2 范数取极小为准则的一类方法,是数据处理和反演中最常使用的数值计算方法。但是,对它的应用也要具备一定的前提条件,本节将从概率的角度出发给出其应用条件。

设 d_i 为服从高斯分布的某个观测数据, \bar{d} 和 σ^2 为它的均值和方差,则此数据的概率函数为^[1]

$$P(d_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left[-\frac{(d_i - \bar{d})^2}{2\sigma^2}\right], \quad (2.1-1)$$

如果假定数据集中所有数据的均值和方差都分别为 \bar{d} 和 σ^2 ,由于 n 个互不相关的数据的联合概率分布等于 n 个独立的高斯分布的概率的乘积,则数据向量 d 的联合概率分布为

$$P(d) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left[-\frac{(d_i - \bar{d})^2}{2\sigma^2}\right]$$

$$= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \right)^n \exp \left[-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (d_i - \bar{d})^2 \right], \quad (2.1-2)$$

根据极大似然的思想, 对 $\ln P(\mathbf{d})$ 取极大, 代入 (2.1-2) 便等效于对

$$\Phi = \sum_{i=1}^n (d_i - \bar{d})^2 \quad (2.1-3)$$

求极小, 这就是最小二乘准则。因此, 最小二乘法的应用条件就是数据服从高斯分布。地球物理测量的数据大都是服从高斯分布的, 而在观测时, 由于受各种干扰因素的影响, 总存在少量的“坏”数据, 它们的存在说明数据并不完全服从高斯分布的统计性质。在反演之前最好将其剔除掉, 否则可能会造成反演的不稳定性以及反演结果的假象。

2.1.2 最小二乘线性反演方程

在地球物理反问题中, 假定数据服从高斯分布, 则在最小二乘意义下构造的目标函数为

$$\Phi(\mathbf{m}) = \|\mathbf{d}_s - \mathbf{d}_m(\mathbf{m})\|_2^2, \quad (2.1-4)$$

其中 \mathbf{d}_s 为实测数据向量; $\mathbf{d}_m(\mathbf{m})$ 为模拟数据向量, 它也是模型和数据之间满足某种关系的多元非线性函数。然后将非线性函数 $\mathbf{d}_m(\mathbf{m})$ 在 \mathbf{m}_0 的邻域内经泰勒级数展开, 并略去二次以上的项, 可近似为

$$\mathbf{d}_m(\mathbf{m}) \approx \mathbf{d}_m(\mathbf{m}_0) + \mathbf{d}'_m(\mathbf{m}_0)(\mathbf{m} - \mathbf{m}_0) = \mathbf{d}_m(\mathbf{m}_0) + \mathbf{d}'_m(\mathbf{m}_0)\Delta\mathbf{m}, \quad (2.1-5)$$

并将其代入 (2.1-4) 中, 有

$$\Phi(\mathbf{m}) = \|\mathbf{d}_s - \mathbf{d}_m(\mathbf{m})\|_2^2 \approx \|\mathbf{d}_s - \mathbf{d}_m(\mathbf{m}_0) - \mathbf{d}'_m(\mathbf{m}_0)\Delta\mathbf{m}\|_2^2, \quad (2.1-6)$$

然后根据多元函数的极值理论, 令 $\partial\Phi(\mathbf{m})/\partial\mathbf{m} = 0$, 有

$$\frac{\partial\Phi(\mathbf{m})}{\partial\mathbf{m}} \approx -\mathbf{d}'_m(\mathbf{m}_0)^T [\mathbf{d}_s - \mathbf{d}_m(\mathbf{m}_0) - \mathbf{d}'_m(\mathbf{m}_0)\Delta\mathbf{m}] = 0, \quad (2.1-7)$$

令 $\mathbf{A} = \mathbf{d}'_m(\mathbf{m}_0)$ 为偏导数矩阵或灵敏度矩阵; $\Delta\mathbf{d} = \mathbf{d}_s - \mathbf{d}_m(\mathbf{m}_0)$ 为数据残差向量, 最终, 可将 (2.1-7) 式整理为

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} \Delta\mathbf{m} = \mathbf{A}^T \Delta\mathbf{d}, \quad (2.1-8)$$

这就是在最小二乘意义下将非线性反问题经线性化得到的反演方程。由于采用了将非线性问题的线性化过程, 反演必须经过多次迭代来更新模型参数

$$\mathbf{m}^{(k)} = \mathbf{m}^{(k-1)} + \Delta\mathbf{m}^{(k-1)}, \quad (2.1-9)$$

才能使得解估计 $\mathbf{m}^{(k)}$ 不断逼近真解 \mathbf{m}^* 。经多次反演迭代, 当前后两次迭代的数据拟合差满足 $|\Phi^{(k)} - \Phi^{(k-1)}| < \varepsilon$ 时, 反演迭代中止。

最小二乘线性反演并不象我们想象的那样, 经过多次迭代能够稳步收敛到最优解。由于偏导数矩阵是严重病态的, 从最小二乘线性反演方程 (2.1-8) 求的解存在较大的误差, 由于误差传播与不断积累, 可能使解估计更加远离最优解, 从而使迭代发散。由于最小二乘法反演的不稳定性, 因而没有实用价值, 但是它的最优化思想是恰当的, 而且它的迭代步长大, 所以只要改善了稳定性, 就可成为

一种优秀的最优化方法。

从下一节开始,将探讨通过引入不同的正则化技术来改善最小二乘反演的稳定性,以改善解估计。

2.2 不适定问题的正则化

2.2.1 正则化的基本概念

数学上的不适定问题是 J. Hadamard 在研究偏微分方程解的稳定性时提出来的。对于给定的偏微分方程和定解条件,定解问题中解的存在性、唯一性和稳定性是理论上的三个基本问题。如果偏微分方程的定解问题满足解的存在性、唯一性和稳定性三个基本要求,那么,就将这三个基本特性统称为定解问题的适定性。当给定的条件不满足上述三个适定条件中的任意一个的定解问题称为不适定问题^{[1][61]}。那么,所谓正则化就是将不适定问题转化为适定可解的问题。目前,常用的正则化方法主要有 Miller 正则化和 Tikhonov 正则化两大类,其中后者在理论上已发展成为较完善的理论体系^[61]。

2.2.2 正则化技术的重要思想

地球物理反演问题多数情况下都是多元、非线性函数的极值问题,经泰勒级数展开并略去二次以上的项后,得到的线性方程组往往是不适定的,易于造成反演过程的不稳定和解的非唯一性。一般情况下,根据 Tikhonov 正则化理论,反问题的正则化是对正则化了的泛函 $\Phi_d + \lambda\Phi_m$ 取极小^[61],其中 Φ_d 是度量数据拟合质量的泛函,它是与某些后验知识有关的; Φ_m 称为镇定化泛函,它起到压制奇异性的作用,也会带有降低分辨率的副作用。那么正则化因子 λ 在泛函 Φ_d 和 Φ_m 之间起到了一种微妙的协调关系。

为便于说明,这里以最小二乘意义下的正则化目标函数

$$\min_{\Delta\mathbf{m}} \Phi(\Delta\mathbf{m}) = \Phi_d(\Delta\mathbf{m}) + \lambda\Phi_m(\Delta\mathbf{m}) = \min_{\Delta\mathbf{m}} \left\{ \|\mathbf{A}\Delta\mathbf{m} - \mathbf{b}\|_2^2 + \lambda\|\mathbf{C}\Delta\mathbf{m}\|_2^2 \right\} \quad (2.2-1)$$

进行讨论,其中 \mathbf{b} 为数据残差向量; \mathbf{A} 为偏导数矩阵或灵敏度矩阵; $\Delta\mathbf{m}$ 为模型参数修正向量; λ 为正则化因子或阻尼因子; $\Phi_d(\Delta\mathbf{m})$ 为数据目标函数或数据拟合差泛函; $\Phi_m(\Delta\mathbf{m})$ 为模型目标函数或稳定化泛函; \mathbf{C} 为某种拟算子,它以微分、积分或矩阵的形式存在,并且与某些先验信息或先验解有关。对 $\Delta\mathbf{m}$ 取极小并令其等于零,那么,式(2.2-1)将为正则化条件下的最小二乘线性反演方程

$$(\mathbf{A}^T\mathbf{A} + \lambda\mathbf{C}^T\mathbf{C})\Delta\mathbf{m} = \mathbf{A}^T\mathbf{b} \quad (2.2-2)$$

当 \mathbf{C} 为单位矩阵时,式(2.2-2)则为通常意义下的阻尼最小二乘反演方程,它是标准(或零阶) Tikhonov 正则化的结果。在某种程度上,它与正则化的思想是不谋而合的,阻尼最小二乘法多以矩阵为处理对象,而正则化方法多以算子和泛函理论为处理对象。当采用 Tikhonov 正则化方法解决反问题的不适定性时,正则

化因子 λ 将在反演中起着关键性的作用。当 $\lambda \rightarrow 0$ 时,由于反演方程的奇异性,必然会增大解的方差,导致反演过程的不稳定,最终促成反演失败的命运。当 $\lambda \rightarrow \infty$ 时,解的光滑性和反演过程的稳定性最好,但是以严重降低解的分辨率为代价的。可见正则解是介于两种极端情况之间的一种折衷解。因此,选择正则化因子是否合理掌握着反演求解过程成功和失败的命运,决定着分辨率和模型方差这对不可调和的矛盾能否达到最佳折衷。自60年代Tikhonov正则化方法提出以来,尽管很多学者对正则化参数的选择进行了研究^{[1][61]},提出了一些正则化参数的选择方法,具有一定的理论价值。但在解决不同的反问题时,如何有效选择正则化参数仍然有待于进一步研究。

2.3 广义线性反演的正则化技术

在本节中,除探讨正则化因子的选择外,将从稳定化算子 C 的构造、对模型参数引入某种先验约束以及修正迭代步长等多个角度探讨如何将反演中的病态问题转化成良性问题,以改善反演的稳定性和提高反演的分辨率。

2.3.1 基于目标函数拟合差的正则化参数选择方法

地球物理反问题可归结为求解Tikhonov正则化下的目标函数的极小值问题

$$\Phi = \Phi_d + \lambda \Phi_m \quad (2.3-1)$$

其中 Φ 为总目标函数; Φ_d 为数据目标函数; Φ_m 为模型目标函数,使模型具有某种先验信息; λ 为正则化因子。在反演迭代的过程当中,随着反演迭代次数的增加,数据目标函数大体上呈下降趋势,而模型由反演之初的基本模型变为非基本模型,模型目标函数将会出现一种上升趋势。因此考虑以

$$\lambda^{(k)} = \frac{\Phi_d^{(k-1)}}{\Phi_d^{(k-1)} + \Phi_m^{(k-1)}} \quad (2.3-2)$$

作为第 k 次反演迭代的正则化因子^[63],无需人为的干涉,实现了正则化因子的自适应。但在反演过程中,由于受各种干扰因素的影响,上式给出的正则因子并不能始终保证数据拟合差

$$RMS = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \Delta d_i^2}{n}} \quad (2.3-3)$$

总是单调下降的(Δd_i 为观测数据和模拟数据之间的残差)。这主要由于 Φ_d 与 Φ_m 之间不会呈现良好的负变关系,那么,该自适应正则化因子不总是较优的。因此,在(2.3-2)中引入数据目标函数前后两次拟合差的比,则将其修正为

$$\lambda^{(k)} = \frac{\Phi_d^{(k-1)}}{\Phi_d^{(k-1)} + \Phi_m^{(k-1)}} \cdot \frac{\Phi_d^{(k-1)}}{\Phi_d^{(k-2)}} \quad (2.3-4)$$

从上式可以看出,当数据目标函数增大时,相当于在原有的基础上乘以一个大于

1 的数；当数据目标函数减小时，则乘以一个小于 1 的数。显然，这比原来的正则化因子更优一些。

2.3.2 基于线性方程求解的正则化参数选择方法

地球物理反问题多数都属于大型多元、非线性函数的极值问题，由于涉及到高阶偏导数矩阵的计算和存储。对于目前的计算机，还不能完全解决这个问题，所以也就不能用直接法对其进行求解，必须将非线性问题通过泰勒级数展开并略去二次以上的高次项，即通过线性化的手段将非线性问题转换成解方程组的问题，那么解方程方法的优劣直接影响到反演的结果。许多事实证明，有时候某个方法效果不好，并不是方法本身的缺陷，而是线性反演方程组的病态程度太高，用一般的解方程组的方法不能取得稳定合理的解所致。因此求解大型、超定且病态的方程组将成为反演所要研究的首要问题，特别是在求解电磁法的二维或三维反演问题时^{[64][65]}，解此类方程组是不可避免的。所以，在本节中，将针对目前在地球物理反演中比较流行的两种解方程组的方法——奇异值分解算法和共轭梯度算法，根据其自身的特点，探讨如何通过正则化来压制或消除方程组的奇异性，将病态问题转化成良性问题，进而增强反演过程的稳定性和健全性，以达到提高分辨率的目的。

一. 基于奇异值分解法的正则化参数选择

奇异值分解算法是反演过程中解病态线性方程组的最有效的方法之一，由于具有抗病态能力强的特点，在地球物理反演中占有重要的地位。著名数值计算学家 Forsythe 教授的话更直截了当^[64]：“我们还没有发现 SVD 失败的例子，除非你不正确的使用它”。而且奇异值分解算法已经在地球物理反演中取得了较好的应用^{[65][66]}。使用它的关键在于如何修改奇异值，恰当的修改奇异值可以达到增强方程组求解稳定性的目的。如果没有修改奇异值，那么奇异值分解算法将同其它任何直接法一样病态。故本节将着重探讨奇异值的修改技巧。

对于线性方程组

$$Ax = b \quad (2.3-5)$$

其中系数矩阵 $A \in R^{m \times n}$ ，并且 $m \geq n$ ；解向量 $x \in R^n$ ；右端项 $b \in R^m$ 。根据奇异值分解定理^[67]，矩阵 A 的奇异值分解为

$$A = USV^T = \sum_{i=1}^n u_i \sigma_i v_i^T \quad (2.3-6)$$

其中左矩阵 $U = (u_1, u_2, \dots, u_n)$ ，并且 $U \in R^{m \times n}$ ， $U^T U = I_n$ ， I_n 为单位矩阵；右矩阵 $V = (v_1, v_2, \dots, v_n)$ ，并且 $V \in R^{n \times n}$ ， $V^T V = I_n$ ；对角阵 $S = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$ ，并且奇异值 σ_i 以 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0$ 的递减顺序排列。则解向量 x 为

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^+ \cdot \mathbf{b} = \mathbf{V}^T \mathbf{S}^+ \mathbf{U} \cdot \mathbf{b} = \sum_{i=1}^{\text{rank}(A)} \frac{(\mathbf{u}_i, \mathbf{b})}{\sigma_i} \mathbf{v}_i \quad (2.3-7)$$

其中 \mathbf{A}^+ 为系数矩阵 \mathbf{A} 的广义逆, \mathbf{S}^+ 为对角阵 \mathbf{S} 的逆。从上式可以看出, 当奇异值 σ_i 随 i 的增加逐渐趋于零时, 或者说矩阵 \mathbf{A} 的条件数 σ_1/σ_n 很大时, 则 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 的求解问题则称为不适定问题。不适定问题并不意味着不可解, 而是指采用直接方法 (高斯消去法、LU 分解法等) 求得的解与真实解相差甚远。为使所求得的解能更好的逼近真解, 必须采用其它的手段进行处理来削弱小奇异值的影响。那么经正则化后, 解向量的表达式为

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^{\text{rank}(A)} f_i \frac{(\mathbf{u}_i, \mathbf{b})}{\sigma_i} \mathbf{v}_i \quad (2.3-8)$$

其中 f_i 为滤波函数。而对 SVD 法的正则化手段通常可分为两大类: Wiggins 零化小奇异值的方法和 Tikhonov 滤波正则化方法。下面将对其进行逐一探讨和性能评价。

1. Wiggins 零化小奇异值的方法

该方法采用的方式就是去掉很小的奇异值, 对系数矩阵 \mathbf{A} 进行降维处理。那么 (2.3-8) 式中滤波函数 f_i 可表示为

$$f_i = \begin{cases} 1 & i \leq k \\ 0 & i > k \end{cases}, \quad (2.3-9)$$

其中有效秩 $k \leq \text{rank}(A)$ 。而 k 又是如何取值可以达到方差和分辨率之间的最佳折衷呢? 从前面的分析可以知道, 方程求解的误差过大是由方程组的病态 (或者说条件数较大) 引起的。那么就可以通过降低矩阵的条件数

$$\frac{\sigma_1}{\sigma_n} = \text{cond}(A) > \text{cond}(B) \quad (2.3-10)$$

来确定有效秩 k , 这里假定条件数 $\text{cond}(B)$ 是矩阵 \mathbf{A} 经过良性处理后的条件数。从而可以确定小奇异值的门限值 σ_k , 可以表示为

$$\sigma_k = \frac{\sigma_1}{\text{cond}(B)} = \theta \cdot \sigma_1 > \sigma_n, \quad (2.3-11)$$

其中截止系数 $\theta = 1/\text{cond}(B)$, 通常在 $10^{-3} \sim 10^{-7}$ 范围内变化。当 $\sigma_i < \sigma_k$ 时, 则 $\sigma_i = 0$ 。那么解向量

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^k \frac{(\mathbf{u}_i, \mathbf{b})}{\sigma_i} \mathbf{v}_i. \quad (2.3-12)$$

上述确定有效秩 k 的方法仅仅利用了最大奇异值的信息。接下来将利用所有的奇异值的信息确定有效秩 k , 即利用有效秩奇异值的和与所有奇异值的和的比 γ (如选择 0.95 ~ 0.99) 来确定有效秩 k , 那么 γ 可以表示为

$$\gamma = \frac{\sum_{i=1}^k \sigma_i}{\sum_{i=1}^{\text{rank}(A)} \sigma_i}. \quad (2.3-13)$$

利用此方法确定了有效秩 k 后, 然后再用 (2.3-12) 式求得解向量。

Wiggins 方法在处理奇异值时, 将小的奇异值及对应的特征向量删除, 实际上是消除了模型参数中的不可靠成分, 以此减少解估计的方差。但这样做同时也是以损失解估计的分辨率为代价的。当奇异值曲线呈阶梯状时, Wiggins 方法是比较合适的, 因为这时确定成分和不可靠成分差别很大, 消除掉不确定成分对解估计的影响不大^[1]。

2. Tikhonov 滤波正则化方法

该方法是在矩阵的对角线上加上正则化因子 λ 来削弱矩阵的奇异性 (即采用零阶 Tikhonov 正则化方式)。那么 (2.3-8) 式中滤波函数 f_i 可表示为^[67]

$$f_i = \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2}, \quad (2.3-13)$$

而对于一阶或二阶 Tikhonov 正则化方式, 滤波函数 f_i 可表示为^[68]

$$f_i = \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \mu_i^2 \lambda^2} = \frac{\gamma_i^2}{\gamma_i^2 + \lambda^2}, \quad (2.3-14)$$

其中 $\gamma_i = \sigma_i / \mu_i$; μ_i 为一阶或二阶 Tikhonov 稳定化矩阵分解后的第 i 奇异值。从 (2.3-13) 和 (2.3-14) 式可以看出, 当 $\sigma_i \gg \lambda$ 或 $\gamma_i \gg \lambda$ 时, $f_i \approx 1$; 当 $\sigma_i \ll \lambda$ 或 $\gamma_i \ll \lambda$ 时, $f_i \approx 0$ 。通过改变 λ 的值, 滤波系数 f_i 则从 0 到 1 光滑变化。如果给定合理的正则化因子 λ , 则可将较小的奇异值压制掉。下面将给出两种“最优”正则化参数 λ 的给定方法——广义交叉验证法和 L-曲线法。

(1) 广义交叉验证法

Golub^[69] (1979) 提出了广义交叉验证 (generalized cross-validation, 简称 GCV) 方法用于估计正则化参数。其思想来源于统计学, 当在数据项 \mathbf{b} 中去掉一个分量 b_i 后, 则由此产生的新模型解也能较好的预测 \mathbf{b} 中被去掉的那一分量 b_i 。基于这一思想, Golub 给出了关于参数 λ 的广义交叉验证函数

$$GCV(\lambda) = \frac{\|b - Ax_i\|_2^2}{(\text{tr}(I - A(AA^T + \lambda^2 I)^{-1} A^T))^2}, \quad (2.3-15)$$

其中 tr 表示方阵的迹, 即方阵对角线各元素的和。利用广义交叉验证方法确定“最优”的正则化参数 λ , 也就是寻找使 $GCV(\lambda)$ 函数达到极小时的 λ 值。从 (2.3-15) 式中我们可以看出, 分子为正则解的残差, 比较容易计算。而方阵的迹采用直接方法进行计算是比较困难的, 主要是计算量比较大, 而根据矩阵 A 的奇异值分解形式 (2.3-6), 可方便的求出迹估计^[70]

$$\text{tr}(I - A(AA^T + \lambda^2 I)^{-1} A^T) = m - n + \sum_{i=1}^n \frac{\lambda^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2}, \quad (2.3-16)$$

通过给定一系列的 λ 值, 将 $GCV(\lambda)$ 函数取极小时的 λ 值作为“最优”的正则化参数。但该方法有时并不像我们想象的那样理想, 在许多实际问题中, GCV 函数在达到极小点时过于平坦, 难于确定哪一点为最小值点。而且当数据中的噪声

相关时，这一方法求得的正则化参数往往并不理想^[71]。

(2)L—曲线法

所谓 L—曲线是指以 $(\ln\|x_\lambda\|_2, \ln\|b - Ax_\lambda\|_2)$ 为点坐标，在直角坐标系中所构成的曲线图，如图 2.1。其中 $\|x_\lambda\|_2$ 为正则化解的范数， $\|b - Ax_\lambda\|_2$ 为正则化解的残差范数。由于该曲线的形状比较象字母 L，故命名 L—曲线法^[71]。利用该曲线可以有效的确定出较优的正则化参数，将不适定问题转化为适定问题进行求解，进而使模型方差和分辨率之间达到最佳折衷。根据 Tikhonov 正则化形式，当正则化因子 λ 变大时，相当于给解的范数加较大的权，那么求得的正则解的范数 $\|x_\lambda\|_2$ 变小，相应的拟合残差 $\|b - Ax_\lambda\|_2$ 变大；反之， $\|x_\lambda\|_2$ 变大，拟合残差 $\|b - Ax_\lambda\|_2$ 变小，如图 2.1。我们从图上可以看出，在曲线的拐角处两个量达到较好的平衡。而且 Hassen 利用矩阵 A 的奇异值分解技术，在理论上证明了“拐角”处的点是解范数和残差范数之间的最佳平衡点，并且在该平衡点处的曲率最大，如图 2.2。下面将讨论如何根据 L—曲线确定正则化参数的问题。

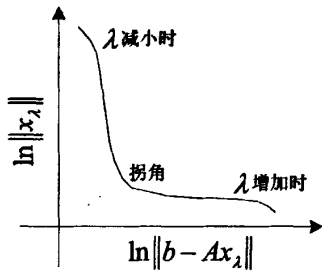


图 2.1 L—曲线

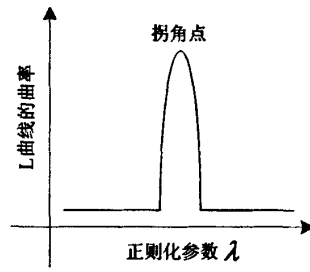


图 2.2 L—曲线的曲率

首先假定

$$\eta = \|x_\lambda\|_2^2, \rho = \|b - Ax_\lambda\|_2^2, \tag{2.3-17}$$

并且 $\hat{\eta} = \ln \eta, \hat{\rho} = \ln \rho$ ，那么 L—曲线是以 $(\hat{\rho}/2, \hat{\eta}/2)$ 为坐标的曲线。进而 L—曲线的曲率 $k(\lambda)$ 可以表示为

$$k(\lambda) = 2 \frac{\hat{\rho}'\hat{\eta}'' - \hat{\rho}''\hat{\eta}'}{[(\hat{\rho}')^2 + (\hat{\eta}')^2]^{3/2}}, \tag{2.3-18}$$

其中 $\hat{\eta}'$ 和 $\hat{\rho}'$ 分别表示 $\hat{\eta}$ 和 $\hat{\rho}$ 的一阶导数； $\hat{\eta}''$ 和 $\hat{\rho}''$ 分别表示 $\hat{\eta}$ 和 $\hat{\rho}$ 的二阶导数；接着分别将 $\hat{\eta}$ 和 $\hat{\rho}$ 对正则化参数 λ 求一阶导，得

$$\hat{\eta}' = \frac{\eta'}{\eta}, \hat{\rho}' = \frac{\rho'}{\rho}, \tag{2.3-19}$$

根据公式(2.3-8)可给出 η 和 ρ 的一阶导数

$$\eta' = \frac{4}{\lambda} \sum_{i=1}^n (1 - f_i) f_i^2 \frac{\beta_i^2}{\sigma_i^2}, \rho' = -\frac{4}{\lambda} \sum_{i=1}^n (1 - f_i)^2 f_i \beta_i^2, \tag{2.3-20}$$

其中 $\beta_i = u_i^T b$ 为付氏系数; $f_i = \sigma_i^2 / (\sigma_i^2 + \lambda^2)$ 为正则化方法的滤波因子。并且应用

$$\frac{f_i}{\sigma_i^2} = \frac{1}{\sigma_i^2 + \lambda^2} = \frac{1 - f_i}{\lambda^2}, \quad (2.3-21)$$

有 $\rho' = -\lambda^2 \eta'$ 成立。接着再给出 $\hat{\eta}$ 和 $\hat{\rho}$ 对正则化参数 λ 的二阶导数

$$\hat{\eta}'' = \frac{d}{d\lambda} \frac{\eta'}{\eta} = \frac{\eta'' \eta - (\eta')^2}{\eta^2}, \quad \hat{\rho}'' = \frac{d}{d\lambda} \frac{\rho'}{\rho} = \frac{\rho'' \rho - (\rho')^2}{\rho^2}, \quad (2.3-22)$$

考虑到 $\rho' = -\lambda^2 \eta'$, 则

$$\rho'' = \frac{d}{d\lambda} (-\lambda^2 \eta') = -2\lambda \eta' - \lambda^2 \eta'', \quad (2.3-23)$$

接着将 $\hat{\eta}'$ 、 $\hat{\rho}'$ 、 $\hat{\eta}''$ 和 $\hat{\rho}''$ 的表达式代入(2.3-18)式, 便得到曲率的计算公式

$$k(\lambda) = 2 \frac{\eta \rho}{\eta'} \frac{\lambda^2 \eta' \rho + 2\lambda \eta \rho + \lambda^4 \eta \eta'}{(\lambda^2 \eta^2 + \rho^2)^{3/2}}, \quad (2.3-24)$$

最后, 由(2.3-24)式可计算出曲率最大点处的正则化参数 λ 。通过上面的推导我们可以发现, 在求解反问题时, 如果采用 Tikhonov 滤波正则化方法, 并且在正则化过程中已经对系数矩阵 A 进行了的奇异值分解, 那么, 用 L-曲线法确定正则化参数是比较有效的。但是对于正则化参数不连续的情况, 计算出的 L-曲线通常不是光滑的单调下降曲线, 故 Hansen 建议首先给出几个正则化参数, 然后根据这几个已知点的情况, 采用三次样条来拟合 L-曲线, 并求出该拟合曲线的曲率最大点, 即得“最佳”正则化参数。由于需要拟合 L-曲线, 当选取较多的参数点时, 曲线拟合较精确, 但是以增加计算量为代价的; 当取较少的参数点时, 勾勒的 L-曲线需要插值, 此时所勾勒的 L-曲线的曲率最大值不一定准确。

广义交叉验证法和 L-曲线法属于自适应确定正则化参数的方法, 由于计算过程涉及到特征值, 因此它们比较适合基于奇异值分解法求解线性反演方程的正则化过程, 但不足的是奇异值分解法所需要的计算量比较大, 所以它不适合求解大型线性反演程。但可作为求解小规模反问题首选方法。

二. 基于共轭梯度法的正则化参数选择

共轭梯度法是 Hestenes 和 Stiefel (1952) 提出来解线性方程组的方法。由于解线性方程组等价于极小化一个正定二次函数, 故 1964 年 Fletcher 和 Reeves 提出了无约束极小化的共轭梯度法。共轭梯度法是使得最速下降方向具有共轭性, 从而提高算法的有效性和可靠性^[72]。对于线性方程组 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 的经典的共轭梯度算法的递推过程为

$$\mathbf{a}_j = (\mathbf{g}^{(j)}, \mathbf{g}^{(j)}) / (\mathbf{p}^{(j)}, A\mathbf{p}^{(j)}); \quad (2.3-25)$$

$$\mathbf{x}^{(j+1)} = \mathbf{x}^{(j)} + \mathbf{a}_j \mathbf{p}^{(j)}; \quad (2.3-26)$$

$$\mathbf{g}^{(j+1)} = \mathbf{g}^{(j)} - \mathbf{a}_j A\mathbf{p}^{(j)}; \quad (2.3-27)$$

$$\beta_{j+1} = (\mathbf{g}^{(j+1)}, \mathbf{g}^{(j+1)}) / (\mathbf{g}^{(j)}, \mathbf{g}^{(j)}); \quad (2.3-28)$$

$$\mathbf{p}^{(j+1)} = \mathbf{g}^{(j+1)} + \beta_{j+1} \mathbf{p}^{(j)}; \quad (2.3-29)$$

其中 \mathbf{A} 为对称正定矩阵; \mathbf{x} 为解向量; \mathbf{b} 为数据向量; j 为迭代序号; \mathbf{g} 和 \mathbf{p} 分别为梯度向量和共轭方向向量; a_j 和 β_{j+1} 为标量, 分别表示 \mathbf{x} 和 \mathbf{p} 的修正因子。

当 $j=0$ 时

$$\mathbf{g}^{(0)} = \mathbf{p}^{(0)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(0)}, \quad (2.3-30)$$

其中 $\mathbf{x}^{(0)}$ 为解向量的初始估计, 可以为零向量

在地球物理反演过程中, 线性方程组 $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 多为病态矛盾方程组, 将其零阶 Tikhonov 正则化后的方程为

$$(\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \mathbf{I} \cdot \boldsymbol{\lambda}) \mathbf{x} = \mathbf{A}^T \mathbf{b}, \quad (2.3-31)$$

其中 \mathbf{I} 为单位矩阵; $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N)$ 为阻尼因子向量, $\lambda_i > 0$, ($i=1, 2, \dots, N$)。为避免矩阵直接相乘增加计算量或丢掉有用信息, 故根据 (2.3-25) ~ (2.3-30) 导出求解方程 (2.3-31) 的共轭梯度算法的递推过程^[73]:

根据

$$(\mathbf{p}^{(j)}, (\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \mathbf{I} \cdot \boldsymbol{\lambda}) \mathbf{p}^{(j)}) = (\mathbf{A}\mathbf{p}^{(j)}, \mathbf{A}\mathbf{p}^{(j)}) + (\mathbf{p}^{(j)}, \mathbf{I} \cdot \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{p}^{(j)}) \quad (2.3-32)$$

及

$$\mathbf{g}^{(j)} = \mathbf{A}^T \mathbf{b} - (\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \mathbf{I} \cdot \boldsymbol{\lambda}) \mathbf{x}^{(j)} = \mathbf{A}^T (\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(j)}) - \mathbf{I} \cdot \boldsymbol{\lambda} \mathbf{x}^{(j)},$$

再根据 $\mathbf{x}^{(j+1)} = \mathbf{x}^{(j)} + a_j \mathbf{p}^{(j)}$, 并设 $\mathbf{y}^{(j)} = \mathbf{I} \cdot \boldsymbol{\lambda} \mathbf{x}^{(j)}$, 上式有

$$\mathbf{g}^{(j)} = \mathbf{A}^T (\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(j-1)} - a_{j-1} \mathbf{A}\mathbf{p}^{(j-1)}) - \mathbf{y}^{(j)}.$$

$$\text{令} \quad \begin{cases} \mathbf{h}^{(0)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(0)} \\ \mathbf{h}^{(j)} = \mathbf{h}^{(j-1)} - a_{j-1} \mathbf{A}\mathbf{p}^{(j-1)} \end{cases} \quad j \geq 1 \quad (2.3-33)$$

$$\text{则} \quad \mathbf{g}^{(j)} = \mathbf{A}^T \mathbf{h}^{(j)} - \mathbf{y}^{(j)}. \quad (2.3-34)$$

综合 (2.3-32) ~ (2.3-34) 式, 可以得到求解法方程 (2.3-31) 的共轭梯度递推算

法:

$$a_j = (\mathbf{g}^{(j)}, \mathbf{g}^{(j)}) / [(\mathbf{A}\mathbf{p}^{(j)}, \mathbf{A}\mathbf{p}^{(j)}) + (\mathbf{p}^{(j)}, \mathbf{I} \cdot \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{p}^{(j)})]; \quad (2.3-35)$$

$$\mathbf{x}^{(j+1)} = \mathbf{x}^{(j)} + a_j \mathbf{p}^{(j)}; \quad (2.3-36)$$

$$\mathbf{h}^{(j+1)} = \mathbf{h}^{(j)} - a_j \mathbf{A}\mathbf{p}^{(j)}; \quad (2.3-37)$$

$$\mathbf{g}^{(j+1)} = \mathbf{A}^T \mathbf{h}^{(j+1)} - \mathbf{y}^{(j)}; \quad (2.3-38)$$

$$\beta_{j+1} = (\mathbf{g}^{(j+1)}, \mathbf{g}^{(j+1)}) / (\mathbf{g}^{(j)}, \mathbf{g}^{(j)}); \quad (2.3-39)$$

$$\mathbf{p}^{(j+1)} = \mathbf{g}^{(j+1)} + \beta_{j+1} \mathbf{p}^{(j)}. \quad (2.3-40)$$

假设初始解向量 $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{0}$, 并且当 $j=0$ 时

$$\begin{cases} \mathbf{h}^{(0)} = \mathbf{b} \\ \mathbf{g}^{(0)} = \mathbf{p}^{(0)} = \mathbf{A}^T \mathbf{h}^{(0)} \end{cases} \quad (2.3-41)$$

利用 (2.3-35) ~ (2.3-40) 式的递推过程即可求解方程组 (2.3-31)。

对于非零阶 Tikhonov 正则化方程

$$(\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \lambda \mathbf{C}^T \mathbf{C}) \mathbf{x} = \mathbf{A}^T \mathbf{b}, \quad (2.3-42)$$

其中 \mathbf{C} 为非零阶 Tikhonov 稳定化矩阵。根据上述推导过程, 同理, 可直接给出

求解方程(2.3-42)共轭梯度算法的递推过程:

假设初始解向量 $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{0}$, 并且当 $j=0$ 时

$$\begin{cases} \mathbf{h}^{(0)} = \mathbf{b} \\ \mathbf{g}^{(0)} = \mathbf{p}^{(0)} = \mathbf{A}^T \mathbf{h}^{(0)} \end{cases} \quad (2.3-43)$$

对于 $j=0,1,\dots$, 直到 $\|\mathbf{g}^{(j)}\| \leq \varepsilon$ 终止迭代。

$$a_j = (\mathbf{g}^{(j)}, \mathbf{g}^{(j)}) / [(\mathbf{A}\mathbf{p}^{(j)}, \mathbf{A}\mathbf{p}^{(j)}) + (\mathbf{C}\mathbf{p}^{(j)}, \lambda\mathbf{C}\mathbf{p}^{(j)})]; \quad (2.3-44)$$

$$\mathbf{x}^{(j+1)} = \mathbf{x}^{(j)} + a_j \mathbf{p}^{(j)}; \quad (2.3-45)$$

$$\mathbf{h}^{(j+1)} = \mathbf{h}^{(j)} - a_j \mathbf{A}\mathbf{p}^{(j)}; \quad (2.3-46)$$

$$\mathbf{g}^{(j+1)} = \mathbf{A}^T \mathbf{h}^{(j+1)} - \lambda \mathbf{C}^T \mathbf{C} \mathbf{x}^{(j+1)}; \quad (2.3-47)$$

$$\beta_{j+1} = (\mathbf{g}^{(j+1)}, \mathbf{g}^{(j+1)}) / (\mathbf{g}^{(j)}, \mathbf{g}^{(j)}); \quad (2.3-48)$$

$$\mathbf{p}^{(j+1)} = \mathbf{g}^{(j+1)} + \beta_{j+1} \mathbf{p}^{(j)}; \quad (2.3-49)$$

利用(2.3-43)~(2.3-49)式的递推过程即可求解方程组(2.3-42)。

如果(2.3-31)和(2.3-42)式中的阻尼向量 λ 为常向量, 则该递推过程与传统的阻尼共轭梯度算法的递推过程相同; 如果阻尼向量 λ 的分量 λ_i 在解向量 \mathbf{x} 的每个分量方向上是逐点可变的, 那么, 上述递推过程就是变阻尼共轭梯度算法的递推过程。

接下来将探讨基于共轭梯度法的变阻尼给定方法。众所周知, 引入阻尼或正则化因子的目的是(1)保证反演过程能够稳步快速的收敛到全局最优解; (2)要确保反演结果能够最大限度的分辨小构造信息, 而不产生多余的虚假异常。那么选择合理的阻尼因子是达到上述目的的关键一步。首先回顾一下传统的固定阻尼因子的给定方法。它是在反演迭代的每一步, 给定一个固定不变的阻尼因子, 而解向量在各个分量方向上的收敛速度是不一样的, 为了保证每次反演迭代收敛, 必须先给定一个保守的阻尼因子, 也就是说给定一个相对较大的阻尼因子, 以保证反演收敛到最优解, 这必将影响整个反演过程的收敛速度。对于大多数反问题, 雅克比系数矩阵不仅随解决问题的不同而变化, 而且对于每次迭代还要发生变化, 所以固定阻尼方法将表现出很大的局限性。因此不得不考虑寻求一种好的阻尼因子的给定方法来解决此问题。

在地球物理反演过程中, 每迭代一步, 都要计算雅克比系数矩阵 \mathbf{A} , 它可以表示为如下形式

$$\mathbf{A} = \begin{Bmatrix} \partial f_1 / \partial x_1 & \partial f_1 / \partial x_2 & \cdots & \partial f_1 / \partial x_n \\ \partial f_2 / \partial x_1 & \partial f_2 / \partial x_2 & \cdots & \partial f_2 / \partial x_n \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \partial f_m / \partial x_1 & \partial f_m / \partial x_2 & \cdots & \partial f_m / \partial x_n \end{Bmatrix}_{m \times n}, \quad (2.3-50)$$

其中 $\partial f_i / \partial x_j$ 为模型函数 f_i 对解分量 x_j 的偏导数, 它的含义表示模型函数 f_i 在解分量 x_j 方向上的变化程度。而 $(\partial f_1 / \partial x_j, \partial f_2 / \partial x_j, \dots, \partial f_m / \partial x_j)^T$ 恰好是(2.3-50)

式的列向量，它的长度（或二范数）可表示式为

$$\|L\|_2^j = \left\{ \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right)^2 \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad (2.3-51)$$

实际上 $\|L\|_2^j$ 就是雅克比矩阵 A 的第 j 列的模，它的含义可表示为模型函数 $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ 在解分量 x_j 方向上的总变化率。 $\|L\|_2^j$ 的值越大，表示 x_j 的作用就越大，由于地球物理反问题在多数情况下，属于多元非线性函数的极值问题，因此为了避免非线性的影响，对 x_j 的限制就应该大一些，因此在 x_j 方向上的阻尼系数也要取的大一些。据此，可构造出变阻尼向量 $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ ，其中它的每个分量就是雅克比矩阵 A 的第 j 列的模，即

$$\lambda_j = \left\{ \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right)^2 \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad (2.3-52)$$

我们知道，随着迭代次数的增加，目标函数 φ 收敛的也越来越慢，故在每次迭代中要设置一个截止阻尼系数 λ_c ，当 $\lambda_j < \lambda_c$ 时，令 $\lambda_j = 0$ ，这样可以加快目标函数 φ 收敛速度^[74]。对于截止阻尼系数 λ_c ，可按如下方法给定：

$$\lambda_c = \frac{\bar{\lambda}}{K}, \quad \bar{\lambda} = \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i \right) / n, \quad (2.3-53)$$

其中 $\bar{\lambda}$ 为各阻尼分量 λ_i 和的平均值； K 为一常数序列，并随着迭代次数的增加而增大， K 值也逐渐增大。采用该算法对多种数据模型进行测试分析，反演过程都可以快速稳定的收敛到最优解。由于变阻尼共轭梯度算法本身具有很强的自适应性，它也是本文直流激电数据反演中主要采用的方法。

三. 两种算法的性能对比

现将上述奇异值分解方法和共轭梯度法的性能进行对比。下面用它们对病态程度较高的 Hilbert 矩阵构成的线性方程组进行求解，并在计算精度和计算效率上进行对比。Hilbert 矩阵 A 的元素和右端项元素分别为

$$a_{ij} = \frac{1}{i+j-1}, \quad b_i = \sum_{j=1}^m a_{ij}, \quad (2.3-54)$$

$i=1, 2, \dots, n$, $j=1, 2, \dots, m$ 分别表示矩阵的行号和列号。当求解没有误差时，所有的解都等于 1。由 A 作为系数矩阵所构成的线性方程组具有严重的病态特征。当矩阵 A 的阶数在 $10 \sim 100$ 变化时，其条件数高达 $10^8 \sim 10^9$ 数量级，可见病态程度相当严重^[74]。因此，可用它来检验两种方法对付病态问题的能力。图 2.3 显示了计算精度随方程阶数的变化关系对比，其中解向量 x 的均方误差 rms 定义为

$$rms = \sqrt{(1-x)^T(1-x)/n}, \quad (2.3-55)$$

从图中可以看出，虽然 CG 法比 SVD 法的求解精度略低，但数值解的平均均方误

差基本控制2%以内。我们知道反演是要经过多次迭代逐步逼近最优解的，因此CG法的求解精度完全可以满足要求。从计算时间对比图中可以看出，SVD法需要的计算时间较多，与方程的阶数近似呈指数递增，如图2.4。而CG法需要的计算时间很少，在奔四1.7GHz的PC机上解500阶的方程组仅需0.39s。

奇异值分解方法作为地球物理广义反演的一个重要工具，其优点主要有：它可以提供几个有用的辅助信息，即模型分辨矩阵、数据分辨矩阵和协方差矩阵，这些信息对我们加深对反演本质的理解和评价反演结果，都是有重要意义的。而不足之处就在于它的计算成本太高，计算过程中破坏了原始矩阵。在求解中小型反问题时，选择奇异值分解法还是比较有效的，而对于大型反问题（如电磁法的三维反演），它将受到限制。在地球物理反演迅速发展的今天，采用共轭梯度方法（包括阻尼共轭梯度法和预优共轭梯度法）求解大型反问题已经成为一种趋势。而且由于它计算速度快、精度高，并且计算过程中不破坏原始矩阵，以及保持系数矩阵的稀疏特征等优点，颇受地球物理工作者的青睐。对于直流激电二维或三维反演问题，求解线性反演方程组比较耗费机时，从计算效率和计算精度方面考虑选用变阻尼共轭梯度法解此类病态方程组是一种比较好的选择。

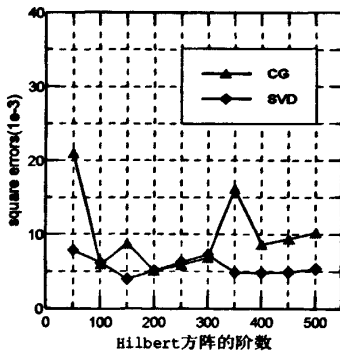


图 2.3 计算精度对比

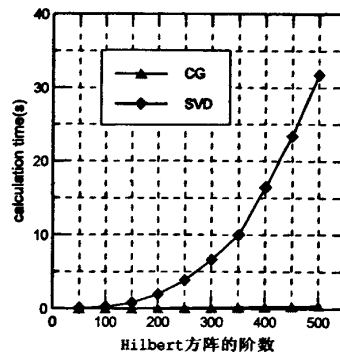


图 2.4 运算时间对比

2.3.3 基于吉鸿诺夫稳定化泛函的正则化方法

在地球物理反问题中，吉鸿诺夫（Tikhonov）正则化是正则化方法中最经典的一种形式，通过最小化目标函数

$$\Phi(\Delta \mathbf{m}) = \Phi_d(\Delta \mathbf{m}) + \lambda \Phi_m(\Delta \mathbf{m}) = \|A\Delta \mathbf{m} - \mathbf{b}\|_2^2 + \lambda \|C\Delta \mathbf{m}\|_2^2, \quad (2.3-56)$$

可得最小二乘意义下的正则解为：

$$\Delta \mathbf{m} = (A^T A + \lambda C^T C)^{-1} A^T \mathbf{b}, \quad (2.3-57)$$

其中 \mathbf{b} 为数据残差向量； A 为偏导数矩阵或灵敏度矩阵； \mathbf{x} 为模型参数修正向量； λ 为正则化因子； $\Phi_d(\Delta \mathbf{m})$ 为数据目标函数，或称为数据拟合差泛函； $\Phi_m(\Delta \mathbf{m})$ 为模型目标函数或稳定化泛函； C 为吉鸿诺夫稳定化算子，以微分、积分或矩阵形式给出，并且目标函数通常采用零阶、一阶和二阶 Tikhonov 正则化方式。当 $C = I$

(单位矩阵)时, 上式表示采用了零阶 Tikhonov 正则化方式; 当 $C = G$ (梯度算子)时, 上式表示采用了一阶 Tikhonov 正则化方式; 当 $C = L$ (拉普拉斯算子)时, 上式表示采用了二阶 Tikhonov 正则化方式。Tikhonov 正则化的阶数越高, 对解的平滑程度越高, 反演过程也越稳定。

在构造一阶和二阶吉鸿诺夫稳定化算子时, 为便于进行计算, 通常以网格节点间的模型参数或其修正量与节点间距的差商进行构造^[75]。对于一阶的情况, 仅相邻节点便可计算出一阶差商, 其矩阵形式的一阶稳定化算子 G 的元素定义为^[48]

$$G_{ij} = \begin{cases} -\frac{1}{r_{ij}} / \sum_{j=1}^k \frac{1}{r_{ij}} & \text{当 } j \text{ 为与 } i \text{ 相邻的节点号时} \\ 1 & \text{当 } j \text{ 等于 } i \text{ 时} \\ 0 & \text{当 } j \text{ 为其它节点号时} \end{cases}, \quad (2.3-58)$$

其中 k 为与 i 相邻的节点数; r_{ij} 为 i 与 j 节点间的距离。对于二阶的情况, 除相邻节点外, 还需要次相邻网格节点才能计算出二阶差商, 这就是它平滑度高的原因。其矩阵形式的二阶稳定化算子 L 的元素定义为

$$L_{ij} = \begin{cases} -\frac{1}{r_{ij}} / \sum_{j=1}^k \frac{1}{r_{ij}} & \text{当 } j \text{ 为与 } i \text{ 相邻和次相邻的节点号时} \\ 1 & \text{当 } j \text{ 等于 } i \text{ 时} \\ 0 & \text{当 } j \text{ 为其它节点号时} \end{cases}, \quad (2.3-59)$$

各参数的含义同上。

在反演过程中, 为使模型方差和分辨率之间达到较好的平衡, 除改变正则化参数和吉鸿诺夫稳定化算子外, 还可以改变模型目标函数的稳定化泛函 Φ_m 。当将算子 C 作用于模型参数的修正量时, 则 Φ_m 为

$$\Phi_m = \Phi_m(\Delta \mathbf{m}) = \|C \Delta \mathbf{m}\|_2^2, \quad (2.3-60)$$

它使每次迭代模型参数的修正量分片光滑, 而不能保证反演后的模型参数分片光滑。而将算子 C 作用于模型参数时, 则 Φ_m 为

$$\Phi_m = \Phi_m(\mathbf{m} + \Delta \mathbf{m}) = \|C(\mathbf{m} + \Delta \mathbf{m})\|_2^2, \quad (2.3-61)$$

它能保证反演后的模型参数也是分片光滑的。那么通过在模型目标函数中改变稳定化算子 C 的作用形式, 改变模型参数的光滑程度。

2.3.4 基于某种先验约束的正则化方法

地球物理反问题的多解性并不意味着地球物理反演工作没有意义。事实上, 只要观测数据可靠, 物理场的存在就反映了场源的存在。此外, 地球物理反演并不是单纯的数学过程, 它是在一定地球物理条件和地质条件下进行的, 人们对这些条件的认识作为反演的先验信息, 可以在很大程度上减少反演的多解性。在反演中, 可将模型参数的背景、取值范围以及源于钻孔或测井资料的已知属性值等

$$\Phi = \Phi_d + \lambda\Phi_m = \|A\Delta m - d\|_2^2 + \lambda \cdot \|F(m + \Delta m) - h\|_2^2, \quad (2.3-68)$$

对其取极小，令 $\partial\Phi/\partial\Delta m^T = 0$ 得

$$(A^T A + \lambda \cdot F) \Delta m = A^T d + \lambda(h - Fm), \quad (2.3-69)$$

该式即为施加了已知属性值约束的线性反演方程。通过对上述反演方程进行迭代求解，便可得到地下模型 m 。在有地质资料的情况下，在反演中施加已知属性值约束可以有效的提高最小二乘解估计的质量。这种约束方式通常称为硬约束或紧约束方式。

三. 对模型施加界限约束

我们知道，在地球物理勘探中，由观测到的地球物理场换算出的物性参数大部分都为正值，比如电阻率、速度等，在反演过程中也可将此作为一种约束进行反演，可有效的减少反演的多解性。下面以电阻率反演为例来说明如何引入界限约束。

假设用模型参数向量 m 表示电阻率向量 ρ 的对数，即 $m = \ln \rho$ 。在迭代过程中，以下式

$$m^k = m^{k-1} + \Delta m^{k-1}, \quad (2.3-70)$$

进行参数更新，则电阻率以

$$\rho^k = \rho^{k-1} \exp(\Delta m^{k-1}), \quad (2.3-71)$$

进行更新，这样总能保证电阻率为正数。

根据电阻率的对数总为正的思想，可以给定电阻率的下限 ρ_l ，则模型参数 $m = \ln(\rho - \rho_l)$ ，那么将其代入(2.3-70)式有

$$\ln(\rho^k - \rho_l) = \ln(\rho^{k-1} - \rho_l) + \ln[\exp(\Delta m^{k-1})], \quad (2.3-72)$$

经整理，有

$$\rho^k = \rho_l + (\rho^{k-1} - \rho_l) \exp(\Delta m^{k-1}), \quad (2.3-73)$$

这种引入下限的技术在磁法反演中也有涉及^[76]。当然，也可以对电阻率引入上限 ρ_u ，则模型参数 $m = \ln(\rho_u - \rho)$ ，那么电阻率的更新公式为

$$\rho^k = \rho_u - (\rho_u - \rho^{k-1}) \exp(\Delta m^{k-1}). \quad (2.3-74)$$

当同时引入上下限 ρ_l 和 ρ_u 约束时，则模型参数为

$$m = \ln\left(\frac{\rho_u - \rho}{\rho - \rho_l}\right), \quad (2.3-75)$$

那么，电阻率的更新公式为

$$\rho^k = \frac{\rho_u(\rho^{k-1} - \rho_l) + \rho_l(\rho_u - \rho^{k-1}) \exp(\Delta m^{k-1})}{\rho^{k-1} - \rho_l + (\rho_u - \rho^{k-1}) \exp(\Delta m^{k-1})}, \quad (2.3-76)$$

从上式可以看出，对于小对比度的电阻率反演，可能会给出相似的反演结果；而对于大对比度的电阻率反演，采用界限约束可以改善反演的稳定性和减少反演的

多解性。但在实际勘探过程中，物性参数的上下限并不容易给出。

2.3.5 基于修正迭代步长的正则化方法

在实测数据的反演过程中，由于受多方面因素的影响，即使正则化因子、稳定化泛函以及约束都做了较优的处理，我们依然不能保证每次反演迭代的数据拟合差总是下降的。这主要由于反问题的非线性程度较大，使得更新的模型参数越过极值点，向反方向前进。所以对每次迭代的步长进行修正是有必要的，特别是在前几次反演迭代过程。将模型参数的更新公式(2.1-9)修正为

$$m^k = m^{k-1} + \alpha \cdot \Delta m^{k-1}, \quad (2.3-77)$$

其中 α 为修正因子($0 < \alpha < 1$)，下面给出两种方案来确定修正因子 α 。

一. 三点二次插值法

考虑利用 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ 三点处的函数值 $\varphi(\alpha_1), \varphi(\alpha_2), \varphi(\alpha_3)$ 构造二次函数。要求插值条件满足^[72]

$$\begin{cases} a\alpha_1^2 + b\alpha_1 + c = \varphi(\alpha_1) \\ a\alpha_2^2 + b\alpha_2 + c = \varphi(\alpha_2), \\ a\alpha_3^2 + b\alpha_3 + c = \varphi(\alpha_3) \end{cases} \quad (2.3-78)$$

解上述方程组得

$$a = -\frac{(\alpha_2 - \alpha_3)\varphi_1 + (\alpha_3 - \alpha_1)\varphi_2 + (\alpha_1 - \alpha_2)\varphi_3}{(\alpha_1 - \alpha_2)(\alpha_2 - \alpha_3)(\alpha_3 - \alpha_1)}, \quad (2.3-79)$$

$$b = -\frac{(\alpha_2^2 - \alpha_3^2)\varphi_1 + (\alpha_3^2 - \alpha_1^2)\varphi_2 + (\alpha_1^2 - \alpha_2^2)\varphi_3}{(\alpha_1 - \alpha_2)(\alpha_2 - \alpha_3)(\alpha_3 - \alpha_1)}, \quad (2.3-80)$$

于是可算出极值点的修正步长 α

$$\alpha = -\frac{b}{2a} = \frac{1}{2} \frac{(\alpha_2^2 - \alpha_3^2)\varphi_1 + (\alpha_3^2 - \alpha_1^2)\varphi_2 + (\alpha_1^2 - \alpha_2^2)\varphi_3}{(\alpha_2 - \alpha_3)\varphi_1 + (\alpha_3 - \alpha_1)\varphi_2 + (\alpha_1 - \alpha_2)\varphi_3}, \quad (2.3-81)$$

在计算修正步长之前，首先要计算出 $m^{k-1} + \alpha_1 \cdot \Delta m^{k-1}$ ， $m^{k-1} + \alpha_2 \cdot \Delta m^{k-1}$ ， $m^{k-1} + \alpha_3 \cdot \Delta m^{k-1}$ 三点处的模拟与实测数据的拟合方差 $\varphi(\alpha_1), \varphi(\alpha_2), \varphi(\alpha_3)$ 。特别的取 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ 分别为0, 0.5和1，在 $\alpha_1 = 0$ 时， $\varphi(0)$ 已经在前一次反演迭代时计算出，再做两次额外的正演，计算出 $\varphi(0.5)$ 和 $\varphi(1)$ 。然后将 $\alpha_1 = 0, \alpha_2 = 0.5, \alpha_3 = 1$ 及其对应的函数值 $\varphi(0), \varphi(0.5), \varphi(1)$ 代入到(2.3-81)式中，便得到极值点处的修正因子 α 。

二. 0.618黄金分割搜索法

在上节中，要做两次额外正演计算才能算出迭代步长的修正因子。而在本节中，将再做一次额外正演，然后采用0.618黄金分割搜索法，搜索相对较好的修正因子。首先在 $\alpha = 1$ （即 $m^k = m^{k-1} + \Delta m^{k-1}$ ）处做一次正演，计算出正演值 $r(1)$ ， $\alpha = 0$ （即 $m^k = m^{k-1}$ ）处的正演结果 $r(0)$ 已经被计算出，可构造线性插值公式

$$r(\alpha) = ar(0) + (1-a)r(1), \quad (2.3-82)$$

其中 $r(\alpha)$ 为 α 处的正演值。接着, 便可得到拟合差函数

$$\varphi(a) = \sum [r - r(a)]^2, \quad (2.3-83)$$

其中 r 为观测数据。计算 $\varphi(0)$ 和 $\varphi(1)$, 那么, 就可以采用 0.618 法在 $\varphi(0)$ 和 $\varphi(1)$ 之间搜索使 $\varphi(a)$ 取得极小的 α 值。

0.618 法要求一维搜索的函数是单峰函数, 为避免非单峰函数的情况, Höpfinger(1976) 建议每次缩小区间时, 不要只比较两个内点处的函数值, 而是要比较两个内点和两个端点的函数值。当左边第一个或第二个点是这四个点中函数值最小的点时, 丢弃右端点, 构造新的搜索区间; 否则丢弃左端点, 构造新的搜索区间。经过这样修改, 算法更加可靠^[72]。具体搜索步骤如下

(1) 确定初始搜索区间 $[a_1, b_1]$ 和精度要求 $\delta > 0$, 在这里 $a_1 = 0$, $b_1 = 1$ 。然后计算两内点

$$\begin{cases} x_1 = a_1 + 0.382(b_1 - a_1) \\ y_1 = a_1 + 0.618(b_1 - a_1) \end{cases},$$

并计算函数值 $\varphi(a_1)$ 、 $\varphi(x_1)$ 、 $\varphi(y_1)$ 、 $\varphi(b_1)$ 。比较函数值, 令 $i=1$, $\varphi_i \leftarrow \min\{\varphi(a_i), \varphi(x_i), \varphi(y_i), \varphi(b_i)\}$ 。

(2) $\varphi \leftarrow \varphi_i$, 若 $t < 3$ (前两个函数值较小), 转步(4); 否则, 转步(3)。

(3) 若 $b_i - a_i < \delta$, 则停止计算, 输出修正因子 $\alpha \leftarrow y_i$ 。否则, 令

$$\begin{aligned} a_{i+1} &\leftarrow x_i, \quad x_{i+1} \leftarrow y_i, \quad b_{i+1} \leftarrow b_i, \\ \varphi(a_{i+1}) &\leftarrow \varphi(x_i), \quad \varphi(x_{i+1}) \leftarrow \varphi(y_i), \\ y_{i+1} &\leftarrow a_{i+1} + 0.618(b_{i+1} - a_{i+1}), \end{aligned}$$

计算 $\varphi(y_{i+1})$, $\varphi_i \leftarrow \min\{\varphi(a_{i+1}), \varphi(x_{i+1}), \varphi(y_{i+1}), \varphi(b_{i+1})\}$, $i \leftarrow i+1$ 转步(2)。

(4) 若 $b_i - a_i < \delta$, 则停止计算, 输出修正因子 $\alpha \leftarrow x_i$ 。否则, 令

$$\begin{aligned} a_{i+1} &\leftarrow a_i, \quad b_{i+1} \leftarrow y_i, \quad y_{i+1} \leftarrow x_i, \\ \varphi(b_{i+1}) &\leftarrow \varphi(y_i), \quad \varphi(y_{i+1}) \leftarrow \varphi(x_i), \\ x_{i+1} &\leftarrow a_{i+1} + 0.382(b_{i+1} - a_{i+1}), \end{aligned}$$

计算 $\varphi(x_{i+1})$, $\varphi_i \leftarrow \min\{\varphi(a_{i+1}), \varphi(x_{i+1}), \varphi(y_{i+1}), \varphi(b_{i+1})\}$, $i \leftarrow i+1$ 转步(2)。

经 i 次搜索, 找到相对较优的修正因子 α , 便可根据式(2.3-77)计算出下一次反演迭代的模型参数。在反演过程中, 前几次迭代模型参数的修正量较大, 引入修正迭代步长的正则化方式可以有效提高反演的稳定性。

本章小结

1、简要介绍了最小二乘法的应用条件，并建立了最小二乘线性反演方程。给出了正则化的概念及正则化技术的基本思想。从正则化参数的选择、稳定化泛函的构造、引入某种先验约束及修正迭代步长等几个方面探讨了广义线性反演的正则化技术。

2、在正则化参数的选择方面，主要从几个角度探讨自适应正则化参数的选择方法：(1)利用目标函数的拟合差确定正则化参数；(2)根据线性方程求解方法的不同给出多种正则化参数的计算方法，其中包括截断奇异值正则化方法、L—曲线法、广义交叉验证法(GCV)、变阻尼共轭梯度法等。

3、在稳定化泛函的构造方面，给出了一阶和二阶 Tikhonov 稳定化算子，将其作用于模型参数或模型参数修正量，可有效改善反演的稳定性。

4、在施加约束方面，如果事先了解工区局部区域待反演的物性参数值、整个工区物性参数的背景值及上下界限值，都可将其作为反演的约束，提高反演的分辨率和稳定性。

5、在修正迭代步长方面，由于在反演迭代过程中，存在修正过量的问题，进而通过增加一次或两次正演的计算量，采用一维搜索或插值的方式给出较优的修正步长，可增强反演过程的稳定性。

通过在反演中引入正则化技术，可有效抑制反演过程的不稳定性，最终能够达到提高反演分辨率的目的。

第三章 混合范数下的最优化反演方法

地球物理反演在地球物理数据处理中占有重要的地位,一些反演技术已被广泛的应用到地球物理数据处理当中,其中主要有基于最小二乘准则的线性反演方法(Oldenburg, O. W., 1974; Inman, 1975; Oristaglio, M.L. and Worthington, M.H., 1980; Gjoystdal, H. and Ursin, B., 1981)^[77-80]; 基于全局最优化的模拟退火方法(Sharma and Kaikonen, 1998)^[81]; 基因遗传方法(王兴泰等, 1996)^[82]和人工神经网络方法(Zhang and Zhou, 2002)^[83]。而目前由于受计算机能力的限制,全局最优化反演方法还不能全面应用到地球物理反演当中,仍然以基于最小二乘准则的线性反演为主。最小二乘法反演是假设实测数据误差服从正态分布为前提的,由于受非高斯噪音的影响,当这个前提条件得不到满足时,也就得不到满意的反演结果,这是我们经常遇到的问题。然而,我们知道在求解地球物理反问题时,经常以 L_p 范数 ($p \geq 1$) 作为测度进行解估计的。考虑到野外观测数据经常受各种突变噪音的影响,使得反演结果与实际情况出现一定程度偏差,甚至反演假像,容易造成错误解释,鉴于这一客观因素,笔者提出了混合范数下的最优化反演方法,即根据观测数据品质的优劣,对数据空间和模型空间分别采用不同的测度进行规范化,达到压制干扰突出有用异常的目的,最终使反演结果对真解的逼近程度更高。

在本章中,首先简要介绍 L_p 范数的特性,接着导出了混合范数下的线性反演方程。由于混合范数的引入,增加了线性反演方程的复杂性,对其求解比较困难。因此,对加权矩阵进行了规范化,并采用混合范数下迭代再加权阻尼共轭梯度算法进行求解,其求解精度和运算速度也是我们要考虑的一个因素,对此笔者用其求解由希尔伯特矩阵构成的病态方程来检验它的性能,并且给出了一种新的拉格朗日乘子的选取方法。为验证混合范数最优化反演方法的有效性,对含有和不含有的猝发噪音的模拟电阻率数据进行反演对比,验证混合范数下最优化反演方法的可行性及有效性。

3.1 L_p 范数的误差分布特性

在反演中,目标函数 Φ 可基于 p 阶范数进行构造,即

$$\Phi = \left\| \frac{\mathbf{e}}{\boldsymbol{\sigma}} \right\|_p^p = \left(\sum_i \left| \frac{e_i}{\sigma_i} \right|^p \right)^{1/p} = \left(\sum_i \left| \frac{d_i - F_i(\mathbf{m})}{\sigma_i} \right|^p \right)^{1/p}, \quad (3.1-1)$$

其中 \mathbf{e} 为误差或残差向量; σ_i 为第 i 个数据的协方差; d_i 和 $F_i(\mathbf{m})$ 分别为第 i 个观测数据和对应的模型响应。那么如何选择最优阶数 p 呢? 这主要取决于数据误差

的分布特性。对目标函数 Φ 取极小，相当于对 p 阶广义高斯概率密度函数

$$P(\mathbf{e}) = k \cdot \exp\left(-\frac{1}{p} \sum_i \frac{|e_i|^p}{\sigma_i^p}\right), \quad (3.1-2)$$

取极大，其中 k 为与阶数 p 和协方差 σ_i 有关的常数。概率密度函数 $P(\mathbf{e})$ 用来描述误差的分布，它可理解为目标函数 Φ 在概率意义下的一种表示形式。特别地，当 $p=1, 2, \infty$ 时，分别对应拉普拉斯分布，高斯正态分布和均匀分布，这是常用的三种分布。对于一维广义高斯概率密度函数，即 $i=1$ 时，取 $p=1, 2, 100$ 的广义高斯概率密度分布如图 3.1 所示，常数 k 和协方差 σ_i 均为 1。可以看出，随参数 p 的增大，概率密度分布曲线逐渐趋于均匀分布。

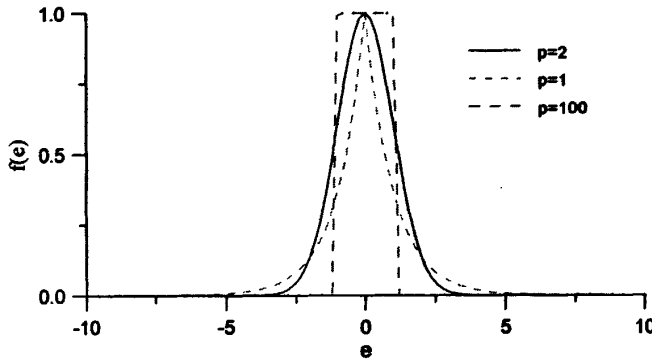


图 3.1 对应 $p=1, 2, 100$ 的广义高斯概率密度分布曲线

由于选择的范数不同，对观测数据（或模型参数）的统计特性的要求也就不同，进而对统计量所加的权值也就不同。当 $p=2$ 时，对所有观测数据（或模型参数）给定相同的权；当 $p=1$ 时，对零误差的数据有无穷大的权，而对误差大的数据不敏感；当 $p \rightarrow \infty$ 时，突出最大者，此时不允许有误差大的数据存在。考虑到观测数据由于受各种因素的影响，其误差分布特性不尽相同。因此必须根据数据品质的优劣，选择合理的范数来构造目标函数。

3.2 混合范数下的线性反演方程

为确保反演的稳定性和健全性，但又不过分损失反演结果的分辨率，De Groot-Hedin, C. 和 Constable, S. C. (1990) 对模型参数引入最大光滑约束^[84]；Ellis, R.G. 和 Oldenburg, D.W. (1994) 对模型参数引入基本模型约束^[85]，阮百尧等 (1999) 将两种约束应用到电阻率和极化率的二维反演当中^[48]。在此基础上，笔者对数据空间和模型空间分别施加 p 范数和 q 范数，得到混合范数下的目标函数为

$$\Phi = \|\Delta \mathbf{d} - \mathbf{A} \Delta \mathbf{m}\|_p^p + \lambda \|\mathbf{C}(\mathbf{m} - \mathbf{m}_0 + \Delta \mathbf{m})\|_q^q, \quad (p \geq 1, q \geq 1), \quad (3.2-1)$$

其中 $\Delta \mathbf{d}$ 为数据残差向量； \mathbf{A} 为偏导数矩阵； $\Delta \mathbf{m}$ 为模型参数的改正向量； \mathbf{m} 为

预测模型参数向量； \mathbf{m}_b 为基本模型参数向量； λ 为拉格朗日乘子； \mathbf{C} 为光滑度矩阵。

对 (3.2-1) 式中的 $\Delta\mathbf{m}$ 求导得

$$\frac{\partial\Phi}{\partial\Delta\mathbf{m}} = p \cdot |\Delta\mathbf{d} - \mathbf{A}\Delta\mathbf{m}|^{p-1} \cdot (-\mathbf{A}^T) \cdot \frac{\Delta\mathbf{d} - \mathbf{A}\Delta\mathbf{m}}{|\Delta\mathbf{d} - \mathbf{A}\Delta\mathbf{m}|} + q \cdot \lambda |\mathbf{C}(\mathbf{m} - \mathbf{m}_b + \Delta\mathbf{m})|^{q-1} \cdot \mathbf{C}^T \cdot \frac{\mathbf{C}(\mathbf{m} - \mathbf{m}_b + \Delta\mathbf{m})}{|\mathbf{C}(\mathbf{m} - \mathbf{m}_b + \Delta\mathbf{m})|}, \quad (3.2-2)$$

然后，令 (3.2-2) 式等于零，并整理得

$$|\Delta\mathbf{d} - \mathbf{A}\Delta\mathbf{m}|^{p-2} \cdot (-\mathbf{A}^T \Delta\mathbf{d} + \mathbf{A}^T \mathbf{A}\Delta\mathbf{m}) + \frac{q}{p} \cdot \lambda |\mathbf{C}(\mathbf{m} - \mathbf{m}_b + \Delta\mathbf{m})|^{q-2} \cdot [\mathbf{C}^T \mathbf{C}(\mathbf{m} - \mathbf{m}_b) + \mathbf{C}^T \mathbf{C}\Delta\mathbf{m}] = 0'$$

令 $\mathbf{R}_d = |\Delta\mathbf{d} - \mathbf{A}\Delta\mathbf{m}|^{p-2}$ 为数据加权对角阵； $\mathbf{R}_m = |\mathbf{C}(\mathbf{m} - \mathbf{m}_b + \Delta\mathbf{m})|^{q-2}$ 为模型加权对角阵。最后得到混合范数下的线性反演方程

$$(\mathbf{A}^T \mathbf{R}_d \mathbf{A} + \frac{q}{p} \cdot \lambda \cdot \mathbf{C}^T \mathbf{R}_m \mathbf{C}) \Delta\mathbf{m} = \mathbf{A}^T \mathbf{R}_d \Delta\mathbf{d} + \frac{q}{p} \cdot \lambda \cdot \mathbf{C}^T \mathbf{R}_m \mathbf{C}(\mathbf{m}_b - \mathbf{m}), \quad (3.2-3)$$

在求解地球物理反问题时，通常仅基于最小二乘 LS 或最小绝对偏差 LAD 准则，所以这里也仅考虑 p 、 q 为 1 和 2 的情况。下面给出四组线性反演方程

(a) 当 $p = q = 2$ 时，求解的线性系统方程为

$$(\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \lambda \cdot \mathbf{C}^T \mathbf{C}) \Delta\mathbf{m} = \mathbf{A}^T \Delta\mathbf{d} + \lambda \cdot \mathbf{C}^T \mathbf{C}(\mathbf{m}_b - \mathbf{m}), \quad (3.2-4)$$

它为通常意义下的最小二乘反演的求解方程。

(b) 当 $p = 1$ ， $q = 2$ 时，令 $\lambda' = 2\lambda$ ，求解的线性系统方程为

$$(\mathbf{A}^T \mathbf{R}_d \mathbf{A} + \lambda' \cdot \mathbf{C}^T \mathbf{C}) \Delta\mathbf{m} = \mathbf{A}^T \mathbf{R}_d \Delta\mathbf{d} + \lambda' \cdot \mathbf{C}^T \mathbf{C}(\mathbf{m}_b - \mathbf{m}), \quad (3.2-5)$$

该方程对数据空间 D 采用最小绝对偏差准则，对模型空间 M 采用最小二乘准则。

(c) 当 $p = 2$ ， $q = 1$ 时，令 $\lambda' = \lambda/2$ ，求解的线性系统方程为

$$(\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \lambda' \cdot \mathbf{C}^T \mathbf{R}_m \mathbf{C}) \Delta\mathbf{m} = \mathbf{A}^T \Delta\mathbf{d} + \lambda' \cdot \mathbf{C}^T \mathbf{R}_m \mathbf{C}(\mathbf{m}_b - \mathbf{m}), \quad (3.2-6)$$

该方程对数据空间 D 采用最小二乘准则，对模型空间 M 采用最小绝对偏差准则。

(d) 当 $p = q = 1$ 时，求解的线性系统方程为

$$(\mathbf{A}^T \mathbf{R}_d \mathbf{A} + \lambda \cdot \mathbf{C}^T \mathbf{R}_m \mathbf{C}) \Delta\mathbf{m} = \mathbf{A}^T \mathbf{R}_d \Delta\mathbf{d} + \lambda \cdot \mathbf{C}^T \mathbf{R}_m \mathbf{C}(\mathbf{m}_b - \mathbf{m}), \quad (3.2-7)$$

该求解方程对数据空间 D 和模型空间 M 都采用了最小绝对偏差准则。

3.3 加权矩阵的规范化

根据上述推导过程，数据和模型的加权对角阵分别为 $\mathbf{R}_d = |\Delta\mathbf{d} - \mathbf{A}\Delta\mathbf{m}|^{p-2}$ 和 $\mathbf{R}_m = |\mathbf{C}(\mathbf{m} - \mathbf{m}_b + \Delta\mathbf{m})|^{q-2}$ ，由于其形式的相似性，特别地，仅对数据加权矩阵进行讨论。矩阵元素的表示形式为

$$R_{dy} = \begin{cases} \frac{1}{|\Delta d_i - a_{ij}\Delta m_j|^{2-p}}, & i=j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (3.3-1)$$

对于(3.3-1)式,当采用最小二乘准则时,即 $p=2$, R_d 为单位矩阵。而当采用最小绝对偏差准则时,即 $p=1$, R_d 为对角矩阵,不难看出,此时我们会遇到两个困难,主要由于解向量 $\Delta \mathbf{m}$ 为待求向量,并且当实测数据和模拟数据精确逼近时,该矩阵是奇异的。

针对上面两个问题,我们只能退而求其次,在每次解线性反演方程之前,假定 $\Delta \mathbf{m}$ 为零向量,只能对加权矩阵 R_d 作一个粗劣估计,在 $p=1$ 时,(3.3-1)式简化为

$$R_{dy} = \begin{cases} \frac{1}{|\Delta d_i|}, & i=j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (3.3-2)$$

为防止加权矩阵奇异,以及考虑到反演的分辨率问题,避免权因子过大、过小的情况,因此考虑将加权矩阵的元素限定在某个窗口范围内。随着反演迭代次数的增加,实测数据和模拟数据的拟和差逐渐减小,因此笔者以所有数据拟和差的平均值作为中心来动态开辟一个窗口,将加权矩阵的对角线元素限定在该窗口内,那么加权矩阵的对角线元素进一步表示为

$$R_d = \begin{cases} 1/(\Delta \bar{d} \cdot Er), & |\Delta d| \leq \Delta \bar{d} \cdot Er \\ 1/|\Delta d|, & \Delta \bar{d} \cdot Er < |\Delta d| < \Delta \bar{d} / Er \\ 1/(\Delta \bar{d} / Er), & |\Delta d| \geq \Delta \bar{d} / Er \end{cases} \quad (3.3-3)$$

$$\Delta \bar{d} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |\Delta d_i|,$$

其中 n 为实测数据的个数; Er ($0 < Er < 1$) 事先给定的加权截止因子,如 $10^{-1} \sim 10^{-6}$ 。这样可以根据(3.3-3)式给定线性反演方程的加权矩阵,并且每次反演迭代都按此过程计算数据加权矩阵。模型加权矩阵的计算过程与此类似,具体不再赘述。

在混合范数反演当中,数据和模型权截止因子 Er 、 Et 对噪音的压制起着关键性的作用。通过增大和减小权截止因子来改变数据和模型的权,减小权截止因子,削弱大拟和差数据的作用,达到了压制干扰的目的;增大截止因子则相反。在这里它起到了一个调焦的作用。

3.4 混合范数下线性反演方程的求解

对于上述线性系统方程,由于加权对角矩阵的存在,增加了方程的求解难度。对此, Scales, J. A. 等(1988)采用迭代再加权最小二乘法(IRLS)解此类问题^[86], 并

且 Darce, G.(1989)^[87], Nichols, D.(1994)^[88]和周竹生(1996)^[73]通过修正共轭梯度法, 将迭代再加权最小二乘法用于求解 L_p 范数下的反问题。在此基础上, 笔者给出了混合范数下迭代再加权阻尼共轭梯度算法。并且又考虑到偏导数矩阵 A 的元素为非零元素, 光滑度矩阵 C 是由相邻模型参数之间的简单关系构成, 仅有几条斜对角线为非零元素, 可以将其进行压缩存储, 仅存储非零元素。那么, 可将线性反演方程 (3.2-4) ~ (3.2-7) 转化为其等价形式, 不失一般性, 方程 (3.2-4) 的等价形式为

$$\begin{vmatrix} A \\ \sqrt{\lambda} \cdot C \end{vmatrix} \Delta \mathbf{m} = \begin{vmatrix} \Delta \mathbf{d} \\ \sqrt{\lambda} \cdot C \cdot (\mathbf{m}_b - \mathbf{m}) \end{vmatrix}, \quad (3.4-1)$$

其中, 光滑度矩阵 C 按斜对角线仅存储了非零元素。为便于计算, 将方程 (3.4-1) 左右两侧的矩阵和向量以分块形式进行存储, 即令 $A_1 = A$, $A_2 = \sqrt{\lambda} \cdot C$; $\mathbf{b}_1 = \Delta \mathbf{d}$, $\mathbf{b}_2 = \sqrt{\lambda} \cdot C \cdot (\mathbf{m}_b - \mathbf{m})$ 。其它三个线性方程也与此类似, 不再赘述。

下面给出混合范数下迭代再加权阻尼共轭梯度算法的具体实施步骤:

1. 给定误差限 ε , 阻尼因子 λ 。根据数据空间和模型空间范数的组合方式, 给定数据和模型的权截止因子 E_r 和 E_t , 并计算数据和模型的初始加权对角阵 $R_d^{(0)}$ 和 $R_m^{(0)}$ 。

2. 初始向量 $\Delta \mathbf{m}^{(0)} = \mathbf{0}$; $\mathbf{h}^{(0)} = \begin{bmatrix} \mathbf{h}_1^{(0)} & \mathbf{h}_2^{(0)} \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{d} & \sqrt{\lambda} \cdot C \cdot (\mathbf{m}_b - \mathbf{m}) \end{bmatrix}^T$ 。对于不同的范数组合方式, 初始共轭方向和梯度向量为

$$\text{当 } p=2, q=2 \text{ 时, } \mathbf{p}^{(0)} = \mathbf{g}^{(0)} = A^T \Delta \mathbf{d} + \lambda C^T C (\mathbf{m}_b - \mathbf{m});$$

$$\text{当 } p=2, q=1 \text{ 时, } \mathbf{p}^{(0)} = \mathbf{g}^{(0)} = A^T \Delta \mathbf{d} + \lambda C^T R_m^{(0)} C (\mathbf{m}_b - \mathbf{m});$$

$$\text{当 } p=1, q=2 \text{ 时, } \mathbf{p}^{(0)} = \mathbf{g}^{(0)} = A^T R_d^{(0)} \Delta \mathbf{d} + \lambda C^T C (\mathbf{m}_b - \mathbf{m});$$

$$\text{当 } p=1, q=1 \text{ 时, } \mathbf{p}^{(0)} = \mathbf{g}^{(0)} = A^T R_d^{(0)} \Delta \mathbf{d} + \lambda C^T R_m^{(0)} C (\mathbf{m}_b - \mathbf{m})。$$

3. 如果 $\|\mathbf{g}^{(0)}\| \leq \varepsilon$ 终止, 否则转入 4。

共轭梯度算法迭代开始, 对于 $j=0, 1, \dots, n_{\max}$, 计算到 11 步。

4. 计算解的修正因子 a_j 。

$$\text{当 } p=2, q=2 \text{ 时, } a_j = \frac{(\mathbf{g}^{(j)}, \mathbf{g}^{(j)})}{(A\mathbf{p}^{(j)}, A\mathbf{p}^{(j)}) + (\lambda C\mathbf{p}^{(j)}, C\mathbf{p}^{(j)})}; \quad (3.4-2)$$

$$\text{当 } p=2, q=1 \text{ 时, } a_j = \frac{(\mathbf{g}^{(j)}, \mathbf{g}^{(j)})}{(A\mathbf{p}^{(j)}, A\mathbf{p}^{(j)}) + (\lambda C\mathbf{p}^{(j)}, R_m^{(j)} C\mathbf{p}^{(j)})};$$

$$\text{当 } p=1, q=2 \text{ 时, } a_j = \frac{(\mathbf{g}^{(j)}, \mathbf{g}^{(j)})}{(A\mathbf{p}^{(j)}, R_d^{(j)} A\mathbf{p}^{(j)}) + (\lambda C\mathbf{p}^{(j)}, C\mathbf{p}^{(j)})};$$

$$\text{当 } p=1, q=1 \text{ 时, } a_j = \frac{(\mathbf{g}^{(j)}, \mathbf{g}^{(j)})}{(\mathbf{A}\mathbf{p}^{(j)}, \mathbf{R}_d^{(j)}\mathbf{A}\mathbf{p}^{(j)}) + (\lambda\mathbf{C}\mathbf{p}^{(j)}, \mathbf{R}_m^{(j)}\mathbf{C}\mathbf{p}^{(j)})}.$$

$$5. \Delta\mathbf{m}^{(j+1)} = \Delta\mathbf{m}^{(j)} + a_j\mathbf{p}^{(j)}. \quad (3.4-3)$$

$$6. \mathbf{h}_1^{(j+1)} = \mathbf{h}_1^{(j)} - a_j\mathbf{A}\mathbf{p}^{(j)}, \mathbf{h}_2^{(j+1)} = \mathbf{h}_2^{(j)} - a_j\sqrt{\lambda}\mathbf{C}\mathbf{p}^{(j)}. \quad (3.4-4)$$

7. 重新生成新的权。当 $p=1$ 时, 数据权 $\mathbf{R}_d^{(j+1)} = |\mathbf{h}_1^{(j+1)}|^{-1}$; 当 $q=1$ 时, 模型权 $\mathbf{R}_m^{(j+1)} = |\mathbf{h}_2^{(j+1)}|^{-1}$, 并且要满足事先给定的数据和模型权截止因子。

8. 计算梯度向量 $\mathbf{g}^{(j+1)}$ 。

$$\text{当 } p=2, q=2 \text{ 时, } \mathbf{g}^{(j+1)} = \mathbf{A}^T\mathbf{h}_1^{(j+1)} + (\sqrt{\lambda}\mathbf{C})^T\mathbf{h}_2^{(j+1)}; \quad (3.4-5)$$

$$\text{当 } p=2, q=1 \text{ 时, } \mathbf{g}^{(j+1)} = \mathbf{A}^T\mathbf{h}_1^{(j+1)} + (\sqrt{\lambda}\mathbf{C})^T\mathbf{R}_m^{(j+1)}\mathbf{h}_2^{(j+1)};$$

$$\text{当 } p=1, q=2 \text{ 时, } \mathbf{g}^{(j+1)} = \mathbf{A}^T\mathbf{R}_d^{(j+1)}\mathbf{h}_1^{(j+1)} + (\sqrt{\lambda}\mathbf{C})^T\mathbf{h}_2^{(j+1)};$$

$$\text{当 } p=1, q=1 \text{ 时, } \mathbf{g}^{(j+1)} = \mathbf{A}^T\mathbf{R}_d^{(j+1)}\mathbf{h}_1^{(j+1)} + (\sqrt{\lambda}\mathbf{C})^T\mathbf{R}_m^{(j+1)}\mathbf{h}_2^{(j+1)}.$$

9. 如果 $\|\mathbf{g}^{(j+1)}\| \leq \varepsilon$ 终止, 否则转入 10。

$$10. \beta_{j+1} = \frac{(\mathbf{g}^{(j+1)}, \mathbf{g}^{(j+1)})}{(\mathbf{g}^{(j)}, \mathbf{g}^{(j)})} \quad (3.4-6)$$

$$11. \mathbf{p}^{(j+1)} = \mathbf{g}^{(j+1)} + \beta_{j+1}\mathbf{p}^{(j)} \quad (3.4-7)$$

其中括号 (\cdot, \cdot) 表示内积; j 表示迭代序号; a_j 和 β_{j+1} 为标量, 分别表示 $\Delta\mathbf{m}$ 和 \mathbf{p} 的修正因子。上述步骤描述了一个非常复杂的混合范数下迭代再加权阻尼共轭梯度算法的求解过程。通过将线性反演方程中的矩阵进行分块存储, 可大大减少内存的使用, 特别当模型参数较多时, 效果更显著。而且求解过程不破坏原有系数矩阵, 有助于与拟牛顿方法结合计算偏导数矩阵, 能进一步提高反演速度, 将在后续章节中进行探讨。

将该算法应用到混合范数下的最优化反演当中, 其求解精度和运算速度也是我们要考虑的一个因素, 对此我们用其求解由希尔伯特矩阵构成的病态方程来检验它的性能。众所周知, 该方程具有严重的病态特征, 当方程阶数 r 在 10~100 之间变化时, 其条件数高达 $10^8 \sim 10^9$ 数量级^[73], 可见病态程度相当严重。因此, 可用来检验共轭梯度算法对付病态问题的能力。图 3.2 显示了用共轭梯度算法 CG (包括最小二乘共轭梯度法 LSCG 和迭代再加权共轭梯度法 IRCG) 和奇异值分解算法 SVD 求解以希尔伯特方阵构成的线性方程组的性能对比, 其中图 3.2.a 为计算精度的对比结果; 图 3.2.b 为耗费时间的对比结果。从图 3.2.a 中可见, 无论 LSCG 法还是 IRCG 法, 数值解与真解的平均均方误差基本都控制在 2%

以下，但 IRCG 法的抗病态能力要强于 LSCG 法，基本可与 SVD 法相媲美。但从耗费时间来看，CG 法比 SVD 法的运算速度要快的多，并且随着方程阶数的增大，运算速度快的特征便更加显著，其中 LSCG 法与 IRCG 法的运算速度相当，如图 3.2.b。通过数值试算，说明上述方法的确是一种求解最优化问题的好方法。

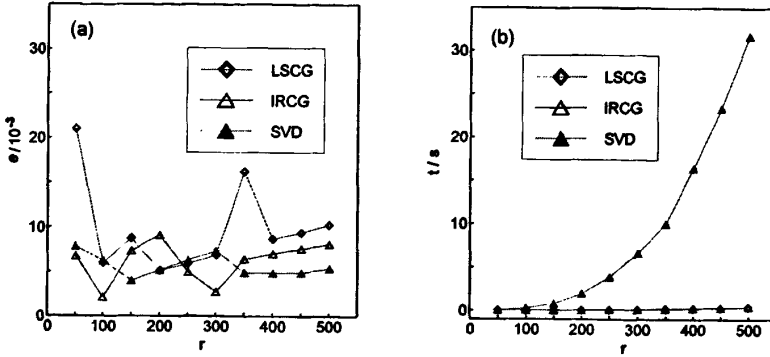


图 3.2 几种算法的性能对比

3.5 拉格朗日乘子 λ 的优化选取

拉格朗日乘子又称阻尼因子或正则化因子，它在反演中起着关键性的作用。对于线性反演方程(3.2-4)~(3.2-7)中的拉格朗日乘子 λ ，当 $\lambda \rightarrow 0$ 时，由于反演方程的奇异性，必然会增大解的方差，导致反演过程的不稳定，最终可能促成反演失败的命运。当 $\lambda \rightarrow \infty$ 时，解的光滑性和反演过程的稳定性最好，但是以严重降低解的分辨率为代价的。所以，只能根据数据的噪音情况粗略的给定拉格朗日乘子 λ 的值，数据噪音大， λ 也大，反之， λ 就小，最终得到一介于两种极端情况之间的折衷解。

在反演过程中，假定我们在每次反演迭代中选取的拉格朗日乘子 λ 都是比较合理的，它即能保证解的方差和分辨率之间的最佳折衷，又能保证误差收敛曲线是稳步下降的，并且在前几次迭代误差下降较快，随后下降极为缓慢。因此，可以构造一似理想误差收敛曲线的 λ 序列，使反演过程随着迭代次数的增加逐步松弛约束。笔者采用函数

$$\lambda(k) = a \cdot k^{-2} + b \tag{3.5-1}$$

构造 λ 序列，其中 k 为迭代序号； a 和 b 为待求系数。首先，给定最大反演迭代次数 n_{\max} (3~20)，并根据数据所含噪音情况选择一相对合理的初始拉格朗日乘子 λ_{\max} (通常在 0.1~1 内选择)，为方便起见，最小拉格朗日乘子可为 $\lambda_{\min} = \lambda_{\max} / 10$ ，这样可以确定 a 、 b 及中间的拉格朗日乘子。如 $n_{\max} = 5$ ； $\lambda_{\max} = 0.5$ ； $\lambda_{\min} = 0.05$ ；则根据(3.5-1)式得 λ 序列为 0.5、0.1529、0.089、0.066、0.056、0.05。至此，虽然我们已经给出了拉格朗日乘子的构造方法，但在实际反演当中，无法保证 λ 序列是最佳的，能使误差收敛曲线稳步下降及解估计最优。

因此，在反演中可通过下式

$$\lambda_k^i = \lambda_k \cdot \frac{\Phi_d^{(k-1)}}{\Phi_d^{(k-2)}} \quad (3.5-2)$$

对 λ 序列进行修正，其中 $\Phi_d^{(k-1)}$ 和 $\Phi_d^{(k-2)}$ 分别为第 $k-1$ 和 $k-2$ 次迭代的数据拟合差； λ_k 和 λ_k^i 分别为构造的和修正的第 k 次迭代的拉格朗日乘子。可以看出，当目标函数增大时，相当于在原有的基础上乘以一个大于 1 的数；当目标函数减小时，则乘以一个小于 1 的数。这样可以对构造的 λ 序列进行自适应调节。

3.6 混合范数下的电阻率反演结果对比

为了对比混合范数下的反演效果，将其应用到电阻率的二维反演当中，并通过对比反演结果来分析它们的特性。

3.6.1 对无猝发噪音的数据进行反演

假设在地下电阻率为 $100 \Omega \cdot \text{m}$ 的均匀半空间中，有两个边长 6m ，顶板距地面 10m ，间隔 14m ，电阻率为 $10 \Omega \cdot \text{m}$ 低阻方形柱体。根据文献^[49]的算法，对此地电模型用温纳 α 装置以相邻电极距 2m 进行正演模拟，然后采用四组线性反演方程对不含猝发噪音的数据断面进行反演，反演结果如图 3.3（等值线间隔为 $8 \Omega \cdot \text{m}$ ，方形框为两低阻体的位置）。下面对不同范数组合的反演结果加以分析，当数据和模型都采用最小二乘准则时（在图中用 $D=LS, M=LS$ 表示），如图 3.3. a，电阻率等值线平滑流畅，两低阻体的形态和位置基本被反映出来，反演效果较好。当数据和模型选择另外三种组合准则时，如图 3.3. b~d，与图 3.3. a 相比，虽然两低阻体的大致形态已被反映出来，但加大了横向的平滑度，使分辨率都有不同程度的降低，特别是数据和模型都选择了最小绝对偏差准则的情况，分辨率下降的最严重。这主要由于数据在无噪音时，数据和模型不服从拉普拉斯分布，使有用成分也作为噪音被压制掉。说明在无噪音的情况下，或者说数据和模型误差满足高斯正态分布时，数据空间和模型空间都选择最小二乘准则作为测度是最佳的。

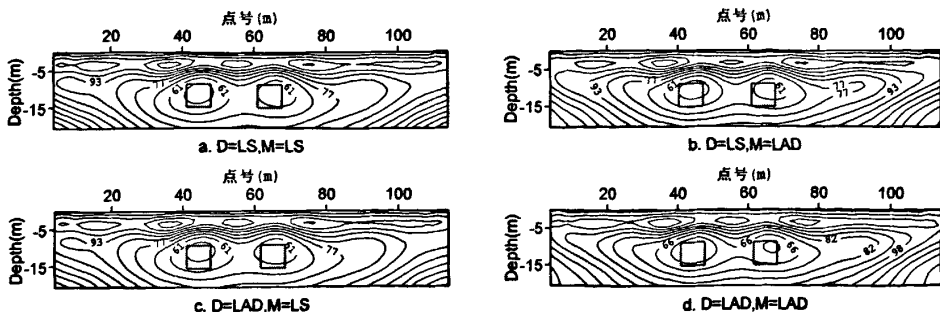


图 3.3 不含噪音的数据断面的反演结果对比

3.6.2 对含有猝发噪音的数据进行反演

为了进一步检验不同范数组合的反演特性,将上述模拟数据断面加入几个较大的突变数据,如图 3.4. a。然后再次采用上述四组线性反演方程进行反演,拉格朗日乘子都从 0.3~0.03 变化,反演结果如图 3.4. b~e。从图中可以看出,当数据和模型都采用最小二乘准则时,异常体的形态出现畸变,并且出现一些冗余的虚假信息,反演结果较差,如图 3.4. b;当数据采用最小二乘准则,模型采用最小绝对偏差准则时,反演结果如图 3.4. c,与图 3.4. b 相比,反演结果有一定程度的改善,异常体基本归位,但仍然存在少量的多余信息,这主要是由于模型加权矩阵中引入了最大光滑约束,削弱了模型加权矩阵元素之间的差异,使其对模型粗差的压制能力降低。当数据选择最小绝对偏差准则,模型选择最小二乘或最小绝对偏差准则时,两低阻体的形态和位置基本被反映出来,并且无冗余信息,反演结果较好。说明当实测数据存在突变噪音,使数据误差服从拉普拉斯长尾状分布时,数据选择最小绝对偏差准则,模型选择最小二乘或最小绝对偏差准则,对噪音的压制能力较强,可以得到满意的反演结果。

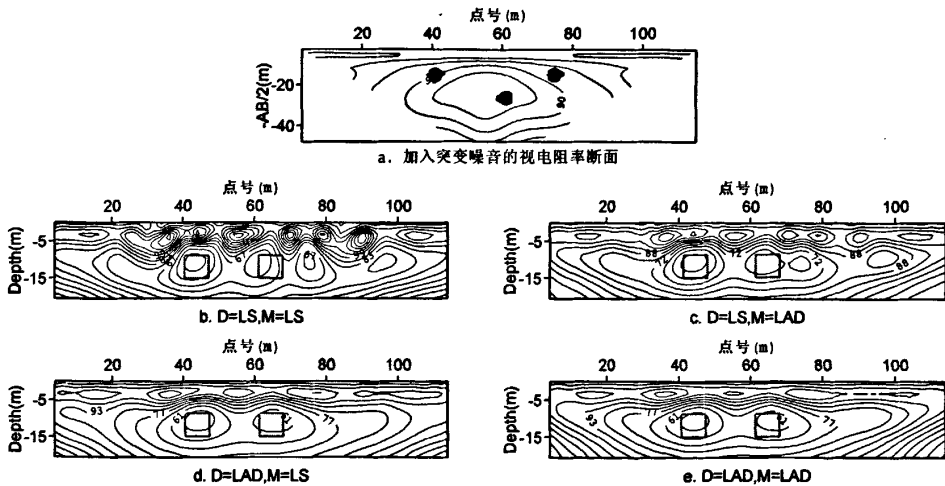


图 3.4 含有噪音的数据断面的反演结果对比

考虑到增大拉格朗日乘子也有压制噪音的作用,故增大拉格朗日乘子,使其从 5~0.5 变化,然后再用数据和模型都采用最小二乘准则,以及数据采用最小绝对偏差和模型采用最小二乘准则的两组线性反演方程进行反演,即采用方程 (3.2-4) 和 (3.2-5) 进行反演,反演结果如图 3.5。当数据和模型都选择最小二乘准则时,通过增大阻尼因子可以将噪音压制掉,并且两低阻体也能被粗略的分辨出来,但在横向上的分辨率明显降低,如图 3.5. a。当数据空间采用最小绝对偏差准则,模型空间选择最小二乘准则时,不但噪音被压制掉,而且在横向上的分辨率也相对高一些,如图 3.5. b。这再次显示了数据采用最小绝对偏差准则,模

型采用最小二乘准则的范数组合对突变噪音具有较强的压制能力,但又不过分损失分辨率的特性。

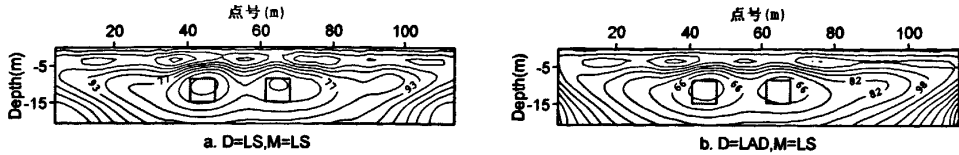


图 3.5 对含噪音的数据断面增大拉格朗日乘子的反演结果对比

本章小结

1、在地球物理勘探过程中,由于受非高斯噪音的影响,使采集的数据含有突变噪音,如果仍然采用基于最小二乘准则的广义线性反演方法进行反演,将会造成反演假象,进而导致错误解释。因此,提出了混合范数下的最优化反演方法,即根据观测数据品质的优劣,对数据空间和模型空间分别采用不同的范数进行测度,达到压制干扰突出有用异常的目的。

2、在反演中,由于引入了混合范数,增加了线性反演方程的复杂性,对其求解比较困难。因此,通过对加权矩阵进行规范化,并采用混合范数下迭代再加权阻尼共轭梯度算法进行求解,使得问题得到解决。用其求解由希尔伯特矩阵构成的病态方程,从计算速度和精度来看,效果较好。并给出了一种新的拉格朗日乘子的自适应调整方法。

3、通过对含有和不含有猝发噪音的模拟电阻率数据进行反演对比,可以得到如下认识:对于数据噪音服从高斯分布或近似服从高斯分布时,数据和模型都采用 L_2 范数组合进行反演,反演效果较好;对于含有弱噪音的数据,并且噪音服从拉普拉斯分布时,数据采用 L_2 范数,并且模型采用 L_1 范数进行反演,可通过削弱模型间的粗差来间接的压制噪音;对于含有强噪音的数据,并且噪音服从拉普拉斯分布时,数据采用 L_1 范数,模型采用 L_2 或 L_1 范数进行反演,由于其本身具有较强的抗猝发噪音的能力,使得反演过程稳定,并且能够得到较满意的反演结果。

4、混合范数下的最优化反演方法,作为一种广义线性反演方法,同样,它也可以应用到其它地球物理反演当中。

第四章 直流激电数据的广义线性反演

目前,直流激电数据的反演多以广义线性反演方法为主,其理论研究已经趋于成熟,而且直流激电数据的广义线性反演技术也已在实际资料处理中得到了越来越广泛的应用^{[89][90][91][92][93][94]}。在本章中,首先简单探讨电阻率和极化率的反演方法,并给出反演中偏导数矩阵的混合计算方式,以进一步加快反演的速度。在此基础上,对一些特殊观测方式的直流激电数据反演所涉及到的若干技术问题进行改进和优化,使直流激电数据的广义线性反演技术得到进一步完善。在这里笔者仅对垂直激电测深(VES)二维反演、电阻率间歇反演和复杂观测方式的直流激电三维反演等三个方面所涉及的一些技术问题进行研究。

4.1 直流激电数据的广义线性反演方法

直流激电数据反演包括电阻率反演和极化率反演两个方面,下面将分别对其进行探讨。

4.1.1 电阻率的反演方法

电阻率数据的广义线性反演可采用第二和第三章中给出的方法。为明了起见,这里仅对电阻率最小二乘反演的基本原理进行介绍。在电阻率反演过程中,考虑到电阻率值变化范围较大,为了提高反演的稳定性,视电阻率和模型电阻率参数通常使用对数值,直流电阻率的线性反演方程可表示为

$$A\Delta\mathbf{m} = \Delta\mathbf{d}, \quad (4.1-1)$$

其中 $\Delta\mathbf{d}$ 为数据残差矢量,其值等于实测视电阻率的对数值与模拟的视电阻率的对数值之差($\Delta d_i = \ln \rho_{oi} - \ln \rho_{ci}$, $i = 1, 2, \dots, n$); $\Delta\mathbf{m}$ 为模型参数的改正向量($\Delta m_j = \ln \rho_j$, $j = 1, 2, \dots, m$); A 为偏导数矩阵($a_{ij} = \partial \ln \rho_{oi} / \partial \ln \rho_j$), ρ_j 为第 j 个网格节点的电阻率。

在电阻率的二维或三维反演过程中,方程(4.1-1)通常是欠定的。为提高反演的稳定性和得到较精确的解估计,必须在模型空间引入某种稳定化泛函,具体的说,也就是对模型参数施加某种先验约束^[84]。可以单独施加光滑模型或背景模型约束,或将两者同时施加,在程序设计时,可将其设置选择项,以增加程序的通用性。则稳定化泛函可表示为

局部光滑约束:

$$\|C\Delta\mathbf{m}\|_2^2 = (C\Delta\mathbf{m})^T C\Delta\mathbf{m}, \quad (4.1-2)$$

总体光滑约束:

$$\|C(\mathbf{m} + \Delta\mathbf{m})\|_2^2 = [C(\mathbf{m} + \Delta\mathbf{m})]^T [C(\mathbf{m} + \Delta\mathbf{m})], \quad (4.1-3)$$

同时施加光滑模型和背景模型约束:

$$\|C(\mathbf{m}_b - \mathbf{m} + \Delta\mathbf{m})\|_2^2 = [C(\mathbf{m}_b - \mathbf{m} + \Delta\mathbf{m})]^T [C(\mathbf{m}_b - \mathbf{m} + \Delta\mathbf{m})], \quad (4.1-4)$$

其中 \mathbf{m} 为模型参数向量; C 为光滑度矩阵, 可采用一阶或二阶平滑度方式进行计算。如果(4.1-4)式中 C 为单位矩阵, 则仅施加了背景模型约束。

这样同时引入光滑模型和背景模型约束的目标函数 Φ 为^[48]

$$\Phi = \|\Delta\mathbf{d} - A\Delta\mathbf{m}\|_2^2 + \lambda \|C(\mathbf{m}_b - \mathbf{m} + \Delta\mathbf{m})\|_2^2, \quad (4.1-5)$$

上式右端第一项为通常的数据拟合差的最小二乘项, 第二项为同时引入光滑模型和基本模型约束项。其中 \mathbf{m}_b 为背景模型; λ 为正则化因子或拉格朗日乘子, 其余参数含义与上述相同。然后将(4.1-5)式两端对 $\Delta\mathbf{m}^T$ 求导并令其等于零, 得到下面的最小二乘线性反演方程

$$(A^T A + \lambda C^T C)\Delta\mathbf{m} = A^T \Delta\mathbf{d} + \lambda C^T C(\mathbf{m}_b - \mathbf{m}), \quad (4.1-6)$$

(4.1-6)式也等效于下面的线性方程组

$$\begin{vmatrix} A \\ \sqrt{\lambda} C \end{vmatrix} \Delta\mathbf{m} = \begin{vmatrix} \Delta\mathbf{d} \\ \sqrt{\lambda} C(\mathbf{m}_b - \mathbf{m}) \end{vmatrix}, \quad (4.1-7)$$

将从方程组(4.1-7)中得到的模型修改量代入下式

$$\mathbf{m}^{(k)} = \mathbf{m}^{(k-1)} + \Delta\mathbf{m}, \quad (4.1-8)$$

便得到新的预测模型参数矢量 $\mathbf{m}^{(k)}$ 。重复这个过程直至实测数据和模拟数据之间的平均均方误差满足要求。其中, 平均均方误差 RMS 定义为

$$RMS = \sqrt{\Delta\mathbf{d}^T \Delta\mathbf{d}/n}. \quad (4.1-9)$$

4.1.2 极化率的反演方法

在激电理论和实践研究中, 为使问题简化, 将岩、矿石的激发极化分为理想的两大类——面极化和体极化^[10]。应该指出, “面极化”和“体极化”只有相对的意义, 从微观的角度, 所有激发极化都是面极化的。然而, 在找矿中, 所要求的仍是从宏观地角度考察某个大的极化体的激发极化, 故将激发极化视为“体极化”便更为常见。所以, 对于极化率的反演, 依然根据 Seigel 体激发极化理论^[95], 假定地电模型可以通过电导率 $\sigma(x, y, z)$ 和极化率 $\eta(x, y, z)$ 两个物理参数来描述, 并且极化率被定义在区间 $[0, 1]$ 内, 而且变化幅度要远远小于电导率的变化幅度。我们知道, 极化率反演是建立在电阻率反演的基础之上的, 电阻率反演结果的好坏直接影响着极化率反演的质量, 即它要分两个阶段进行, 首先在完成电阻率反演之后, 再进行极化率反演。下面给出三种极化率反演方法^[96]:

一. 线性反演方法

假定视电阻率 ρ_o 是以电导率 $\sigma(x, y, z)$ 为自变量的函数, 当地下介质存在激发极化时, 它可以表示成

$$\rho_a^* = \rho_a [\sigma(1-\eta)], \quad (4.1-10)$$

其中 ρ_a^* 为等效视电阻率； η 为极化率。再次假定地下模型由 M 块不同的电导率 σ_j 和 η_j 的岩矿石组成 ($j=1,2,\dots,M$)，并将(4.1-10)右端关于电导率 σ 用泰勒级数展开并略去二次以上的项，得

$$\rho_a^* = \rho_a(\sigma - \eta\sigma) \approx \rho_a(\sigma) - \sum_{j=1}^M \frac{\partial \rho_a}{\partial \sigma_j} \eta_j \sigma_j, \quad (4.1-11)$$

则极化率响应 η_a 可根据等效视电阻率公式计算得到

$$\eta_a = \frac{\rho_a^* - \rho_a}{\rho_a^*} = \frac{\rho_a[\sigma(1-\eta)] - \rho_a(\sigma)}{\rho_a[\sigma(1-\eta)]} \approx \frac{-\sum_j \frac{\partial \rho_a}{\partial \sigma_j} \eta_j \sigma_j}{\rho_a(\sigma) - \sum_j \frac{\partial \rho_a}{\partial \sigma_j} \eta_j \sigma_j}, \quad (4.1-12)$$

再做一次近似，上式可写为

$$\eta_a \approx -\sum_j \frac{\sigma_j \cdot \partial \rho_a}{\rho_a \cdot \partial \sigma_j} \eta_j = -\sum_j \frac{\partial \ln \rho_a}{\partial \ln \sigma_j} \eta_j, \quad (4.1-13)$$

那么第 i 点的极化率响应为

$$\eta_{ai} \approx -\sum_j \frac{\partial \ln \rho_{ai}}{\partial \ln \sigma_j} \eta_j = \sum_j \frac{\partial \ln \rho_{ai}}{\partial \ln \rho_j} \eta_j = A_{ij} \eta_j, \quad (i=1,2,\dots,N), \quad (4.1-14)$$

通过上述推导，便可将极化率和视极化率之间的非线性关系作线性近似，得到偏导数矩阵 A_{ij} 。由于没有考虑它们之间的非线性特性，当极化率的值越大，它们之间的非线性关系表现的越明显。但是，由于在电阻率的反演中，已经计算出偏导数矩阵 A_{ij} ，所以只需将实测视极化率代替上式中的 η_{ai} ，再解一次线性方程组，便可求出每个模型块（或节点）的极化率，所需计算量很小。虽然该反演方法具有一定的近似性，但依然不失为一种好的反演方法，也是目前极化率反演中广泛使用的方法^[48]。

二. 精确形式反演方法

首先给定一次场电位 U_σ ，它的算子形式为

$$U_\sigma = F(\sigma), \quad (4.1-15)$$

其中正演算子 F 满足微分方程 $\nabla(\sigma \cdot \nabla U_\sigma) = -I\delta(\bar{r} - \bar{r}_A)$ ， r_A 为场源的位置。那么总场电位 U_η 也可以写为算子形式

$$U_\eta = F[\sigma(1-\eta)], \quad (4.1-16)$$

同理它满足微分方程 $\nabla(\sigma(1-\eta) \cdot \nabla U_\eta) = -I\delta(\bar{r} - \bar{r}_A)$ 。那么对(4.1-15)和(4.1-16)两式分别求逆运算，那么电导率和等效电导率分别为

$$\sigma = F^{-1}[U_\sigma], \quad \sigma(1-\eta) = F^{-1}[U_\eta], \quad (4.1-17)$$

因此得到极化率

$$\eta = \frac{F^{-1}(U_\sigma) - F^{-1}(U_\eta)}{F^{-1}(U_\sigma)}, \quad (4.1-18)$$

从(4.1-18)可以看出,用该方法进行极化率反演,必须在实际勘探过程中,记录一次场电位和总场电位,并分别进行电阻率和等效电阻率的反演,再换算出地下模型的极化率。该方法不仅要求实测数据准确,还要求电阻率的反演过程稳定,以及反演结果准确,才会得到较好的极化率反演结果。从实际勘探的角度讲,分别测得一次场电位和总场电位也是不经济的,况且在一般情况下,仪器不是直接测量电位的,并且该反演方法的计算量几乎是上述反演方法的两倍。所以该反演方法不具备实际操作性,在反演过程中,一般不会采用,在此也只作为一种反演形式加以介绍。

三. 广义线性反演方法

根据体极化介质的视极化率的计算公式直接给出第*i*点的极化率响应^[48]

$$\eta_{ai} = \frac{\rho_{ai}^* - \rho_{ai}}{\rho_{ai}^*}, \quad (4.1-19)$$

其中 ρ_{ai} 和 ρ_{ai}^* 分别为第*i*点的视电阻率和等效视电阻率。然后用第*i*点的极化率响应 η_{ai} 对第*j*个模型块的极化率 η_j 求导,得

$$\frac{\partial \eta_{ai}}{\partial \eta_j} = \frac{\rho_{ai}}{(\rho_{ai}^*)^2} \frac{\partial \rho_{ai}^*}{\partial \eta_j}, \quad (4.1-20)$$

那么,我们只需求出 $\partial \rho_{ai}^* / \partial \eta_j$ 即可。然而根据等效电阻率公式

$$\rho^* = \frac{\rho}{1-\eta}, \quad (4.1-21)$$

其中 ρ 和 ρ^* 分别为电阻率和等效电阻率,有

$$\frac{\partial \rho_{ai}^*}{\partial \eta_j} = \frac{\partial \rho_{ai}^*}{\partial \rho_j^*} \cdot \frac{\partial \rho_j^*}{\partial \eta_j} = \frac{\partial \rho_{ai}^*}{\partial \rho_j^*} \cdot \frac{\rho_j}{(1-\eta_j)^2} = \frac{\partial \rho_{ai}^*}{\partial \rho_j^*} \cdot \frac{(\rho_j^*)^2}{\rho_j}, \quad (4.1-22)$$

将(4.1-22)式代入(4.1-20)式中,经整理,便得到第*i*点的视极化率对第*j*个模型块的极化率 η_j 的偏导数

$$J_{ij} = \frac{\partial \eta_{ai}}{\partial \eta_j} = \frac{\rho_{ai}}{\rho_j} \cdot \left(\frac{\rho_j^*}{\rho_{ai}^*} \right)^2 \cdot \frac{\partial \rho_{ai}^*}{\partial \rho_j^*}, \quad (4.1-23)$$

为保证反演过程的稳定性,也可以将视极化率和极化率采用对数形式,有

$$J_{ij} = \frac{\partial \ln \eta_{ai}}{\partial \ln \eta_j} = \frac{\eta_j}{\eta_{ai}} \cdot \frac{\rho_{ai}}{\rho_j} \cdot \left(\frac{\rho_j^*}{\rho_{ai}^*} \right)^2 \cdot \frac{\partial \rho_{ai}^*}{\partial \rho_j^*}, \quad (4.1-24)$$

对于非线性极化率反演的偏导数矩阵,与电阻率反演的偏导数矩阵有一定的相似性,只需将电阻率的反演过程略作修改便可完成极化率反演。

极化率的线性和非线性反演方法都是可靠的。从理论而言,非线性反演方法可能是最好的。它的主要优点就是可以处理大的极化率值,并且反演过程和电阻率的反演过程基本相同。但它的计算量几乎是线性反演方法的两倍,这又成为它的一个不足。但在实际反演中,大部分都采用线性反演方法,主要是因为我们

可以很容易的通过加大电阻率反演的迭代次数, 尽量提高电阻率反演结果的质量来改善极化率的反演结果。因此, 这使其成为极化率反演中被广泛采用方法。

4.2 偏导数矩阵的计算与加速技术

4.2.1 利用互换原理计算偏导数矩阵

在电阻率法的二维或三维广义线性反演过程中, 需要计算模拟视电阻率对模型参数的偏导数, 它是电阻率法二维或三维反演的核心问题, 计算过程比较复杂, 并且常规计算雅克比矩阵的方法(差分法)占用较长的机时。Tripp^[20](1984)和Sasaki^[31](1994)给出了用互换定理来计算雅克比矩阵的方法, 阮百尧(2001)^[98]对其计算过程也给出了详细的介绍。与差分方法相比, 由于其计算过程仅仅是节点电位的线性组合, 计算量相对很少, 并且已经取得了较好的应用。在电阻率反演过程中, 考虑到电阻率的变化范围过大, 视电阻率和模型参数电阻率都取对数。这样, 其偏导数矩阵 J 的形式为

$$J_{ij} = \frac{\partial \log \rho_{ai}}{\partial \log \rho_j} = \frac{\rho_j \partial \rho_{ai}}{\rho_{ai} \partial \rho_j}, \quad (4.2-1)$$

$$i = 1, 2, \dots, N_a, \quad j = 1, 2, \dots, M_m$$

其中 ρ_{ai} 为预测模型的视电阻率数据, 它与 N 个实测视电阻率数据相对应; ρ_j 是 M_m 个预测模型中的第 j 个模型参数。我们知道预测模型的视电阻率是由电位 \mathbf{V} 组合组成, 这样, 视电阻率对模型电阻率的偏导数矩阵的计算, 可归结到网格节点电位对模型电阻率偏导数矩阵的计算问题, 即求 $\partial \mathbf{V} / \partial \rho$ 。而电位 \mathbf{V} 可以通过有限元数值模拟方法计算得到, 即电位 \mathbf{V} 可通过解下面的线性方程组求得

$$\mathbf{KV} = \mathbf{S}, \quad (4.2-2)$$

式中 \mathbf{K} 为 $M \times M$ 阶对称系数矩阵, 也是数值模拟中的刚度矩阵, 其各项元素与模型电阻率分布和网格剖分有关; \mathbf{V} 为 M 个网格节点的电位向量; \mathbf{S} 为电流源向量, 其元素除含电流源的网格节点处等于 1 外, 其它均等于零。接着对上式两端求导, 由于向量 \mathbf{S} 与模型电阻率分布无关, 则得

$$\frac{\partial(\mathbf{KV})}{\partial \rho_j} = \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \rho_j} \mathbf{V} + \mathbf{K} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \rho_j} = 0$$

则

$$\mathbf{K} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \rho_j} = -\frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \rho_j} \mathbf{V}, \quad (4.2-3)$$

上式右端项中, 系数矩阵 \mathbf{K} 和电位向量 \mathbf{V} 已在正演计算中求得, 而 $\partial \mathbf{K} / \partial \rho_j$ 矩阵的元素等于系数矩阵 \mathbf{K} 中的元素对第 j 个模型参数电阻率 ρ_j 的导数, 所以很容易得到, 并且根据有限元网格剖分规律, 由于 \mathbf{K} 中仅几个元素与 ρ_j 有关, 所以 $\partial \mathbf{K} / \partial \rho_j$ 矩阵中大部分元素是零。因此, $(\partial \mathbf{K} / \partial \rho_j) \cdot \mathbf{V}$ 是已知的, 可令它等于 $-\mathbf{D}$, 这里 $\mathbf{D} = \{d_1, d_2, \dots, d_M\}^T$ 是向量。这样上式可写为

$$\mathbf{K} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \rho_j} = \mathbf{D}, \quad (4.2-4)$$

由此可得

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \rho_j} = & d_1 \mathbf{K}^{-1} \{1, 0, 0, \dots, 0\}^T + d_2 \mathbf{K}^{-1} \{0, 1, 0, \dots, 0\}^T + \dots + \\ & d_i \mathbf{K}^{-1} \{0, 0, 0, \dots, 1, \dots, 0\}^T + \dots + d_M \mathbf{K}^{-1} \{0, 0, 0, \dots, 1\}^T. \end{aligned} \quad (4.2-5)$$

从(4.2-2)式可知, $d_i \mathbf{K}^{-1} \{0, 0, 0, \dots, 1\}^T$ 表示在第 i 个网格节点上供电流强度 d_i 时各网格节点上的电位向量。因此, 对 $\partial V(i_A, j_M) / \partial \rho_j$, 即 j_M 个元素, 有

$$\begin{aligned} \frac{\partial V(i_A, j_M)}{\partial \rho_j} = & d_1 V(1, j_M) + d_2 V(2, j_M) + \dots + d_M V(M, j_M) \\ = & \sum_{k=1}^M d_k V(k, j_M). \end{aligned} \quad (4.2-6)$$

利用互换原理:

$$V(i_A, j_M) = V(j_M, i_A), \quad (4.2-7)$$

即网格节点 i_A 供电节点 j_M 处的电位等于在网格节点 j_M 供电节点 i_A 处的电位。则式(4.2-6)可写为

$$\frac{\partial V(i_A, j_M)}{\partial \rho_j} = \sum_{k=1}^M d_k V(j_M, k), \quad (4.2-8)$$

即网格节点 i_A 供电, 网格节点 j_M 处的电位对模型电阻率参数的偏导数 $\partial V(i_A, j_M) / \partial \rho_j$ 等于网格节点 j_M 供电时, 所有网格节点上电位的线性组合。因此, 若在做正演计算时, 依次计算和存储了各供电和测量节点供单位电流时所有网格节点的电位, 则可计算任何电极装置视电阻率的雅可比矩阵 J 。但是, 对于常规垂直激电测深法, 由于测量极距大, 不重复电极数较多, 使得迭代反演一次所需要的总计算量仍然主要集中在雅可比矩阵的计算上。

4.2.2 偏导数矩阵的 Broyden 更新技术

考虑到用互换原理计算雅可比矩阵的计算量仍然较大, 因此, 这里采用拟牛顿法中的 Broyden 秩一校正公式来近似计算偏导数矩阵^[72], 其近似计算公式为

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(y_k - B_k s_k) s_k^T}{s_k^T s_k}, \quad (4.2-9)$$

其中 B 为 Hesse 矩阵的近似, $s_k = x_{k+1} - x_k$, $y_k = g_{k+1} - g_k$, 而 x 和 g 分别为解和一阶导数。Broyden 秩一校正有利于保持上一次迭代的信息, 即更新得到的 B_{k+1} 最靠近 B_k 。当将该公式应用到电阻率反演中时, 其参数含义分别为: B_k 为第 k 次迭代计算的偏导数矩阵; B_{k+1} 为更新后近似计算的偏导数矩阵; s_k 第 k 次迭代模型参数的改正量; g_k 和 g_{k+1} 分别为第 k 和 $k+1$ 次迭代的模拟视电阻率。在本文中, 由于偏导数矩阵的元素是模拟视电阻率的对数对模型参数的对数的导数, 所以向

量 s_k 和 g_k 要以对数形式参与计算。

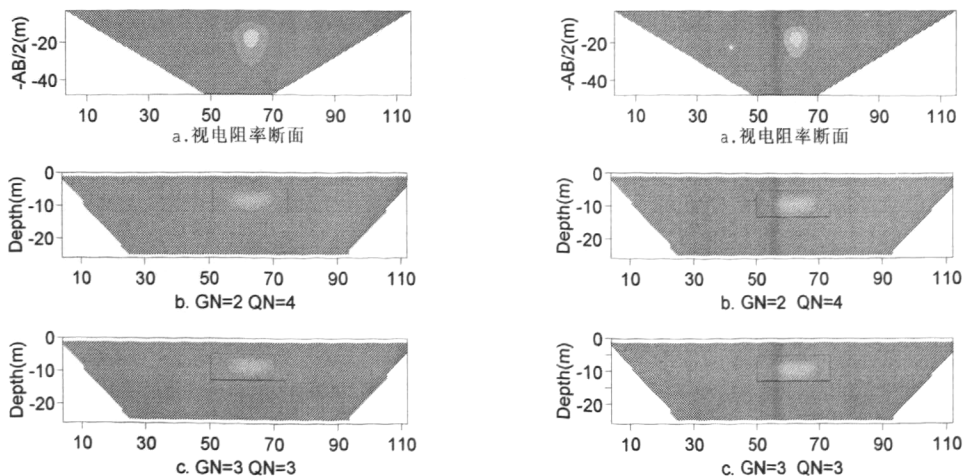
采用上述偏导数矩阵的 Broyden 更新技术, 可以大大加快反演的速度。然而为确保每次迭代都能稳步收敛, 将互换原理和 Broyden 更新技术结合起来计算雅克比矩阵。

4.2.3 两种偏导数矩阵计算方法的结合方式

将互换原理和 Broyden 更新技术结合起来计算雅克比矩阵, 即先用互换原理法计算雅克比矩阵, 在后续迭代中采用 Broyden 更新技术对其进行近似计算。下面通过对模拟数据进行反演, 观察误差收敛曲线和反演结果, 评价两种方法结合的可行性和最佳结合方式。

算例一: 假定在地下均匀半空间介质中有一低阻柱体, 高 7 米、宽 15 米、顶板距地面 5 米, 首先设定其电阻率为 $5\Omega\text{m}$, 围岩电阻率为 $100\Omega\text{m}$, 对比度(围岩电阻率与异常体电阻率的比)相对较小。然后采用 wena-alpha 装置进行模拟, 模拟结果如图。由于体积效应, 低阻异常体的边界较模糊, 并向下出现长尾状分布。接着在反演中采用互换原理(用 GN 表示)和 Broyden 更新技术(用 QN 表示)相结合的方式计算偏导数矩阵, 反演迭代 6 次, 反演结果如图 4.1.b~f, 低阻异常体的埋深和形态基本都被反映出来, 即使 $GN=2$ 、 $QN=4$ 的反演结果也很好, 与 $GN=6$ 、 $QN=0$ 的反演结果相差不大。误差收敛曲线也稳步下降, 但反演耗费的时间却随着 GN 的增大而增加, 如图 4.1.a~b。

增大围岩与异常体对比度, 异常体的电阻率变为 $0.5\Omega\text{m}$, 围岩的电阻率保持不变, 图 4.2 为模拟和反演的结果; 图 4.4 为误差收敛曲线和反演耗费的时间。从不同结合方式的反演结果来看, 在大对比度情况下, 反演效果仍然较好, 说明将两种方式结合起来计算偏导数矩阵是可行的。随着 GN 的增大, 反演效果没有明显改善, 但耗费的时间却明显增加, 说明采用 Broyden 更新技术近似计算偏导数矩阵比较节省反演时间。



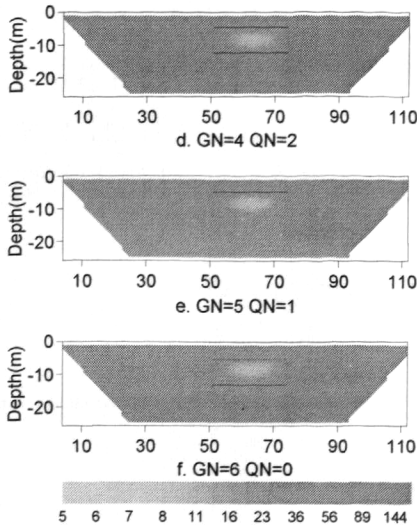


图 4.1 低对比度不同结合方式的反演结果

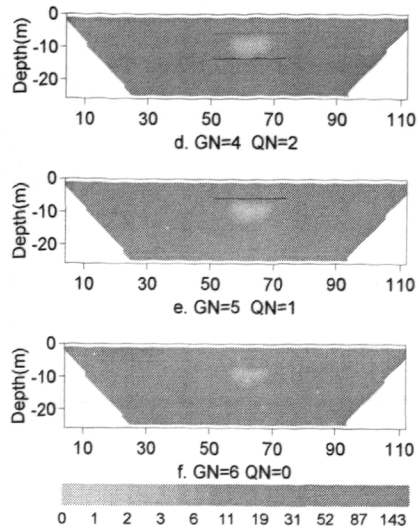
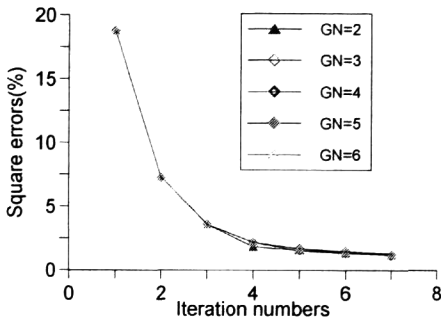
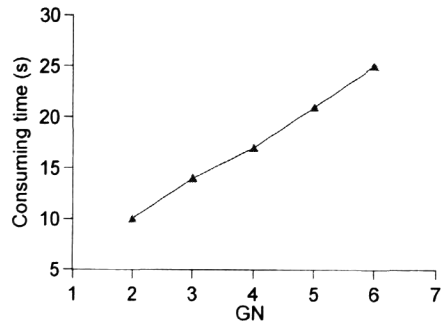


图 4.2 高对比度不同结合方式的反演结果

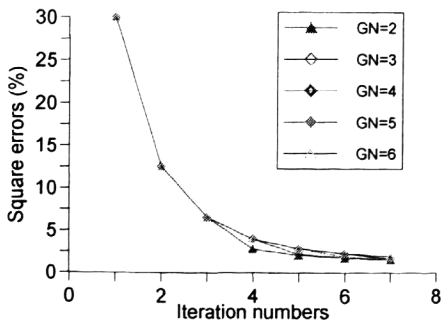


a. 不同 GN 下的误差收敛曲线

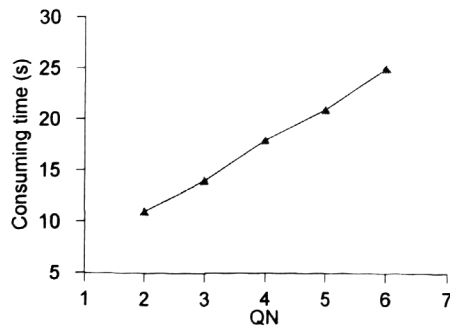


b. 不同 GN 下的耗费时间曲线

图 4.3 对低对比度数据反演的误差收敛和耗费时间对比结果



a. 不同 GN 下的误差收敛曲线



b. 不同 GN 下的耗费时间曲线

图 4.4 对高对比度数据反演的误差收敛和耗费时间对比结果

算例二：为进一步验证两种方法结合的可行性，现对图 4.5 所示地电模型采用对称四极微分测深（VES）装置进行正演，电测深点数 10 个，点号从 1000~1800，间距 20 米，最大电极距（ $AB/2$ ）220 米。在反演时，将两种方法以不同的方式结合计算雅克比矩阵，图 4.6 为其相应的模拟和反演结果。从图中可以看出，经反演后的断面图可以清晰分辨出地垒构造，即使仅第一次迭代采用互换原

理计算雅克比矩阵，其余迭代采用 Broyden 更新技术，反演结果仍然很好，且经 6 次迭代后的均方误差为 1.5%。随着 GN 的增加，反演断面的分辨率和误差收敛曲线下降的幅度没有明显改善，但是反演耗费时间却呈正比例递增，如图 4.8。

为研究用 Broyden 更新技术计算雅克比矩阵的稳健性，对全部模拟数据加入 $[-10\% \sim 10\%]$ 的随机噪音，并再次对其以相应的结合方式进行反演，相应的视电阻率断面和反演结果如图 4.7。可以看出，对异常的分辨率基本没有降低，并且反演仍能稳步收敛。对于 $GN=1$ 、 $QN=5$ 的情况，迭代后的均方误差为 5.6%。随着 GN 的增加，误差收敛曲线下降均能稳步下降，耗费时间与加入噪音前相当，如图 4.9。说明将两种方法结合对含有噪音的数据进行反演，仍然是可行的。

综上所述，采用 Broyden 更新技术的方法计算雅克比矩阵是可行的。并且考虑到误差收敛曲线主要在前三次有明显下降，以及野外实测数据存在随机噪音，所以为确保每次反演迭代都能稳步收敛，在前两次或三次迭代时，采用互换原理计算雅克比矩阵，在后续迭代中采用 Broyden 的近似计算方式。在不降低分辨率的情况下，可大大加快反演的速度。

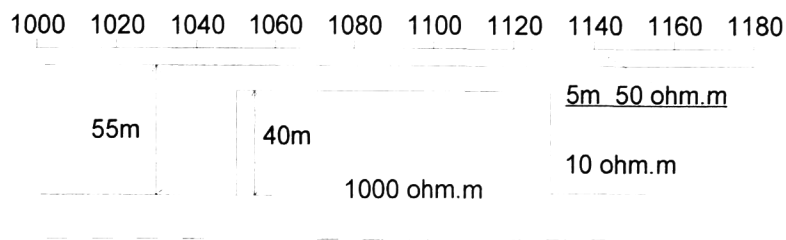
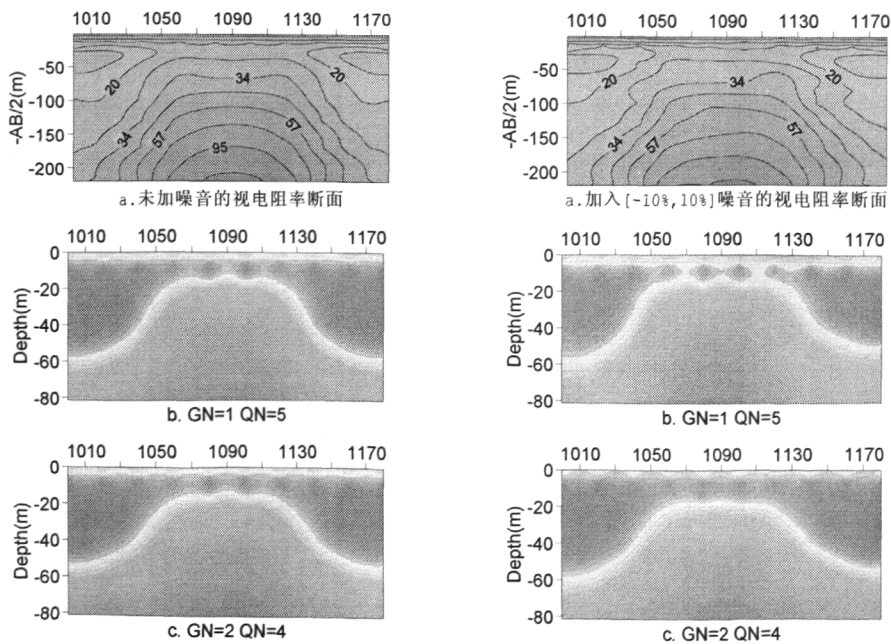


图 4.5 地垒构造地电模型示意图



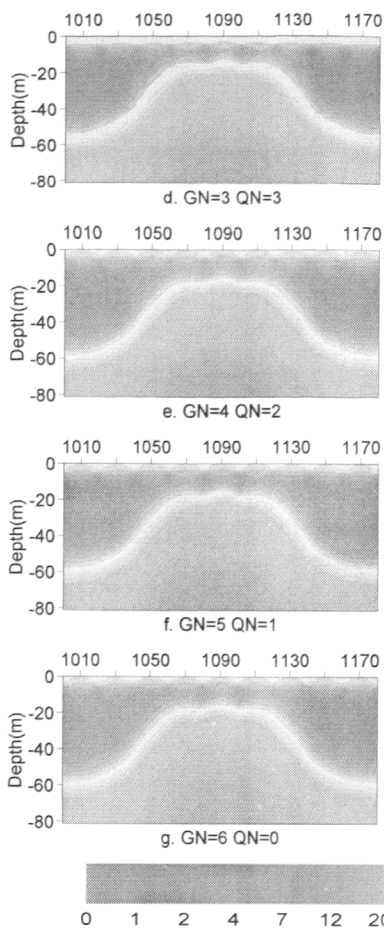


图 4.6 对无噪音数据的反演结果

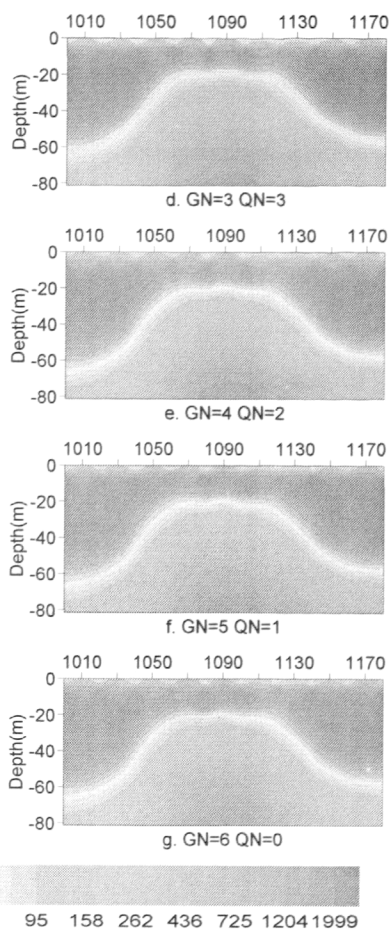
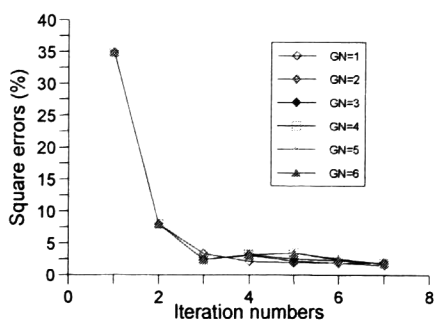
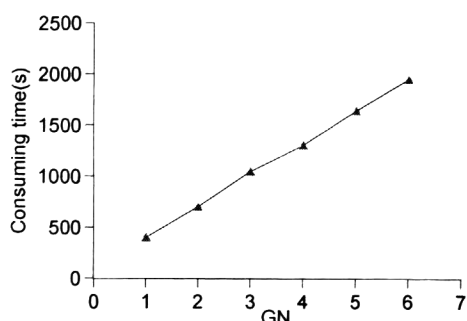


图 4.7 对有噪音数据的反演结果

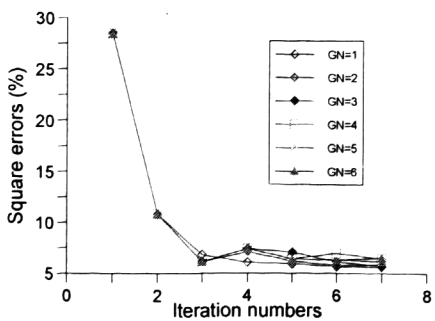


a. 不同 GN 下的误差收敛曲线

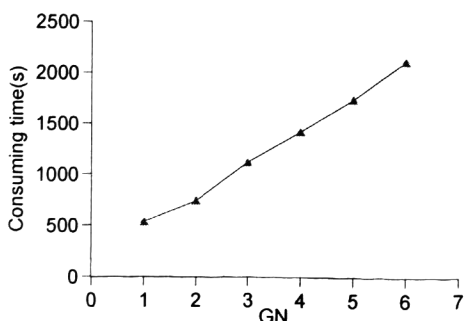


b. 不同 GN 下的耗费时间曲线

图 4.8 对无噪音数据反演的误差收敛和耗费时间对比结果



a. 不同 GN 下的误差收敛曲线



b. 不同 GN 下的耗费时间曲线

图 4.9 对噪音数据反演的误差收敛和耗费时间对比结果

4.3 垂直激电测深 (VES) 二维反演

目前, 国内外关于激电数据二维正反演方面的研究较多^{[19-21][46-49][99]}, 并且正反演方法已基本趋于成熟, 而且还开发了较成熟的商业反演软件。如国外的 Res2DInv 和 EarthImager2D 软件, 以及桂林工学院以阮百尧教授为首开发的直流激电二维正反演系统, 都已经取得了很好的应用效果^{[91][92]}。但这些反演软件基本上都是针对高密度激电数据进行反演, 这主要由于其数据采集时相邻电极间距相等, 因此便于有限元网格剖分, 易于进行正反演。而对于常规的垂直激电测深 (如对称四极、三极微分装置和等比装置等) 法, 由于其电极距一般以 6.25 为模数的等对数间隔逐渐增大, 使得网格单元剖分在横向上由密到疏, 呈现出不规则性, 因此不方便或难于进行正演模拟和反演计算。而且常规激电测深对电极的利用率不高, 不重复的电极数较多, 使得横向的网格剖分数较多; 最大供电电极距较大, 使得纵向网格的剖分数较多, 故节点总数很大, 因此正反演计算比较耗时, 这些原因是将直流激电测深二维反演应用到实际的一大障碍。据此, 本节在前人研究工作的基础上, 对常规激电测深二维反演所涉及的一些技术难点进行探讨。在正演过程中, 根据实测数据进行有限元网格自动剖分, 并采用双网格系统^{[100][101]}, 即用细网格进行正演模拟, 用粗网格反映地下电性特征; 由于场源和边界的影响, 使得模拟结果存在误差, 要对其进行校正, 以提高正演计算的精度。在反演过程中, 我们采用前面给出的最小二乘广义线性反演; 利用互换原理和拟牛顿的方法计算偏导数矩阵; 采用变阻尼共轭梯度法求解偏导数矩阵方程。

反演的基础是正演, 在最优化反演过程中, 每次模型修改后都需要进行正演模拟。为能更好的处理地下复杂地质情况, 我采用相邻节点间电导率双线性连续的有限单元法进行正演模拟^[49], 具体计算过程不再赘述。下面主要针对正反演所采用的网格系统、正演模拟的误差校正以及反演中初始模型的给定三个问题进行探讨。最后通过对模拟数据和实测数据进行反演试算, 验证方法的可行性。

4.3.1 有限元网格剖分

由于常规激电测深电极距的不规则性, 使得网格剖分在横向上呈现密、疏、密...等形态, 不方便正演模拟, 所以选择双网格系统, 即用细网格进行正演模拟; 用粗网格进行反演, 反映地下电性特征的变化, 这样就可以很好的解决横向网格剖分问题。在纵向上, 粗细网格剖分形式相同, 并且从上到下, 网格剖分间距由小到大, 也就是先给定首层网格间隔(要尽量的小一些, 以减少近场源的影响), 其余网格间隔按大于 1 的倍数 (如 1.2) 向下增加, 在保证计算精度的情况下, 减少网格剖分数, 节省计算时间。具体实现过程为:

首先根据同一条测线上所有测深点的相对位置构成横向上的粗网格, 并根据测深点所能达到的勘探深度确定研究区域的纵向网格剖分, 那么就可以将红线区

域的网格用于反演来反映地下电性特征的变化,如图 4.10。对于正演网格,可以根据每个测深点的供电和测量极距关系,并按照相应的位置叠加到粗网格之上,便构成正演模拟网格。为保证正演模拟的精度,在网格的左、右和下边缘做一定程度的网格外延,这样就可以形成一套包括正演和反演网格在内的整体网格剖分系统。

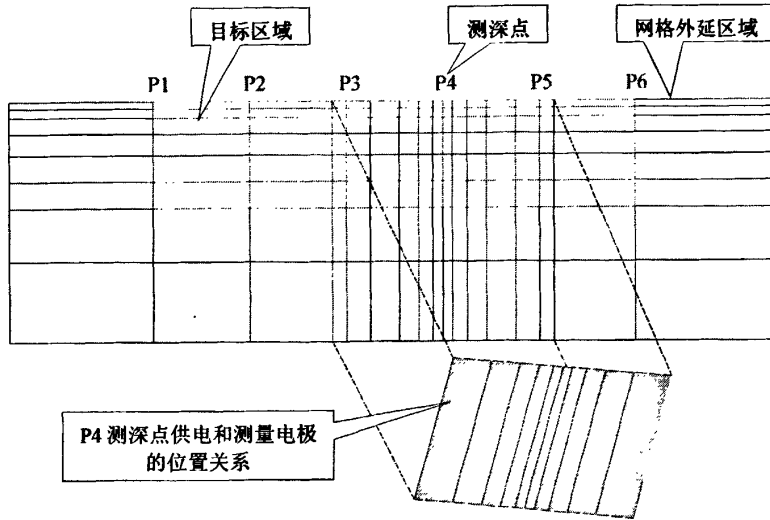


图 4.10 垂直电测深二维正反演网格剖分示意图

4.3.2 场源和边界影响的误差校正

不论用何种数值模拟方法进行正演计算,都会受到边界影响,因为计算区域不可能取无穷大,而实际的区域却是无穷大。本文为了减少有限的边界对计算精度带来的影响,在采取常规方法(外延网格)处理后,笔者又给出了模拟误差校正公式

$$\rho_{ci} = \frac{s \cdot \rho_{ci}}{\rho_{si}}, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (4.3-1)$$

式中 s 为模型的背景电阻率; ρ_{si} 为当地下空间电阻率为背景电阻率时所正演计算得到的视电阻率; ρ_{ci} 为每次反演迭代正演模拟的视电阻率; ρ_{ci} 为校正后的视电阻率; i 为与实测视电阻率对应的模拟视电阻率的序号, n 为实测数据的个数。显然,如果正演计算方法没有任何误差,且地形水平,则 $\rho_{si} = s, \rho_{ci} = \rho_{ci}$ 。

经数值计算验证,用(4.3-1)式进行校正,不仅能够消除有限边界带来的误差,而且还能提高场源附近小极距的正演模拟的精度。

4.3.3 非均匀初始模型的给定

对于广义线性反演方法,初始模型的好坏直接影响着反演结果对真解的逼近程度。在电阻率反演当中,通常情况下都是给定一均匀初始模型,容易造成反演

断面中异常边界模糊，甚至造成异常移位。如下面某地实测电阻率数据（如图 4.11.a）的反演结果，当给定均匀初始模型进行反演时，715—735 之间的低阻异常被严重平滑掉了，如图 4.11.b；而采用非均匀初始模型进行反演时，715—735 之间的低阻异常得到较好的反映，如图 4.11.c。在 730 号点经钻孔验证：0~9.8m 为粘土；9.8~15.2m 为白云质灰岩；15.2~18.6m 为含砾粘土，18.6~72.8m 为白云质灰岩、灰岩，其中 67.3~73.6m 为溶洞。这也充分说明了当给定一相对较好的初始模型时，将能够得到一优于均匀初始模型的反演结果。因此，对如何给定一较优的初始模型也是有一定的研究意义的。

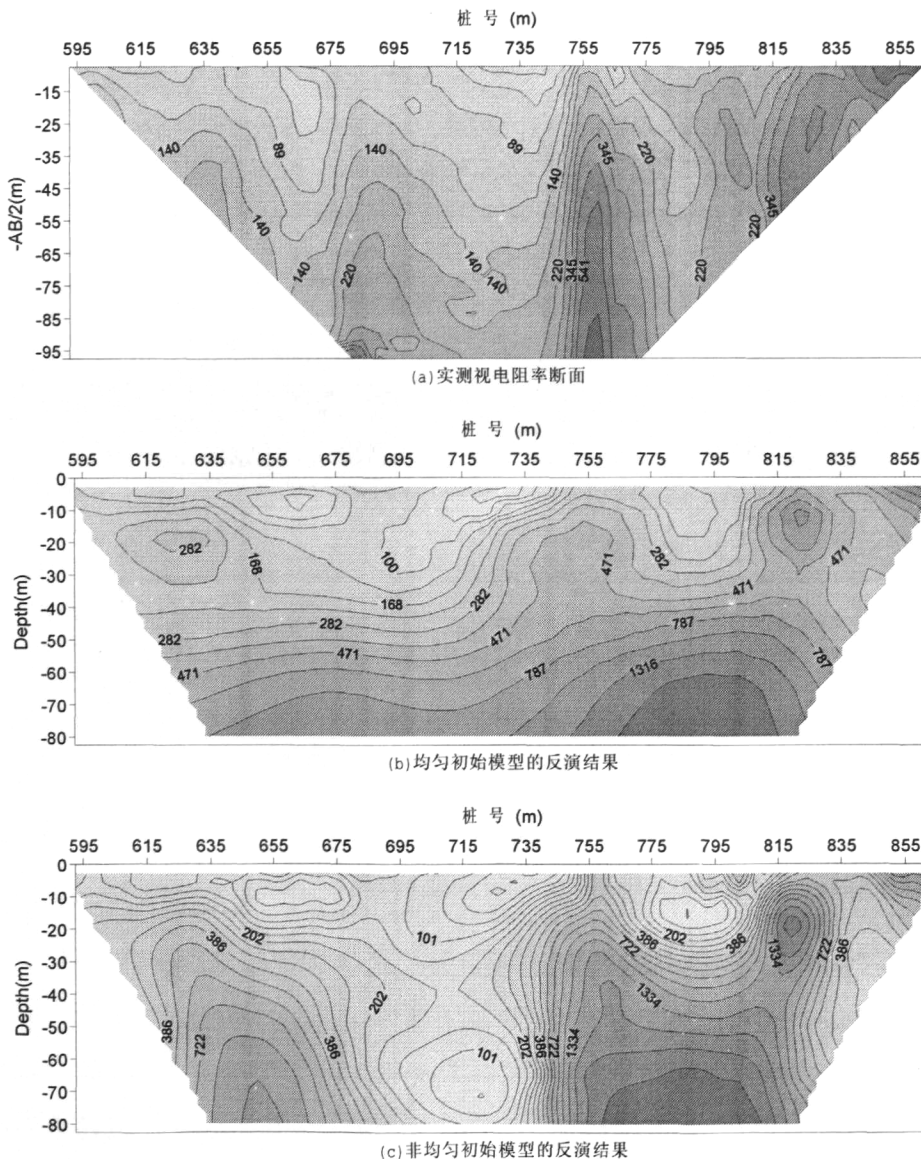


图 4.11 均匀和非均匀初始模型的反演结果对比

根据上面的反演结果我们能够看出，初始模型的好坏对反演结果是有直接影响的，所以本文根据电测深的直接反演方法给定初始模型，以改善反演结果。其中直接反演公式为^[102]

第 i 层的近似真实电阻率为

$$\rho(i) = \begin{cases} \rho_s(i) \sqrt{\frac{1+d_{si}}{1-d_{si}}} & d_{si} \geq 0 \\ \rho_s(i) \sqrt{\frac{8+d_{si}}{8-d_{si}}} & d_{si} < 0 \end{cases}, \quad (4.3-2)$$

第 i 层对应的近似厚度为

$$\Delta h(i) = \begin{cases} [r(i) - r(i-1)] \cdot \sqrt{1-d_{si}^2} & -1 < d_{si} < 0.8 \\ 0 & \text{其它} \end{cases}, \quad (4.3-3)$$

$$\text{而 } \rho(i) \text{ 所对应的深度为 } h(i) = \sum_{j=1}^i \Delta h(j), \quad (4.3-4)$$

其中 $\rho_s(i)$ 为第 i 个电极距 r_i 测得的视电阻率; $d_{si} = (d \log \rho_s / d \log r)_i$ 为电测深曲线在第 i 个电极距 $r(i)$ 处的梯度。

电测深曲线的梯度 d_i 可采用第一类边界条件下的三次样条函数求导方法进行计算, 它是非等间距条件下求导的一种有效方法。在 6.25 模数的双对数坐标中, 可令

$$\text{纵坐标: } y_i = 6.25 \cdot \log \rho_s(i)$$

$$\text{横坐标: } x_i = 6.25 \cdot \log r(i)$$

则对电测深曲线进行求导的计算步骤可归纳为

① 计算首尾结点的导数。

首先利用列维尔 (Neville) 线性插值沿首尾结点内插四个结点, 插值节点及列维尔 (Neville) 插值公式为^[103]

$$x_j = x_0 + j \cdot h \text{ 及 } x_{n-j} = x_n - j \cdot h, \quad j = 1, 2, 3, 4$$

$$I_{0,1,\dots,k+1}(x) = I_{0,1,\dots,k}(x) + \frac{I_{1,2,\dots,k+1}(x) - I_{0,1,\dots,k}(x)}{x_{k+1} - x_0} (x - x_0), \quad (4.3-5)$$

其中步长 h 的取值可为 0.1。利用列维尔插值法内插出前后各四个节点后, 再利用五点求导公式求出边界导数, 五点边界求导公式为

$$d_1 = \frac{1}{12h} [-25y(x_0) + 48y(x_1) - 36y(x_2) + 16y(x_3) - 3y(x_4)], \quad (4.3-6)$$

$$d_n = \frac{1}{12h} [3y(x_{n-4}) - 16y(x_{n-3}) + 36y(x_{n-2}) - 48y(x_{n-1}) + 25y(x_n)], \quad (4.3-7)$$

② 再利用三次样条函数求导方法求出其余 $n-2$ 个结点的一阶导数。

③ 负值校正: 当 d_i 为正值时, $d_{si} = d_i$; 当 d_i 为负值时, 需要校正^{[104][105]}, 其校正公式为:

$$d_{si} = \frac{d_i \cdot (1-d_i)}{1.05 \cdot (1-d_i) + d_i^2}, \quad (4.3-8)$$

将梯度 d_{y_i} 代入(4.3-2)~(4.3-4)式,便可计算出近似真电阻率及其对应的深度,并通过二维插值可得到网格节点上的初始模型参数值。

4.3.4 激电测深数据反演实例

为验证上述计算过程的正确性和可行性,最终开发了实用的直流激电测深二维反演程序。由于网格剖分的完全自动化,只需给定电测深点的桩号、供电和测量电极距以及实测的视电阻率和极化率数据,便可方便快捷的完成二维自动迭代反演。下面对模拟数据和实测数据进行反演试算。

一. 模拟数据反演

首先假定地下介质由两层组成,第一层底界面深 5m,电阻率为 $50\Omega\text{m}$,极化率为 2%。第二层介质电阻率为 $10\Omega\text{m}$,极化率为 1%,并且在其内部有一电阻率为 $1000\Omega\text{m}$ 、极化率为 5%的方形柱体,其顶板和底板距地面分别为 12m 和 50m。然后采用对称四极微分测深装置进行正演,电测深点数 10 个,间距 20m,最大电极距 220m,不重复电极数 207,横向网格节点 217,纵向网格节点 25,图 4.12.a 和 4.12.b 为视电阻率和视极化率的模拟结果。然后对其进行反演,经过 6 次反演迭代后(前两次采用互换原理计算偏导数矩阵,后四次采用 Broyden 技术),平均均方拟合差为 3.7%。电阻率和极化率的反演结果分别如图 4.12.c 和 4.12.d,从断面图上可以看出,异常形态基本被反映出来,反演效果较好。

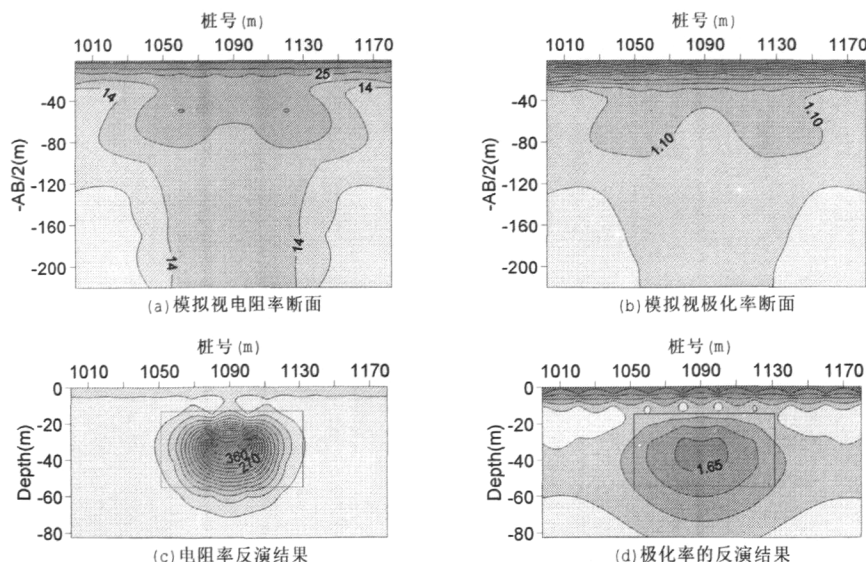


图 4.12 模拟视电阻率/视极化率的反演结果

二. 实测数据反演

下面对某工地水资源勘查实测数据进行反演。测量方式为对称四极等比测深 ($MN/AB=1/5$),测深点个数为 6,点距 20m,最大电极距 ($AB/2$) 为 350m。经过 6 次迭代反演后(前两次采用互换原理计算偏导数矩阵,后四次采用 Broyden

技术), 平均均方拟合差为 4.96%。反演数据断面与实测数据断面对比结果如图 4.13, 可以看出, 反演结果极大的克服了原始数据“相位”滞后的缺点。在对地下异常体的分辨能力上, 也有了相当大的改善。资料解释为浅部砂砾石层含水, 中间低阻异常为泥质粉砾岩的反映, 深部高极化是由基底灰岩含碳质引起的, 与后期钻探结果相吻合。

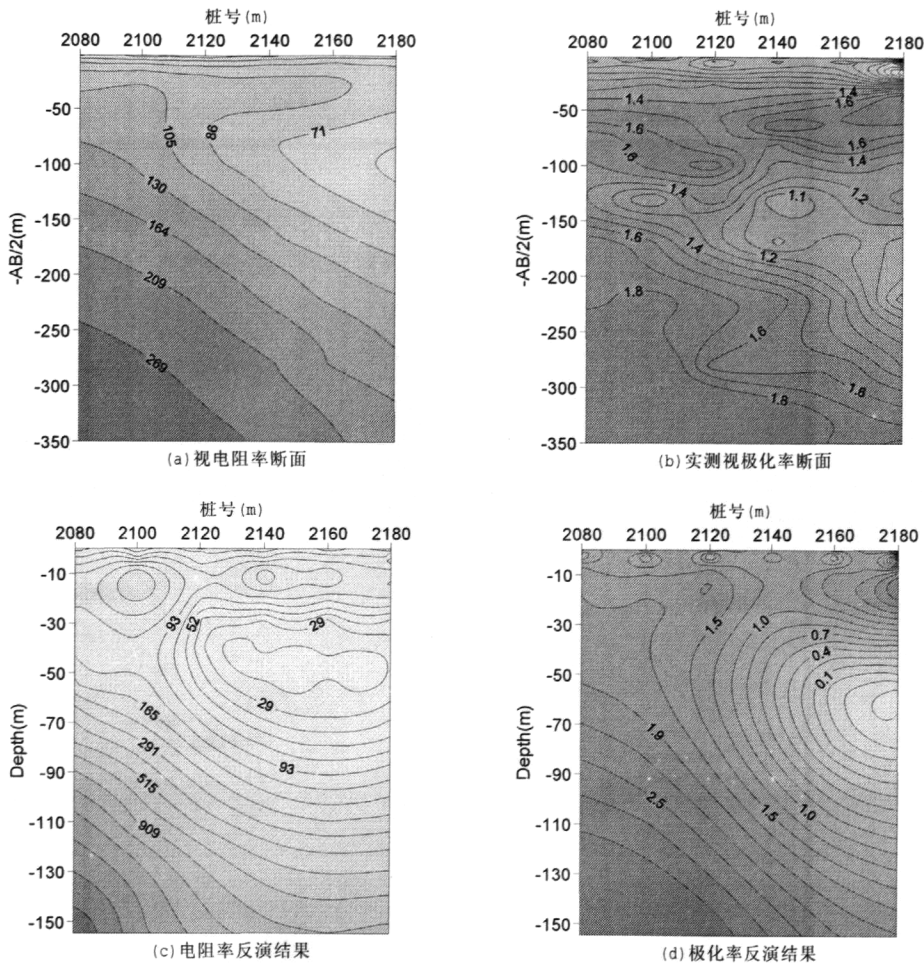


图 4.13 实测视电阻率/视极化率的反演结果

4.4 电阻率最小二乘间歇反演

为了了解地下介质的物理特性随时间的变化, 地球物理监测已经被广泛的用于解决地质问题, 如溶洞或裂隙注浆前后的物性变化、边坡滑动面的监测、油田抽油过程中剩余油的监测等。一个常用的途径就是通过独立反演不同时刻采集的地球物理数据来重构时间间歇影像, 这样使得实测的数据信息得不到充分的利用。Loke^[106](1999)做过这方面的研究, 仅仅应用第一次观测数据的反演结果作为先验信息或参考模型来试图减少反演的多解性。但笔者认为, 仅应用第一次观测数据的反演结果作为参考模型, 那么后续的时间间歇影像也许会强烈的依赖于该参考模型, 那么首次观测数据的反演结果的好坏, 直接影响着后续观测数据的

反演结果。

在本节当中，提出了一种同时反演所有不同时刻观测数据的新方法，即通过一次反演过程来获得所有不同时刻的地下模型。在反演过程中，引入时间和空间正则化方法来改善反演的稳定性和减少反演的多解性。通过对直流电阻率数据的反演试算来验证所提算法的性能。

4.4.1 最小二乘间歇反演方程的建立

假定进行了 k 次测量，并且每次测得的数据个数为 n ，那么，时间间歇反问题也就是从 k 组测量数据向量 $\mathbf{d}_i = (d_{i1}, d_{i2}, \dots, d_{in})$ 确定 k 组模型向量 $\mathbf{m}_i = (m_{i1}, m_{i2}, \dots, m_{in})$ ，其中 $i = 1, 2, \dots, k$ 。为实现不同时刻监测数据的同时反演，在整个监测周期内，使数据残差平方和

$$\Phi_d = \sum_{i=1}^k \|\Delta \mathbf{d}_i - \mathbf{A}_i \Delta \mathbf{m}_i\|_2^2, \quad (4.4-1)$$

最小。其中 $\Delta \mathbf{d}_i$ 为第 i 个监测周期的数据残差向量； \mathbf{A}_i 为第 i 个监测周期的偏导数矩阵； $\Delta \mathbf{m}_i$ 为第 i 个监测周期的模型参数的改正向量。在空间域上，对模型施加总体光滑约束，则空间域的约束函数为

$$\Phi_{ms} = \sum_{i=1}^k \|\mathbf{C}(\mathbf{m}_i + \Delta \mathbf{m}_i)\|_2^2, \quad (4.4-2)$$

其中 \mathbf{m}_i 为第 i 个监测周期的预测模型参数向量； \mathbf{C} 为光滑度矩阵。在时间域上，假定地下模型是随时间渐近变化的，也就是后续观测数据的地下模型为前期地下模型在时间轴上外延。则时间域的约束函数为

$$\Phi_{mt} = \sum_{i=1}^k \left\| \mathbf{m}_i + \Delta \mathbf{m}_i - \sum_{l=1}^{i-1} \alpha_l \mathbf{m}_l \right\|_2^2, \quad (4.4-3)$$

其中 \mathbf{m}_l 为第 l 个监测周期的预测模型参数向量； α_l 为与相邻监测周期的时间间隔有关的系数，即

$$\alpha_l = (1/s_l) / \sum_{j=1}^{l-1} (1/s_j) \quad \text{且} \quad s_l = \sum_{j=1}^l t_j, \quad (4.4-4)$$

其中 t_j 为第 j 与 $j+1$ 个监测周期的时间间隔。接着在空间域和时间域分别引入阻尼因子 λ_s 和 λ_t ，最终得到的目标函数为

$$\begin{aligned} \Phi &= \Phi_d + \lambda_s \cdot \Phi_{ms} + \lambda_t \cdot \Phi_{mt} \\ &= \sum_{i=1}^k \|\Delta \mathbf{d}_i - \mathbf{A}_i \Delta \mathbf{m}_i\|_2^2 + \\ &\quad \lambda_s \sum_{i=1}^k \|\mathbf{C}(\mathbf{m}_i + \Delta \mathbf{m}_i)\|_2^2 + \lambda_t \sum_{i=1}^k \left\| \mathbf{m}_i + \Delta \mathbf{m}_i - \sum_{l=1}^{i-1} \alpha_l \mathbf{m}_l \right\|_2^2, \end{aligned} \quad (4.4-5)$$

将方程(4.4-5)对每个模型扰动向量 $\Delta \mathbf{m}_i$ 取极小，给出下面的方程

$$(A_i^T A_i + \lambda_s C^T C + \lambda_t \cdot I) \Delta \mathbf{m}_i = A_i^T \Delta \mathbf{d} - \lambda_s C^T C \mathbf{m}_i + \lambda_t \left(\sum_{l=1}^{i-1} \alpha_l \mathbf{m}_l - \mathbf{m}_i \right), \quad (4.4-6)$$

令 $\mathbf{m}_i = \sum_{l=1}^{i-1} \alpha_l \mathbf{m}_l$ ，上式也等价于下面的线性方程

$$\begin{bmatrix} A_i \\ \sqrt{\lambda_s} \cdot C \\ \sqrt{\lambda_t} \cdot I \end{bmatrix} \Delta \mathbf{m}_i = \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{d}_i \\ -\sqrt{\lambda_s} \cdot C \mathbf{m}_i \\ \sqrt{\lambda_t} \cdot (\mathbf{m}_i - \mathbf{m}_i) \end{bmatrix}, \quad (4.4-7)$$

通过求解方程(4.4-7)，可得到第*i*个监测周期的模型改正向量 $\Delta \mathbf{m}_i$ ，将其代入

$$\mathbf{m}_i^{q+1} = \mathbf{m}_i^q + \Delta \mathbf{m}_i^q, \quad (4.4-8)$$

中，便得到第*q*次反演迭代中第*i*个监测周期的预测模型参数向量 \mathbf{m}_i^{q+1} 。通过同时反演不同时刻观测的数据体，可将前期观测数据体的反演结果作为后期数据反演的约束。这样仅通过一个反演过程，便完成不同监测周期的所有地下模型，使得前期的观测信息得到了充分的利用。

4.4.2 间歇反演过程

在间歇反演中，可将间歇反演过程分为顺次反演和同时反演。

顺次反演：它的反演次序是按监测数据体的先后顺序顺次进行的，并且在反演中以前一数据体的反演结果作为下一监测周期数据体反演的初始模型，以前期监测数据体的最终反演结果作为后期监测数据体反演的约束或参考模型。反演过程如图 4.14，其中纵向为反演的迭代序号 $i=1,2,\dots,n$ ，*n* 为反演迭代的次数；横向为间歇反演数据体随时间的编号 $j, j=1,2,\dots,m$ ，*m* 为监测数据体的个数； $[i,j]$ 表示第 *j* 个数据体的第 *i* 次迭代。

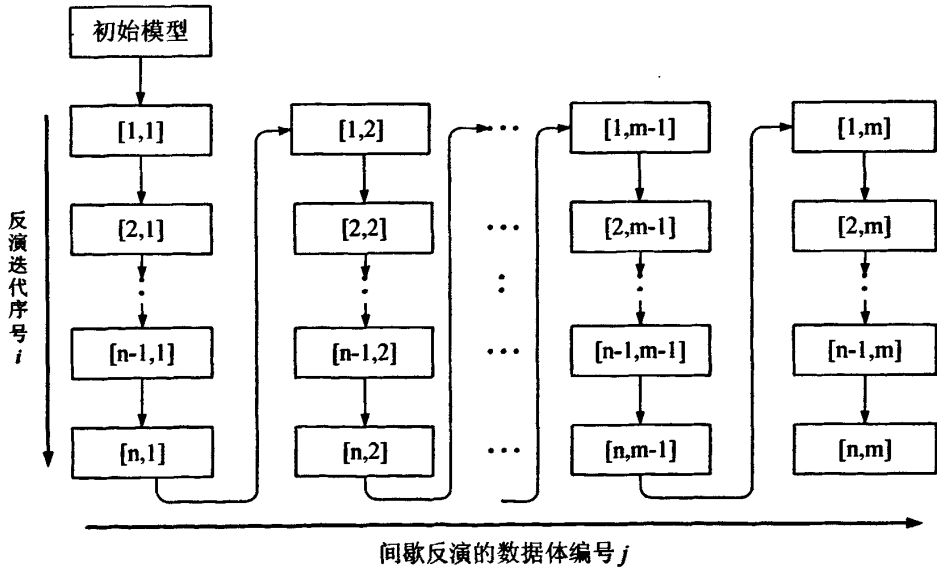


图 4.14 顺次反演过程流程图

同时反演：它的反演次序是先进行第 1 个数据体的第 1 次迭代，再进行第 2 个数据体的第 1 次迭代，直至第 m 个数据体的第 1 次迭代。然后再进行第 1 个数据体的第 2 次迭代，直至第 m 个数据体的第 2 次迭代。如此下去，直至第 m 个数据体的第 n 次迭代，反演过程如图 4.15。在反演过程中，它是将前期监测数据的中间迭代结果作为后期监测数据反演迭代的约束或参考模型。

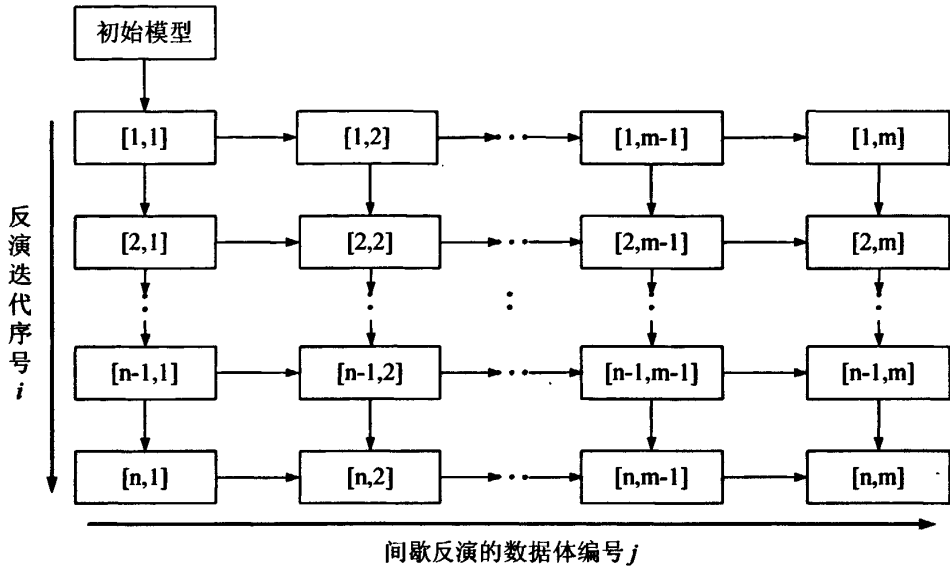


图 4.15 同时反演过程流程图

对于上述两种间歇反演过程，从理论上讲，最终得到的反演结果将是相同的，但是第二种反演方案要复杂的多，它不便于与拟牛顿法结合，如果结合，要存储 m 个偏导数矩阵，占用大量的内存。

4.4.3 模拟数据的间歇反演实例

为验证上述间歇反演算法的可行性，下面对模拟的视电阻率监测数据进行间歇反演试算。

算例一：地下由两层介质组成，第一层介质电阻率为 100 欧姆米，第二层介质电阻率为 500 欧姆米。在第二层介质当中有一低阻导体，在五次监测周期内是逐渐变化的，初始电阻率为 100 欧姆米（周期一），接着随时间顺次减小到 65 欧姆米（周期二）、40 欧姆米（周期三）、20 欧姆米（周期四）、10 欧姆米（周期五），如图 4.16。然后对 5 个模型分别采用温纳 alpha 装置进行正演模拟，再分别采用独立反演方法和上述方法进行反演。反演结果如图 4.17，其中图 4.17.a1~a5 为上述方法的反演结果；图 4.17.b1~b5 为独立反演结果。从图上可以看出，同时反演方法在对异常形态的反映方面要优于独立反演方法，特别对异常底边界的反映上，独立反演结果显示了较严重的假象。

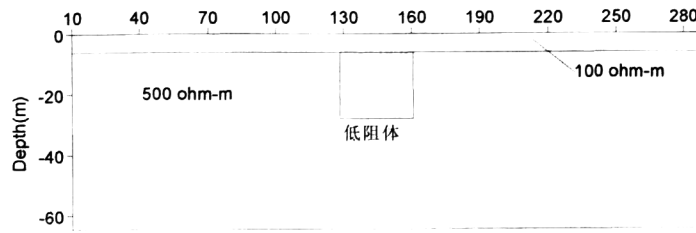


图 4.16 地电模型一

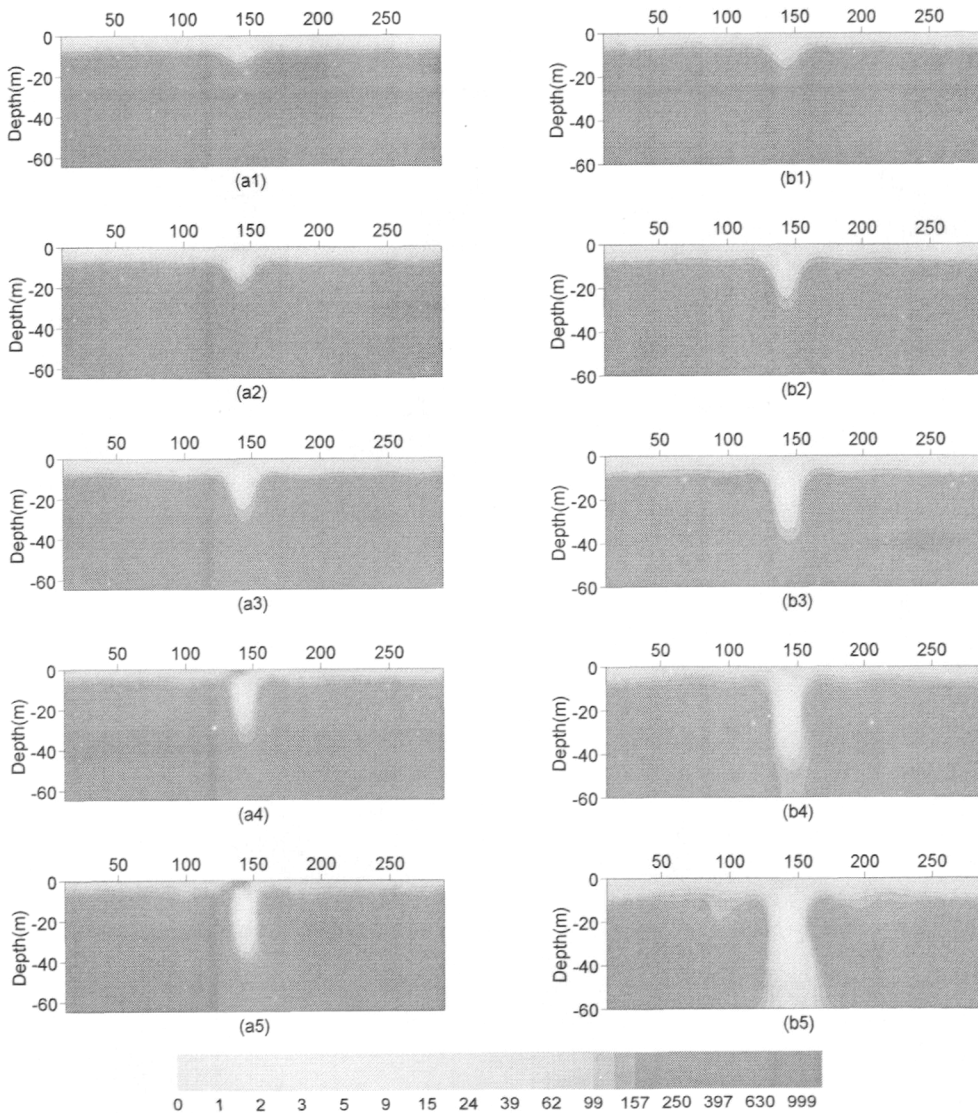


图 4.17 间歇和独立反演结果对比

算例二：为了更好的考察探测区内的异常变化，以第一个数据体的反演结果 m_0 作为背景，后续监测周期的反演结果 m_i 与背景的比 m_i^r 作为输出结果，即

$$m_i^r = m_i / m_0, \tag{4.4-9}$$

这样可以更好的反映异常区的渐进变化情况。

下面采用跨孔 dipole-dipole 偶极观测方式进行电阻率模拟。60 根电极分布于井中和地表，其中两测井和地表分别布设 20 根电极，相邻电极间隔 2 米，两测

井相隔 38 米。实验模型如图 4.18，地下由两层介质组成，第一层介质电阻率为 50 欧姆米，第二层介质电阻率为 100 欧姆米。在第二层介质当中有一高阻体，它在五个监测周期内是逐渐变化的，初始电阻率为 100 欧姆米（周期一），接着随时间顺次减小到 200 欧姆米（周期二）、300 欧姆米（周期三）、400 欧姆米（周期四）、500 欧姆米（周期五）。然后对五个监测周期的模拟电阻率数据进行同时反演，并将周期二到周期五的反演结果与周期一的反演结果的比作为输出结果，如图 4.19.a~d。从图中可以看出，仅在电性有明显变化的区域出现等值圈闭。并且从周期二到周期五，异常区的比值逐渐增大，等值线也逐渐变密，可以方便的对异常进行分析解释。

本节给出了一种新的最小二乘间歇反演算法，将前期所有观测数据的反演结果作为后期数据反演的约束，通过一次反演过程就可获得不同时间的所有地下模型，并且通过模型试算来看，它比传统独立反演方式产生的虚假异常要少。将后续周期的反演结果与第一周期的反演结果的比值作为一种分析方式，可以更好的反映异常区的渐进变化情况。在本节中，虽然仅对电阻率监测数据进行了反演，但所给的反演算法依然适用于其它地球物理监测数据的反演。

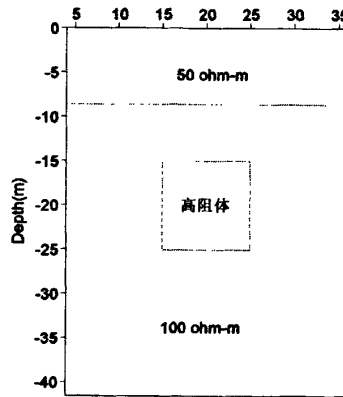
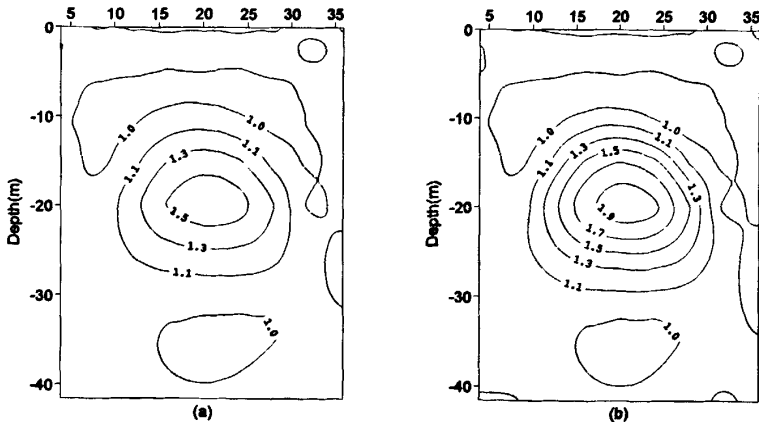


图 4.18 地电模型二



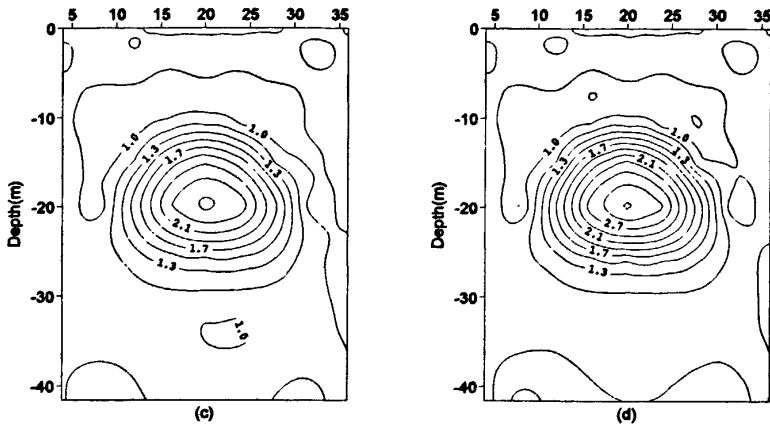


图 4.19 后续周期与周期一反演结果的比值等值线图

4.5 复杂条件下的三维直流激电数据反演及应用拓展

近十年,随着计算机技术、直流激电仪器的快速发展,直流激电数据的三维反演方法研究也取得了很大的进展。如 Zhang (1995)^[32]、吴小平(1998, 1999, 2000, 2001)^[33-36]实现了有限差分共轭梯度算法的三维电阻率正反演; Li 和 Oldenburg^[96](1999)实现了三维极化率反演;黄俊革(2003)^[107]实现了有限元法的三维电阻率和极化率反演,然而这些反演是以地形水平为前提的。吴小平(2005)^[108]采用有限差分法实现了非平坦地形条件下电阻率三维反演,并且在反演过程中采用六面体网格剖分,可以想象它难以处理复杂的地形条件。所以对复杂条件下的三维直流激电数据的正、反演方法进行研究是有必要的。

在本节中,将解决复杂条件下三维直流激电数据的反演问题。所谓复杂条件,即复杂的地形条件和复杂的观测方式。复杂的地形条件即指地形可以是起伏的;复杂的观测方式即指任意的供电和测量电极位置,电极可位于地表或地下。对于笔者来说,解决好这两个问题是一个很大的挑战。复杂条件下三维直流激电反演可以说是一个复杂的系统工程,它涉及到多个重要环节,如起伏地表大量网格节点的高程插值、地下介质的网格剖分、正演中刚度矩阵元素的存储及其方程的求解以及正、反演的计算精度和效率问题。虽然本文题目是以反演方法研究为主线,但是在本节中,笔者依然对正演中所涉及到一些关键问题进行研究,能使三维直流激电反演所涉及到的一些技术问题得到完善,并使其能够应用到三维实测激电数据的反演当中。为验证算法的有效性,最后对起伏地形条件下的三维直流激电数据进行测算。

4.5.1 起伏地表网格节点的高程插值

对于复杂的地形条件,要给出地表网格节点的高程,如果依靠手工给出,工作量是相当大的。对此,可以先给出测区内地形起伏较大点的坐标和高程,然后

再通过二维插值的方法计算出其它网格节点的高程。选择的插值方法插值精度要高，计算速度要快，这里提出了按方位取点局部多重二次曲面插值方法。

一. 局部多重二次曲面插值算法的基本思想

考虑到多重二次曲面拟合法具有掩盖插值曲面局部特征的缺点^[109]，因此考虑仅在待插点附近搜索少量的已知高程点构造局部多重二次曲面，并将所构造的多重二次曲面上与待插点对应的属性值作为它的插值结果。

为避免局部多重二次曲面插值产生“偏倚”效应，这里采用按方位取点法，即以待插网格点 (i, j) 为中心，将平面分成四个基本象限，再把每个象限分成 n_0 等份，这样就把全平面分成 $4n_0$ 等份，然后以搜索半径 R 在每个等份角域内寻找距 (i, j) 最近的几个已知属性点来构造局部多重二次曲面，如图 4.20。由于受各种因素的影响，实际测量的原始数据点分布不可能很均匀，也就无法给出合理的搜索半径。对此，本文将整个插值区域分成十等份，计算出与每份面积相等的圆的半径，将其作为初始搜索半径 R 。如果在半径为 R 的每个等分角内搜索的已知属性点数达不到事先设定的个数（如 5 个），则以 1.5 倍增大搜索半径，直到搜索的点数达到事先给定的个数，或已达到区域边界，搜索中止；如果在半径为 R 的每个等分角内搜索的已知属性点数多于事先设定的个数，则最近的数据点参与计算。这样处理可以减少因大范围搜索而耗费的时间，同时也增加了插值算法的自适应性。

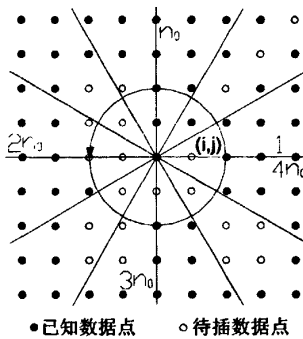


图 4.20 按方位取点法示意图

二. 局部多重二次曲面插值算法的实现过程

在确定好待插点附近几个已知属性点以后，采用圆锥方程

$$\sqrt{(x^2 + y^2) \tan^2 a} = z, \tag{4.5-1}$$

作为曲面函数来构造二次曲面^[109]。其中 z 为 xoy 平面上圆锥顶点的标高； $\tan a$ 为圆锥曲面的斜率。同样，多重二次曲面可以由局部区域内一系列圆锥的顶点建立，根据已知点，可以得到多重二次曲面函数的方程组

$$\sum_{j=1}^n \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} c_j = z_i, \quad i=1,2,\dots,n, \quad (4.5-2)$$

其中 c_j 代表第 j 个属性点相对第 i 属性点所张圆锥面的斜率; (x_i, y_i) 和 (x_j, y_j) 为已知点的坐标; z_i 为已知点的属性值; n 为局部区域已知点的个数。若令

$$A = \begin{vmatrix} 0 & \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} & \cdots & \sqrt{(x_1 - x_n)^2 + (y_1 - y_n)^2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \sqrt{(x_n - x_1)^2 + (y_n - y_1)^2} & \sqrt{(x_n - x_2)^2 + (y_n - y_2)^2} & \cdots & 0 \end{vmatrix}$$

$$C^T = |c_1 \quad c_2 \quad \cdots \quad c_n|$$

$$Z^T = |z_1 \quad z_2 \quad \cdots \quad z_n|$$

则可将(4.5-2)式改写为矩阵形式

$$AC = Z, \quad (4.5-3)$$

上述方程仅有斜率向量 C 为未知向量, 可通过列选主元高斯消去法求解。然后, 将解向量 C 及待插点 (x_p, y_p) 代入下式

$$\sum_{j=1}^n \sqrt{(x_p - x_j)^2 + (y_p - y_j)^2} c_j = z_p, \quad (4.5-4)$$

中, 便可计算出待插点 (x_p, y_p) 的属性值 z_p 。通过重复按方位搜索取点, 并建立局部区域的多重二次曲面, 便可完成整个区域网格节点的二维插值, 所需的计算量很少。在这里我们选择圆锥方程作为曲面函数, 主要由于它具有良好的自适应性。通过增大或减小搜索半径, 能够达到调节插值曲面平滑程度的目的。

三. 局部多重二次曲面插值算法的插值效果

下面通过算例来检验按方位取点局部多重二次曲面插值算法的插值效果。

算例一: 以球面函数 $f(x, y) = (x^2 + y^2)^{1/2}$ 来构造一个理论模型, $x, y \in [-25, 25]$, 并且在 x 和 y 方向上分别以点距 5m 进行取值, 绘制的等值线图如图 4.21.a。从理论上讲, 如果网格化的网格距很小, 那么绘制的等值线应该为光滑的同心圆。而图 2.a 由于网格距较大, 绘制的等值线图在圆心附近出现误差。接着分别采用克里金法、带线性插值的三角剖分法及按方位取点局部多重二次曲面插值法对其以点距 1m 进行网格化, 绘制的等值线图分别如图 4.21.b、4.21.c 和 4.21.d。从图中可以看出, 带线性插值的三角剖分法的网格化结果在中心等值线处出现棱角; 而克里金法和本文方法都能得到光滑的同心圆, 插值效果较好。

算例二: 对于图 4.22.a 所示的山脊地形仿真数据, 分别采用克里金法、带线性插值的三角剖分法及按方位取点局部多重二次曲面插值法对其进行网格化, 网格化结果分别如图 4.22.b~d。可以看出, 对比带线性插值的三角剖分网格化结果(图 4.22.c), 克里金法(图 4.22.b)与本文方法(图 4.22.d)均能得到一个较光滑的曲面, 网格化效果较好。

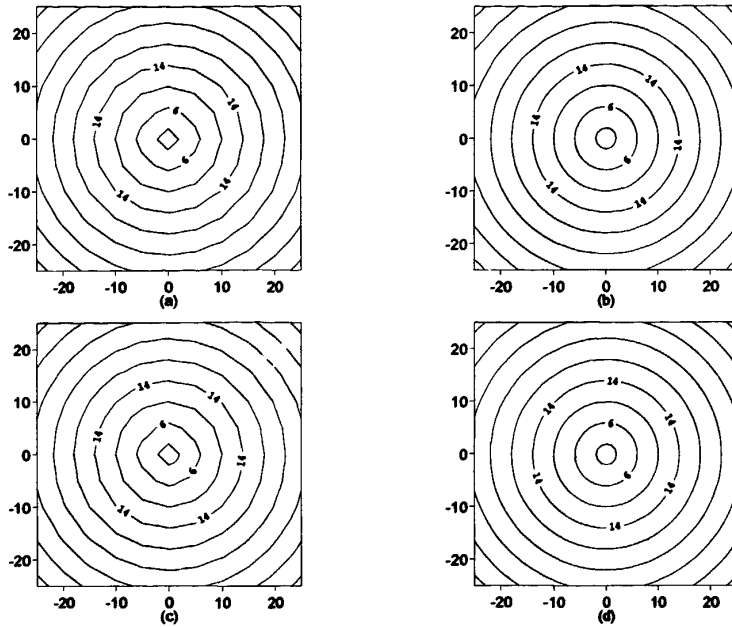


图 4.21 理论模型数据插值对比图

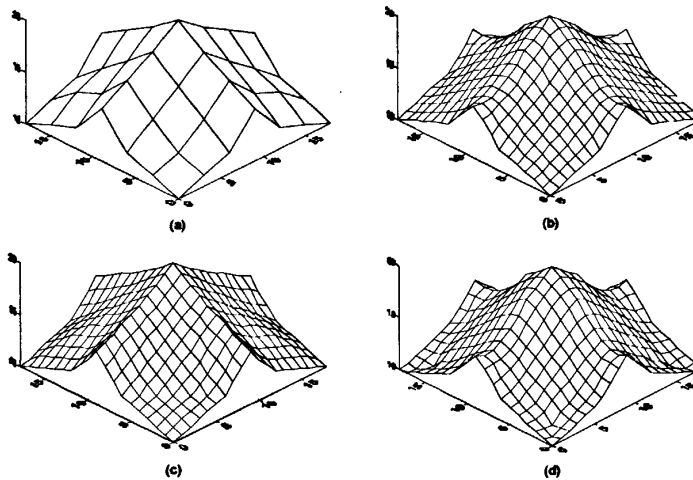


图 4.22 山脊地形数据网格化对比图

从算例可以看出，按方位取点局部多重二次曲面网格化方法采用仅在待插点附近构造多重二次曲面，使得它即保留了多重二次曲面拟合的趋势特征，又改善了原有多重二次曲面拟合法掩盖插值曲面局部特征的缺点。由于采用了按方位取点，避免了因数据点分布不均匀而造成的偏倚效应，能够保证插值曲面的总体特征。从圆锥曲面函数的内在特征和网格化结果来看，该方法比较适合于不规则连续曲面的插值，因此能够用于三维激电反演的起伏地表网格节点的高程插值。

4.5.2 电导率连续变化的点源场三维有限元数值模拟

考虑到地下介质的物性参数在多数情况下是随温度、湿度连续变化的, 阮百尧^[51] (2000) 给出了电导率分块三线性变化的三维电阻率有限元数值模拟方法, 该文在网格的电导率分布上克服了前人均匀分布的缺点^[14], 它较以前的方法更好的反映了实际地电场的变化规律, 提高了计算精度。为更好的模拟起伏地形条件下的地电体, 熊彬 (2003)^[110] 给出了四面体剖分电导率分块均匀的点源三维电场的有限元数值模拟方法。在前人研究的基础上, 给出了四面体剖分电导率分块三线性变化的点源三维电场的有限元数值模拟方法。

一. 三维地电断面点源场总电位的边值与变分问题

三维地电断面点源场总电位 v 的边值问题为^[111]

$$\nabla \cdot (\sigma \cdot \nabla v) = -2I\delta(A) \quad , \quad \in \Omega, \quad (4.5-5)$$

$$\frac{\partial v}{\partial n} = 0 \quad , \quad \in \Gamma_s, \quad (4.5-6)$$

$$\frac{\partial v}{\partial n} + v \cos \theta / r = 0 \quad , \quad \in \Gamma_\infty. \quad (4.5-7)$$

其中 σ 是地下介质的电导率, n 是边界的外法线方向, r 为源点到边界点的矢径, θ 是边界外法线方向 n 和 r 的夹角, δ 是狄利克莱函数; Ω 为总体区域; Γ_s 为地表边界; Γ_∞ 为无穷远边界。与上述边值问题等价的变分问题为

$$\begin{cases} F(v) = \int_{\Omega} \left[\frac{1}{2} \sigma (\nabla v)^2 - 2I\delta(A)v \right] d\Omega + \frac{1}{2} \int_{\infty} \frac{\sigma \cos \theta}{r} v^2 d\Gamma, \\ \delta F(v) = 0 \end{cases} \quad (4.5-8)$$

二. 四面体剖分电导率连续变化的有限单元法

为更好的适应地形及网格剖分的通用性, 首先将整个积分区域剖分成许多六面体单元, 然后再将每个六面体单元剖分成六个四面体^[110], 如图 4.23。

对于任一四面体单元, 假设四面体单元内电位 v 和电导率 σ 线性变化, 既在每个四面体单元内

$$\begin{cases} v = n_1 v_1 + n_2 v_2 + n_3 v_3 + n_4 v_4 = \sum_{i=1}^4 n_i v_i = \mathbf{n}^T \mathbf{v} \\ \sigma = n_1 \sigma_1 + n_2 \sigma_2 + n_3 \sigma_3 + n_4 \sigma_4 = \sum_{i=1}^4 n_i \sigma_i = \mathbf{n}^T \boldsymbol{\sigma} \end{cases} \quad (4.5-9)$$

其中 u 和 σ 是体单元中的线性函数, 其中形函数 $n_i = (a_i x + b_i y + c_i z + d_i) / 6V$; u_i 是单元中 4 个节点的电位待定值; V 是用行列式计算出的四面体单元的体积; $a_i, b_i, c_i, d_i (i=1,2,3,4)$ 是只与四面体单元节点坐标有关的常数, 具体计算可参阅文献^[111]。

(4.5-8) 式的积分可分解为各体单元 e 和边界单元 Γ_e 的积分。首先对 (4.5-8) 式中右端第一项进行四面体单元积分

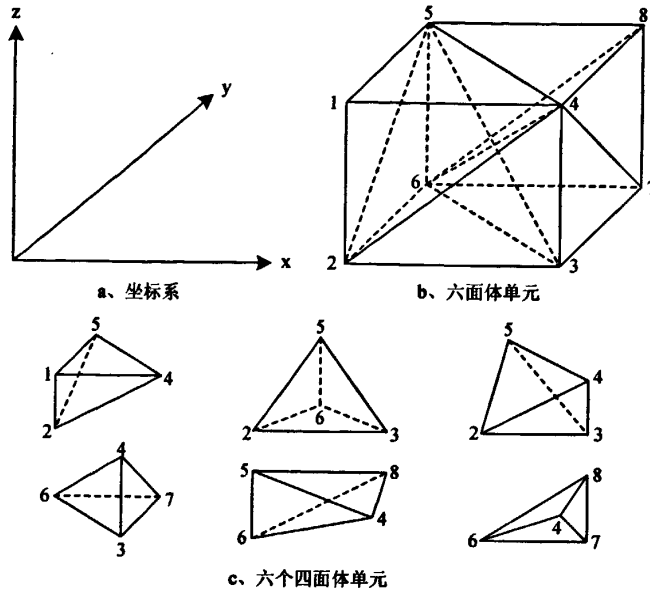


图 4.23 四面体单元网格剖分示意图

$$\begin{aligned}
 & \int_V \left[\frac{1}{2} \sigma (\nabla v)^2 - 2I \delta(A)v \right] d\Omega \\
 &= \int_V \frac{1}{2} \sigma \left[\left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 \right] d\Omega - \int_V 2I \delta(A)v d\Omega \\
 &= \mathbf{v}_e^T \int_V \frac{1}{2} \sum_{i=1}^4 n_i \sigma_i \left[\frac{\partial n}{\partial x} \frac{\partial n^T}{\partial x} + \frac{\partial n}{\partial y} \frac{\partial n^T}{\partial y} + \frac{\partial n}{\partial z} \frac{\partial n^T}{\partial z} \right] d\Omega \cdot \mathbf{v}_e - \mathbf{v}_{eA}^T \cdot I \\
 &= \frac{1}{2} \mathbf{v}_e^T \frac{1}{36V^2} \sum_{i=1}^4 \sigma_i \int_V n_i d\Omega \cdot \begin{vmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \\ a_4 & b_4 & c_4 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} a_1 & a_2 & a_3 & a_4 \\ b_1 & b_2 & b_3 & b_4 \\ c_1 & c_2 & c_3 & c_4 \end{vmatrix} \cdot \mathbf{v}_e - \mathbf{v}_e^T \cdot \mathbf{s}, \quad (4.5-10)
 \end{aligned}$$

根据 $\int_V n_i d\Omega = V/4$ [111], 则(4.5-10)式为

$$= \frac{1}{2} \mathbf{v}_e^T \cdot \mathbf{K}_{ie} \cdot \mathbf{v}_e - \mathbf{v}_e^T \cdot \mathbf{s}, \quad (4.5-11)$$

其中

$$\mathbf{K}_{ie} = \frac{(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4)}{144V} \cdot \begin{vmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \\ a_4 & b_4 & c_4 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} a_1 & a_2 & a_3 & a_4 \\ b_1 & b_2 & b_3 & b_4 \\ c_1 & c_2 & c_3 & c_4 \end{vmatrix}.$$

接着, 再对(4.5-8)式右端第二项进行边界积分。由于网格剖分的特殊性, 左右、前后和底边界是由多个三角形单元 Γ_e 组成, 若六面体单元边界上的三角

形单元 $\overline{123}$ 位于无穷远边界上,由于无穷远边界离点源较远,则可将 $D = \cos\theta/r$ 看作常数,提到积分号之外,所以(4.5-8)式右端第二项的边界单元 Γ_e 的积分为

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \int_{\Gamma_e} \frac{\sigma \cos\theta}{r} v^2 d\Gamma \\ &= \frac{1}{2} D \cdot \int_{\overline{123}} \sigma v^2 dx dy = \frac{1}{2} \mathbf{v}_e^T \left[D \cdot \int_{\overline{123}} \sum_{l=1}^3 n_l \sigma_l (n_l n_j) dx dy \right] \mathbf{v}_e \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{v}_e^T \left[D \cdot \sum_{l=1}^3 \sigma_l \int_{\overline{123}} n_l (n_l n_j) dx dy \right] \mathbf{v}_e = \frac{1}{2} \mathbf{v}_e^T (D \cdot \delta_{ij} \cdot \sigma) \mathbf{v}_e = \frac{1}{2} \mathbf{v}_e^T K_{2e} \mathbf{v}_e, \quad (4.5-12) \end{aligned}$$

其中 $K_{2e} = K_{2ij} = K_{2ji}$, $i, j = 1, 2, \dots, 8$;

$K_{2ij} = \left[D \cdot \sum_{l=1}^3 \sigma_l \int_{\overline{123}} n_l (n_l n_j) dx dy \right] = D \cdot \frac{\Delta}{60} \cdot \delta_{ij} \cdot \sigma$, 而 σ 为单元节点电导率组成的向量;根据公式^[111]

$$\int_{\Delta} n_i^a n_j^b n_m^c dx dy = \frac{2a!b!c!}{(a+b+c+2)!} \Delta,$$

可计算出 δ_{ij} :

$$\delta_{ij} = \begin{bmatrix} \delta_{11} \\ \delta_{21} \\ \delta_{31} \\ \delta_{22} \\ \delta_{32} \\ \delta_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 2 \\ 2 & 6 & 2 \\ 1 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 6 \end{bmatrix}, \text{ 其余 } \delta_{ij} = 0, \quad i, j = 4, 5, 6, 7, 8$$

最后将所有单元(包括四面体和边界三角形单元)的积分结果相加,并扩展成整体网格节点组成的矩阵,则得到泛函 $F(\mathbf{v})$ 的数值表达式

$$F(\mathbf{v}) = \frac{1}{2} \mathbf{v}^T \sum (K_{1e} + K_{2e}) \mathbf{v} - \mathbf{v}^T \mathbf{s} = \frac{1}{2} \mathbf{v}^T K \mathbf{v} - \mathbf{v}^T \mathbf{s}, \quad (4.5-13)$$

其中 K 为对称带状矩阵, \mathbf{v} 为由所有节点电位组成的列矢量; \mathbf{s} 为与源有关的列矢量。泛函 $F(\mathbf{v})$ 对 \mathbf{v} 求变分,并令其为零,可得关于各节点电位的线性方程组

$$K\mathbf{v} = \mathbf{s}, \quad (4.5-14)$$

通过求解线性方程(4.5-14),便可算出所有网格节点上的电位。

三. 线性方程组的超松弛共轭梯度解法(SSORCG)

线性方程组(4.5-14)具有对称正定、大型、稀疏等特征,如采用 $40 \times 40 \times 20$ 的网格剖分,未知节点数为32000个,半带宽约为822,以变带宽压缩存储下三角阵内存需求约 $822 \times 39 \times 40 \times 20 \times 4 / 1024 / 1024 \approx 97.8$ 兆,这是采用直接解法 LDE^T 至少所需存储空间。对于 LDE^T 法所需要的计算时间基本都花费在矩阵分解上,回代所需要的时间很短,如果对于电极很多的情况下,并选择齐次边界条件,从计算效率方面考虑该方法还是可行的,但要有足够多的外延网格。黄俊革^[107]

通过将齐次边界条件与异常电位相结合的方式来处理点源场的边值问题,并用直接法 LDL^T 法求解刚度矩阵方程组,在计算精度和计算效率上取得较好的效果,但是其中涉及到正常电位的计算要求地形必须是水平的,这使其处理方式不能处理复杂地形条件下点源场的边值问题。因此只能退而求其次,边界条件选择非齐次边界条件,方程的待解参数为总电位。如果走这条技术路线,必须要寻找内存需求低、计算效率高的方法解刚度矩阵方程组。目前解这类方程组比较有效的方法应该首推预条件共轭梯度法(Preconditioned Conjugate Gradient method, 简记为 PCG)^[112],在共轭梯度法(CG)中引入预条件矩阵的基本思想主要是考虑到 CG 法的收敛速度与线性方程组

$$Ax = b, \tag{4.5-15}$$

中的系数矩阵 A 的条件数紧密相关,条件数越小,收敛性越好。故通过引入预条件矩阵 M 来降低系数矩阵 A 的条件数,考虑到 A 为对称正定矩阵,设 M 为 A 的一个近似分解

$$M = EE^T \cong A,$$

这样可用方程组

$$E^{-1}AE^{-T}(E^{-1}x) = E^{-1}b \text{ 或 } Fy = d, \tag{4.5-16}$$

代替(4.5-15),其中 $F = E^{-1}AE^{-T}$; $y = E^{-1}x$; $d = E^{-1}b$ 。事实上,通过粗略估计可知

$$F = E^{-1}AE^{-T} \cong (E^{-1}E)(E^TE^{-T}) = I \text{ (单位阵)},$$

因此,当 EE^T 越近似于 A 的完全分解时, F 越接近 I 。 F 的条件数越接近条件数的最小值 1,从而达到了降低条件数的目的。

在用 PCG 法解对称正定方程组时,引入按行索引的一维压缩存储模式(它已在一些程序包中成为一种约定)^[113],仅存储下三角阵中的非零元素,对于上述网格剖分所需内存不会超过 $9 \times 40 \times 40 \times 20 \times 6 / 1024 / 1024 \approx 1.65$ 兆,可见它所需求的内存很低。同时,PCG 法在迭代求解过程中,只要求系数矩阵中的非零元素与一个列向量中的对应元素的乘积,避免了对系数矩阵中大量非零元素的操作,可以有效的提高计算速度。目前,预条件的共轭梯度算法种类较多,如 ICCG、SSORCG、ILUCG 及 TCG 等,具体可参阅^[112]。在此仅简单给出 SSORCG 法的计算过程:

为不破坏原始矩阵,先将系数矩阵 A 分解为

$$A = L + D + L^T, \tag{4.5-17}$$

其中 L 是下三角阵, D 为对角阵。其预条件矩阵定义 M 为

$$M = EE^T, \tag{4.5-18}$$

其中 $E = D/\omega + L$, ω 为松弛因子。解(4.5-15)式的 SSOR 预条件共轭梯度法的

迭代格式如下^[37]

(1) 置初值: $\mathbf{x}_0, \mathbf{g}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0, \mathbf{p}_0 = \mathbf{h}_0 = (\mathbf{E}\mathbf{E}^T)^{-1} \mathbf{g}_0$ 。

(2) 开始迭代过程:

$$\alpha_i = \frac{(\mathbf{g}_i, \mathbf{h}_i)}{(\mathbf{p}_i, \mathbf{A}\mathbf{p}_i)},$$

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \alpha_i \mathbf{p}_i,$$

$$\mathbf{g}_{i+1} = \mathbf{g}_i - \alpha_i \mathbf{A}\mathbf{p}_i,$$

$$\mathbf{h}_{i+1} = (\mathbf{E}\mathbf{E}^T)^{-1} \mathbf{g}_{i+1},$$

$$\beta_{i+1} = \frac{(\mathbf{g}_{i+1}, \mathbf{h}_{i+1})}{(\mathbf{g}_i, \mathbf{h}_i)},$$

$$\mathbf{p}_{i+1} = \mathbf{h}_{i+1} + \beta_{i+1} \mathbf{p}_i,$$

$$i = 0, 1, 2, \dots$$

(3) 判断是否满足收敛标准 $(\mathbf{g}_{i+1}, \mathbf{h}_{i+1}) / (\mathbf{g}_0, \mathbf{h}_0) < \varepsilon = 10^{-8}$ 。若不满足重复步骤(2), 直至达到收敛标准, 迭代过程结束。

其中 (\cdot, \cdot) 表示内积; i 表示迭代序号; \mathbf{g} 和 \mathbf{p} 分别表示梯度和共轭方向向量; \mathbf{h} 为一中间临时向量; α_i 和 β_{i+1} 为标量, 分别表示 \mathbf{x} 和 \mathbf{p} 的修正因子。在上述计算过程中, 不必存储预条件矩阵 \mathbf{M} 。对于 $\mathbf{h}_{i+1} = (\mathbf{E}\mathbf{E}^T)^{-1} \mathbf{g}_{i+1}$ 的求解也无需直接计算, 可将它转化为方程组形式 $(\mathbf{E}\mathbf{E}^T) \mathbf{h}_{i+1} = \mathbf{g}_{i+1}$, 由于 \mathbf{E} 为下三角阵, 因此, 可利用高斯消去法经顺代和回代过程得到 \mathbf{h}_{i+1} , 由于顺代和回代过程仅涉及少数非零元素的相乘、相加, 所以可快速的完成。

松弛因子 $0 < \omega < 2$ 的选择是控制迭代收敛的重要参数。在点源场三维模拟过程中, 它是与网格剖分和介质的电性差异等因素有关的。比如说整体网格剖分的四面体都为均匀的正四面体, 则(4.5-15)式的系数矩阵 \mathbf{A} 将呈对角占优的良性特征, 松弛因子 ω 越接近于 2。但对于点源场的三维模拟问题, 如果选择均匀剖分那将急剧增加未知节点的个数, 即方程(4.5-15)的阶数, 即使选择大的 ω 也将使总的运算时间加长。通常在整体网格的研究区域网格剖分间距相对较小, 在外延区域则逐渐增大网格间距。在外延区, 网格间距的大小决定着刚度矩阵 \mathbf{A} 的性态, 网格间距越大, \mathbf{A} 的性态越差, 需要选择相对较小的松弛因子; 反之, 则相反。图 4.24 显示了选择两种外延网格时迭代次数随松弛因子的变化情况。其中外延网格在研究区域前后、左右和底边界各外延了 8 个网格, 小间距外延网格剖分为 1、1.14、1.48、2.20、3.7、7.2、15.6、39.8; , 大间距外延网格剖分为 1、1.16、1.56、2.44、4.44、9.2、22.6、63.8。从图上可以看出, 当选择小间距外延网格时, 迭代次数 n 最少的松弛因子 $\omega = 1.8$; 当选择大间距外延网格时, 迭代次数 n 最少的松弛因子 $\omega = 1.7$ 。这说明了松弛因子的选择只能根据网格剖分间距和介质电

性差异的大小粗略的给出一松弛因子,无法给出最佳选择。在文献^[37]中, $\omega = 1.4$ 作为最佳选择,毫无疑问,对于不同的网格剖分,它也不是最佳的。在此,笔者将迭代过程中自适应调节松弛因子的大小作为今后一项研究内容。

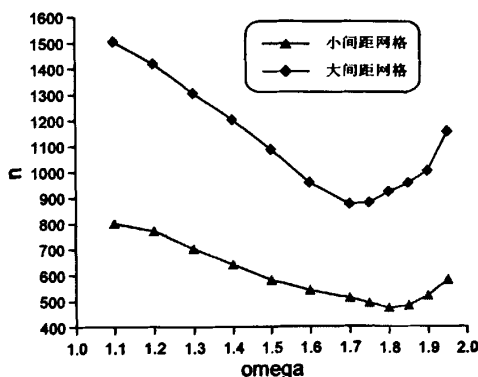


图 4.24 采用两种不同外延网格时迭代次数 n 随松弛因子的变化

四. 点源场三维有限元数值模拟的精度和效率问题

正演模拟是开展反演研究的一项基础性工作和关键步骤。正演达到精度要求是必须的,否则反演工作也无从谈起;正演效率的高低决定着能否将数据反演推向实际应用。所以本小节通过模拟均匀均匀半无限介质中点电源电位对这两个问题进行简要探讨。

假定地下是由电阻率 $\rho = 100\Omega m$ 均匀半无限介质组成,采用上述有限元法进行模拟及 SSORCG 法解线性方程组。点电源位于坐标原点 O 处,图 4.25 为点源场模拟平面示意图。相邻电极间隔分别剖分 1、2、4 等份对研究区域进行参数化,得到沿 x 轴各节点电位的精确解、模拟解及相对误差见表 4.1。从表中可以看出,在点源附近模拟解的误差较大,这是采用总电位法普遍存在的一个问题。而随着相邻电极间隔剖分数目的增加,模拟精度逐渐提高,但计算量也随着网格节点数的增加将迅速增加。黄俊革^[107]采用异常电位法基本可完全消除场源项的影响,模拟精度很高,但所涉及到正常场的计算是基于水平地形的,对于起伏地形无法给出解析解,这是件令人遗憾的事。如果以后哪位学者能够给出起伏地形正常场较精确的计算方法,那将是一件令人振奋的事情,当然也就可以很自然的采用异常电位有限元法进行起伏地形地电体的模拟和反演。但是目前对于起伏地形下的地电体也只能用总电位法进行正演模拟,并且考虑到计算量和精度问题,在相邻电极间隔剖分 2 等份,基本将模拟解的误差控制在 5% 以内。

对于计算效率问题,也是必须要考虑的一个重要因素。三维有限元正演模拟计算效率的高低主要取决于刚度矩阵线性方程组求解方法的选择,通常选择直接法 LDL^T 和迭代法两种。直接法主要选择基于变带宽存储的改进乔里斯基分解法;迭代法主要选择基于一维压缩存储的超松弛预优共轭梯度解法 SSORCG。下面对

表 4.1 点源场模拟解与精确解的对比

AM (m)	精确解 (V)	剖分 1 份的模拟解 (V)	相对误差 (%)	剖分 2 份的模拟解 (V)	相对误差 (%)	剖分 4 份的模拟解 (V)	相对误差 (%)
2	7.95775	7.44834	6.40143	7.57667	4.78879	7.70486	3.17791
4	3.97887	3.73916	6.02457	3.78002	4.99765	3.892	2.18328
6	2.65258	2.48916	6.16079	2.53643	4.37876	2.59203	2.28268
8	1.98944	1.88631	5.18387	1.91716	3.63318	1.94905	2.03022
10	1.59155	1.52781	4.0049	1.54482	2.93613	1.56503	1.6663
12	1.32629	1.288	2.887	1.2957	2.30643	1.30934	1.278
14	1.13682	1.11543	1.88156	1.11728	1.71883	1.12667	0.89284
16	0.99472	0.98503	0.97364	0.98317	1.16143	0.98982	0.492
18	0.88419	0.88288	0.14861	0.87823	0.67485	0.88302	0.13278

LDL^T 法和 $SSORCG$ 法的计算效率进行比较, 假定模型和网格剖分形式都相同, 在不同电极数的情况下, 使用 Pentium 四 1.7GHz 的微机完成一次正演模拟的耗费时间如图 4.26。在模拟过程中, 直接法是选择了齐次边界条件下的异常电位方式, 否则选择非齐次边界条件是相当耗费时间的, 而 $SSORCG$ 法解一次方程组所需要的时间很少, 当电极数很大时, 耗费时间将呈线性增加。所以当电极很少时选择 $SSORCG$ 法效率更高些; 当电极较多且地形水平时, 可以选择齐次边界条件下的异常电位法进行模拟, 用 LDL^T 直接法求解方程组的效率更高些, 因为求解中的回代过程仅仅占用了很少的时间。如果在齐次边界条件下的总电位法进行模拟, 需要剖分的外延网格数非常多, 内存将受到限制, 计算时间也将进一步延长。

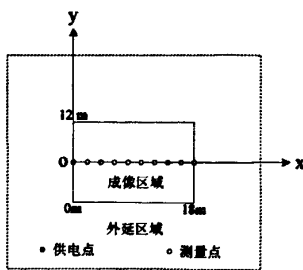


图 4.25 点源场模拟平面示意图

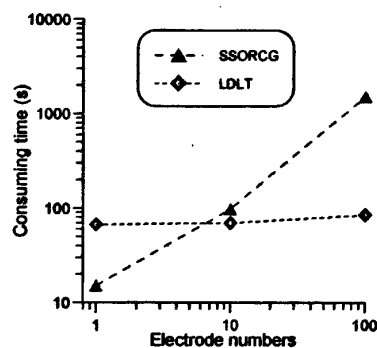


图 4.26 耗费时间的对比

4.5.3 起伏地形条件下的三维直流激电反演

直流激电三维反演与二维反演相比更具有有一般性, 反映地下地质信息的能力更强, 其反演结果可作为地质人员推断解释三维复杂地质体的强有力的工具。在本节中笔者将完成起伏地形条件下的三维直流激电数据反演, 只要给出地表或地

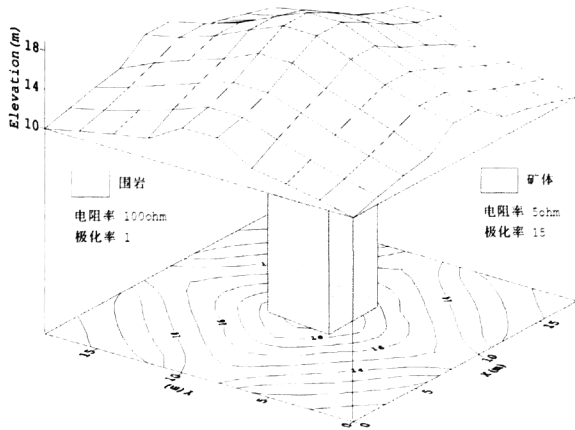
表以下供电和测量点的坐标我们就可以对其观测的激电数据进行反演,与所采用的装置没有必然联系,只是为了便于观测或对实测数据进行分析而设计装置。三维电法勘探根据电极观测位置可分为:三维高密度(地表观测)、井—井间、水中、坑道等。在本节中,将选择三维高密度、井—井间以及充电法等三种比较具有代表性的方法,在对其作以简单介绍的基础上,实现其起伏地形条件下的三维直流激电数据反演。

一. 三维高密度激电数据反演

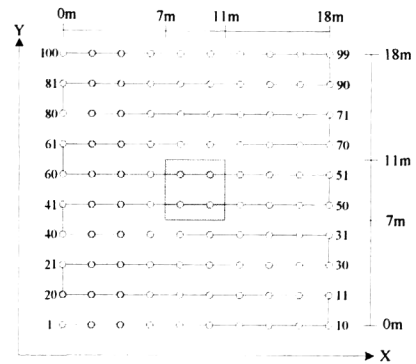
高密度电阻率法是常规电阻率法的一个变种,就其原理而言,与常规电阻率法完全相同,仍然以岩、矿石的电性差异为基础,通过观测和研究人工建立的地下稳定电场的分布规律来解决水文、环境和工程地质问题的。与传统的电阻率法相比,高密度电阻率法具有以下优点:① 电极布设是一次性完成的,测量过程中无须更换电极,因而可以防止因电极设置而引起的故障和干扰,提高了工作效率;② 能有效地进行多种电极排列方式的参数测定,因而可以获得较丰富的关于地下介质的地电信息;③ 数据采集和记录实现了自动化,不仅采集速度快,而且避免了由于人工操作出现的误差和错误;④ 可以实现资料的现场实时处理或脱机处理,根据需要自动绘制和打印各种成果图件,大大提高了电阻率法的智能化程度。由此可见,高密度电阻率法是一种成本低、效率高、信息丰富、解释方便且勘探能力显著提高的勘探方法。目前,高密度电阻率法普遍采用二维勘探方式,并已经被广泛的应用于隧道洞身病害探测、建筑物基础检测、堤坝管涌探测、高速公路岩溶勘查、煤田采空区及地下古墓探测等方面^{[93][114~117]},而且取得了良好的应用效果。

目前,对于三维高密度电阻率法勘探,虽然三维高密度电阻率法的仪器设备已开发完成^[118],但在实际工程勘查中尚未普遍使用。随着计算机技术、直流激电仪器的快速发展,以及对工程勘查精度的要求不断提高,三维高密度电法勘探技术也将很快发挥其用武之地,与其并行发展的直流激电数据三维反演技术也将展示出广泛的应用空间。在此为验证本文正反演方法的有效性,对模拟的电阻率和极化率数据进行反演。假设在山脊地形下有一低阻、高极化直立柱状石墨矿体,顶板距山峰顶部 3m,向下无限延伸,水平横截面约为 $4 \times 4m^2$ 。围岩电阻率为 $100\Omega m$,极化率为 1%;矿体电阻率为 $5\Omega m$,极化率为 15%,如图 4.27。将 100 根电极以 2m 的间隔布设在山峰表面,采用一根电极供电其它所有电极测量的 Pole—Pole 观测方式,如图 4.28,这样分别得到 9900 个视电阻率和视极化率值。接着,对模拟的视电阻率和视极化率采用最小二乘意义下的变阻尼共轭梯度法进行反演,经 6 次迭代(前 2 次利用互换原理计算偏导数矩阵,后 4 次采用 Broyden 更新技术)后,各次均方拟合差分别为 0.314、0.0825、0.0505、0.01902、0.01904、

0.02934、0.01479, 可见收敛速度是比较快的。图 4.29 和 4.30 分别为电阻率和极化率沿 Y 方向的反演切片图, 容易看出山峰下方低阻、极高化异常体的存在, 并且基本归位, 反演效果比较理想。



4.27 起伏地形下模型位置立体图



4.28 电极布设和模型位置平面图

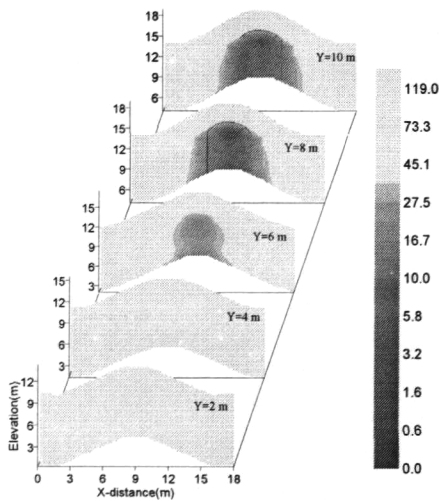


图 4.29 Y=2~10m 电阻率反演切片图

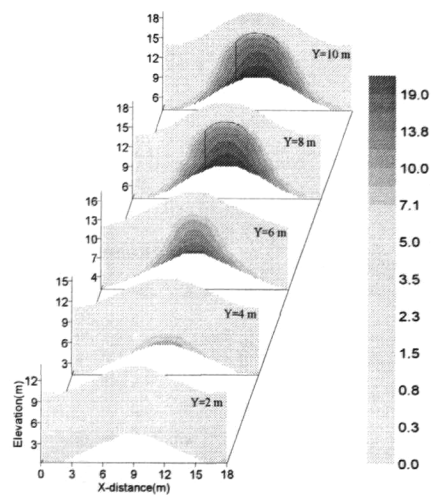


图 4.30 Y=2~10m 极化率反演切片图

二. 三维井间激电数据反演

跨孔直流电法是将供电和测量电极置于两个或多个独立的直或斜井中, 在一定的深度范围内改变供电和测量位置进行观测, 可以获得井间更详细的电性信息, 与地面电法相比, 能够更准确的定位地下目标体。W. Daily 和 E. Owen (1991) 实现了跨孔电阻率层析, 取得了比较好的结果^[119]; Shima(1992) 提出用有限元和 a 中心法联合重建地下电阻率分布。通过数值模拟和实际应用, 已经证实其有效性^[26]; 周兵 (1999) 全面的概括了跨孔电法勘探中所有可能的装置形式, 通过对模型反演研究了不同的装置形式跨孔层析成像的能力^[120]。A. Abubakar 和 P.M. van den Berg(1999) 提出了一种称之为“对比度源”的跨孔电阻率非线性反演技术,

该方法不需要人为引入正则化技术来处理反演的非唯一性问题。从反演算例来看，效果较好^[121]。上述成果基本都是针对水平地形下的跨孔电阻率反演，而在本小节中，将实现起伏地形下的跨孔电阻率和极化率三维反演。正反演采用前述章节所述方法，在此不做赘述。

下面对起伏地形跨孔观测条件下模拟的视电阻率和视极化率数据进行三维反演。图 4.31 为三维井间观测模型示意图。假设在 8 个钻孔(B1~B8)中间有两个异常体，高阻体电阻率为 $500\Omega\text{m}$ ，极化率为 1%，体积为 $4\times 4\times 4\text{m}^3$ ，顶板距地面 4m 。在其正下方 4m 处有一低阻体，电阻率为 $1\Omega\text{m}$ ，极化率为 10%；体积也为 $4\times 4\times 4\text{m}^3$ ，顶板距地面 12m 。围岩电阻率为 $50\Omega\text{m}$ ，极化率为 2%。在研究区域共布设了 137 根电极，其中地面布设了 49 根电极，间距 4m ，每个井中布设 11 根电极，间距为 2m ，钻孔深度为 22m 。地形为沿 x 方向变化的二维倾斜地形，在 y 向保持不变，如图 4.32。接着采用二极 AM 装置进行井—井、井—地观测，获得模拟的视电阻率和视极化率。接着，对模拟的视电阻率和视极化率采用最小

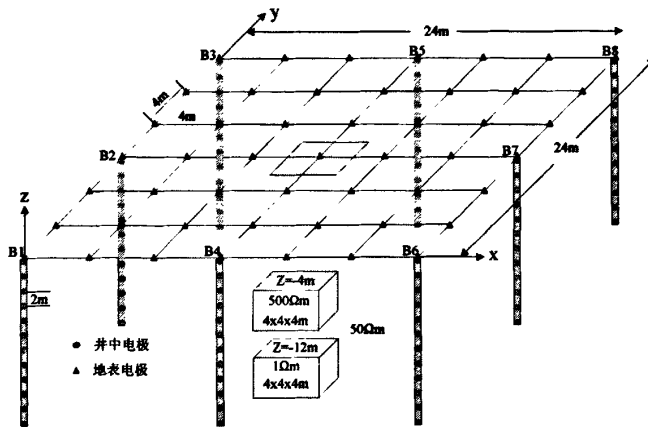


图 4.31 三维井间观测模型示意图

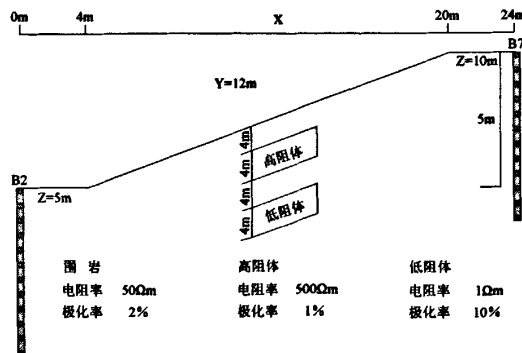


图 4.32 $y=12\text{m}$ 地形截面示意图

二乘意义下的变阻尼共轭梯度法进行反演。经 6 次迭代（前 2 次利用互换原理计算偏导数矩阵，后 4 次采用 Broyden 更新技术）后，各次均方拟合差分别为 0.134、0.027、0.0122、0.0265、0.0086、0.0092、0.0071。接着将电阻率和极化率的反演数据体沿 Y 方向间隔 4m 进行切片，如图 4.33 和 4.34。从电阻率的切片图上可以看出两异常体的存在，但异常体的形态有所变大，特别是下方的低阻异常体。而且反演结果对异常体属性值的逼近程度不够，主要由于两异常体的距离较近，以及引入最大光滑泛函容易造成弥散图像的结果。从图 4.34 中可以看出，极化率的反演结果同样如此，低阻高极化体向下有较大的移位，因为其反演效果是建立在电阻率反演效果基础之上的。而高阻低极化体由于与围岩的极化差异小，反映不明显。

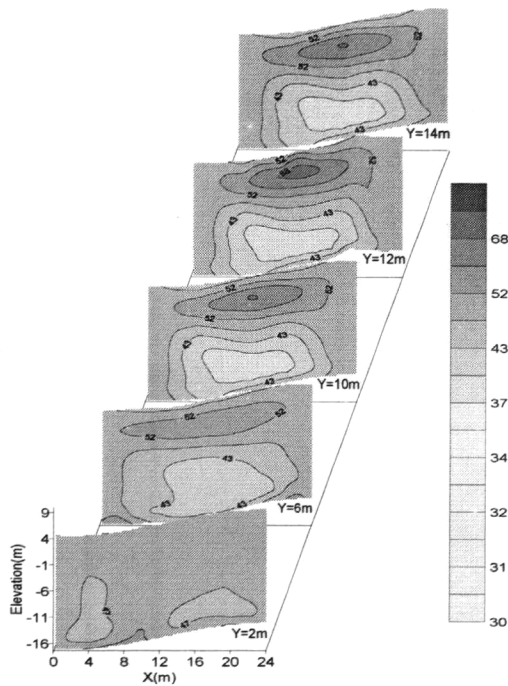


图 4.33 Y=2~14m 电阻率反演切片图

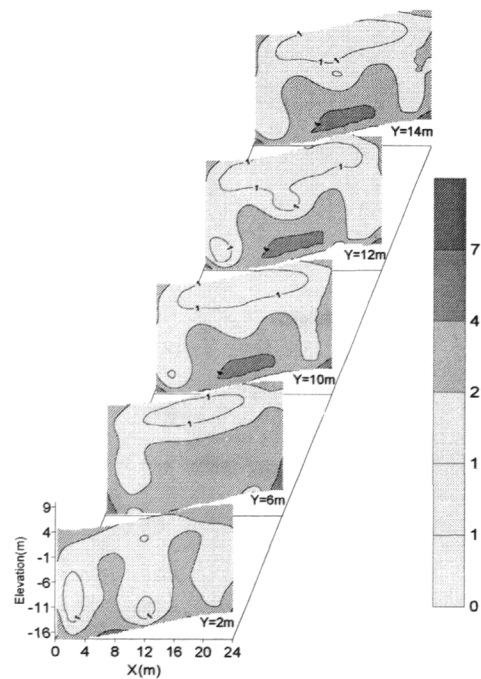


图 4.34 Y=2~14m 极化率反演切片图

三. 充电法电阻率三维反演

充电法是电法勘探中最早用来快速勘查、评价有用金属矿产的重要方法之一。主要用于解决：圈定矿体的范围；确定矿体的产状、深度；解决相邻矿体是否相连等问题。目前，也已用于水文地质和工程勘查中，如测定地下水的流速和流向；探测岩溶充水裂隙；追索地下电缆和导管以及堤坝的管涌等^[122]。其观测方式如图 4.35，其中电位和电位梯度两种观测方式应用较多。对于充电法的资料解释，仍然通过定性分析电位或电位梯度的等值线图，划分异常体的产状、深度等，造成解释误差是不可避免的。目前，关于充电法三维反演方面的研究很少，在相关文献中也未曾见到。因此，笔者作为一种尝试，对充电法勘探中观测的电位进行反演，获取地下似等位体的电性特征分布。根据反演结果，有助于研究异

常体在观测面以下的一些情况，可为地质推断解释提供有利的参考。

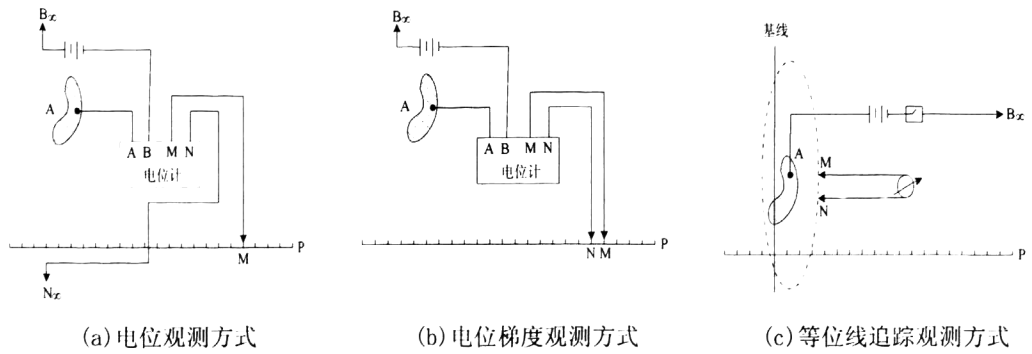


图 4.35 充电法三种观测方式示意图

下面对充电法在堤坝管涌探测中一典型模型进行模拟和反演，如图 4.36 为堤坝管涌模型示意图。垂直堤坝走向有一截面为 $1m \times 1m$ 的管涌通道，电阻率为 $2\Omega m$ ，渗漏源顶板距坝顶 $2m$ ，出水点顶板距地面 $3m$ 。在堤坝中间有宽 $5m$ 、电阻率 $50\Omega m$ 的粘土隔水墙，隔水墙两侧为 $1000\Omega m$ 的沙石填料，下方为 $5000\Omega m$ 的基岩，如图 4.36a 的堤坝横截面图。在出水点 A 处进行供电，在其周围沿 x 、 y 方向共观测了 168 个电位数据点，点距 $2m$ ，如图 4.36ab 堤坝平面俯视示意图。

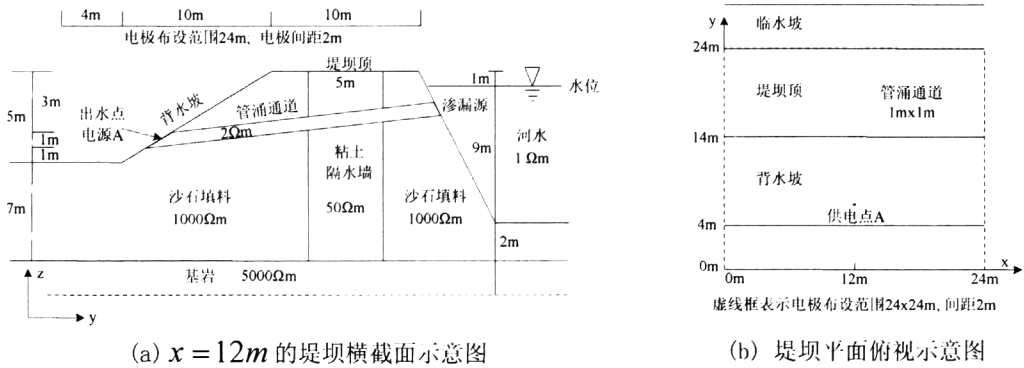


图 4.36 堤坝管涌模型示意图

下面采用四面体剖分电导率连续变化点源场三维有限元数值模拟方法对图 4.36 所示地电模型进行模拟，获得 168 个电位数据，图 4.37 为电位等值线图。

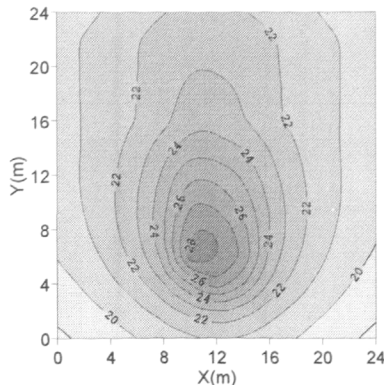


图 4.37 电位等值线图

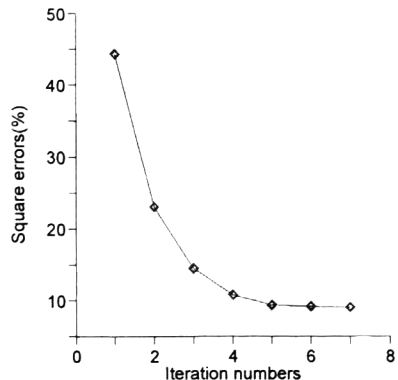


图 4.38 均方误差随迭代次数的收敛曲线

从电位等值线图上可以看出，沿异常体的走向电位值较高，并且电位相对异常体呈对称状分布，可以推断出异常体是垂直堤坝走向的。通过一幅等位线图或许也只能了解这些信息。无法对其产状、埋深等情况进行推断解释。

为获取更多关于低阻异常体在地面以下的信息，笔者试图采用最小二乘光滑约束反演方法对模拟的电位数据进行反演，得到地下介质的电性信息。图 4.38 为均方误差随迭代次数的收敛曲线，可以看出反演过程是稳步收敛的，迭代 6 次的均方误差约 9%（前 2 次迭代利用互换原理计算偏导数矩阵，后 4 次采用 Broyden 更新技术）。将反演的电阻率数据体沿 Y 方向间隔 2m 进行切片，并将其绘制成等值线图，如图 4.39。从 Y=6m 到 Y=24m 的电阻率等值线图上可以看出，地下有一低阻圆柱体的存在，埋深和走向与给定的模型相当。当远离供电点源时，反演图像对异常体的反映逐渐变的模糊，这主要是由于体积效应和观测数据过少等因素所致（模拟的电位数据 168 个，待反演的模型参数 845 个，导致严重欠定的线性反演方程组）。如果以多个供电点进行供电，增加观测数据，反演结果将会有所改善。

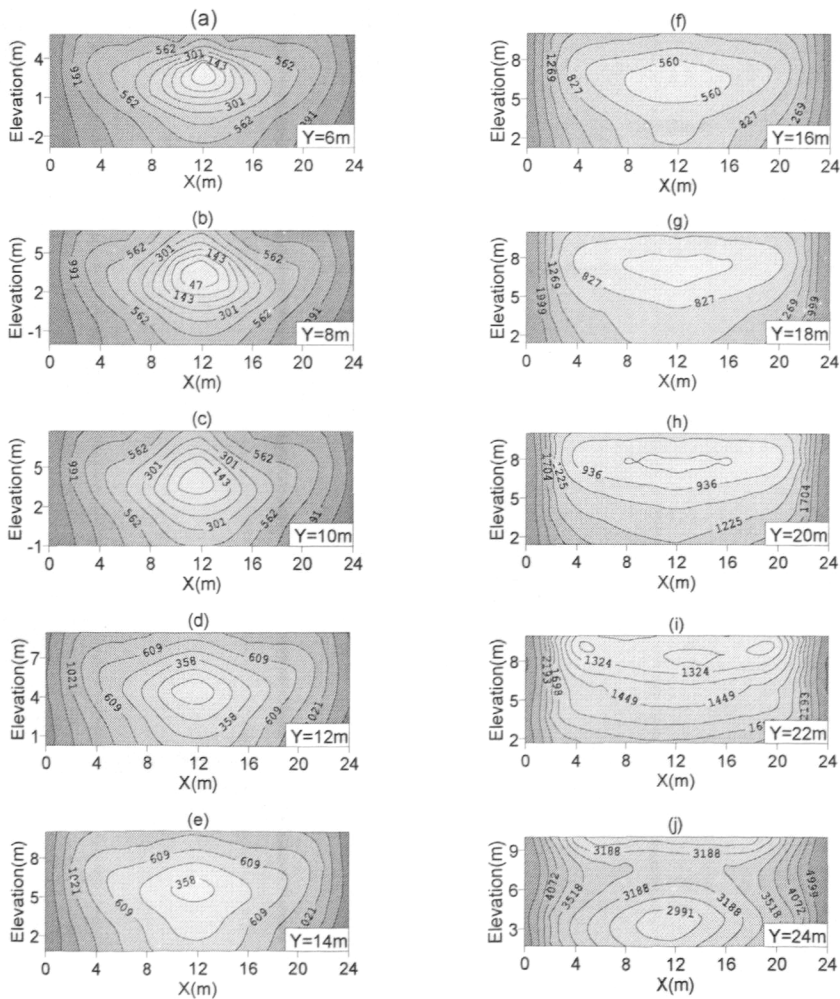


图 4.39 Y=6~24m 反演的电阻率等值线图

再沿 $X=12\text{m}$ 和 $Z=2\text{m}$ 的位置进行切片，反演电阻率等值线图分别如图 4.39 和 4.40。图 4.39 更加清晰的显示了异常体的走向和埋深，但在供电点的下方形成了一个大的低阻体假象，这可能由于低阻体的屏蔽效应，淹没了其下方介质的真实电性情况。而平面切片图 4.40，对异常体走向的反映效果不佳。

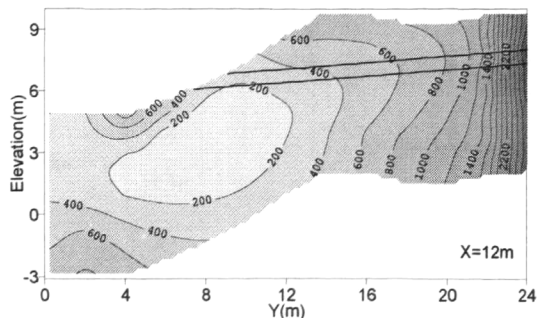


图 4.39 $X=12\text{m}$ 反演的电阻率等值线图

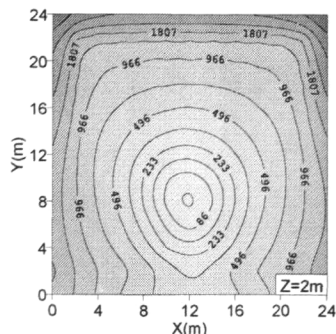


图 4.40 $Z=2\text{m}$ 反演的电阻率等值线图

通过对充电法观测的电位数据进行反演，获取地下介质和充电体的电性信息，结合电位或其它地质资料，可极大的提高地质推断解释的精度。所以，对充电法的电位数据进行反演是一项比较意义的工作，能根据较少的资料提取更多关于地下介质的电性信息，它能够为地质推断解释提供有利的参考。

本章小结

1、从最小二乘广义线性反演的角度，探讨了电阻率和极化率的反演方法。对于电阻率反演中的偏导数矩阵的计算，采用互换原理与 Broyden 拟牛顿技术相结合的计算方式，即在前两次或三次迭代，采用互换原理计算偏导数矩阵，在后续迭代中，应用 Broyden 更新技术，在不损失反演分辨率的情况下，可极大的提高反演的运算速度。

2、对垂直激电测深二维反演、电阻率间歇反演以及复杂条件下的三维直流激电数据反演中所涉及到一些技术问题加以解决和完善。

3、对于垂直激电测深(VES)二维反演：在正反演中，网格剖分采用的双网格系统，可有效减少反演的运算时间；在水平地形条件下，对正演模拟的误差（主要由边界和场源引起）进行了校正，可有效的提高正演模拟的精度；在反演中，应用电测深曲线的直接反演方法给定非均匀初始模型，可改善反演的分辨率。

4、对于电阻率最小二乘间歇反演：通过在反演过程中，引入时间和空间稳定化泛函，将前期所有观测数据的反演结果作为后期反演数据的约束，进而可将不同时刻的观测数据联系起来，使得所有信息得到充分利用，可极大的提高反演的分辨率和减少反演的多解性；

5、对于复杂条件下的三维直流激电数据反演：针对起伏地形情况，给出了按方位局部多重二次曲面插值法，可有效对起伏地表大量网格节点的高程进行插值；在正演过程中，为更好的适应地形，将三维地质体剖分成若干个四面体单元，并且节点间电导率线性连续变化；由于刚度矩阵元素的存储要占用大量的内存空间，所以采用了一维压缩存储方式，仅存储下三角阵中的非零元素，并采用超松弛迭代预优共轭梯度法(SSORCG)对其构成的线性方程进行求解；考虑到正、反演的计算精度和效率问题，在相邻电极间隔间至少要剖分两个单元。并且当电极较多时，采用 SSORCG 法求解方程的时间要比乔里斯基法 LDL^T 的耗时间多。

6、最后，对起伏地形条件下的三维高密度激电数据、三维井间激电数据以及充电法电位数据进行了反演，反演效果较好。

第五章 非线性全局最优化反演方法

地球物理中的反问题大多都具有多参数、非线性的特点，反演过程中的所依据的目标函数含有多个局部极值。线性或拟线性反演方法往往得到的只是局部最优解，并且反演结果常常与初始模型有关，如果初始模型选择的合适，它可以得到较好的结果，反之，还有可能造成反演的假象。另外，广义线性反演通常要用到目标函数的导数值，对于许多实际问题来说，计算目标函数的导数有些困难。而以随机过程为基础的全局最优化反演方法不受确定规则的限制，自由的在模型空间内随机搜索，这种较强的搜索能力能够保证反演结果基本上是全球最优解。全局方法的典型代表是模拟退火法、遗传算法、神经网络以及混沌优化方法，它们以其解决不同非线性问题的鲁棒性、全局最优性和不依赖于问题模型的特征，正引起越来越大的研究和应用热潮。使用全局寻优算法的必要性，以及避开反问题求逆运算的奇异性，使得全局最优化方法很快引起地球物理工作者的注意和重视，并已经在地球物理反演中得到了成功应用。

在本章中，主要对模拟退火算法、遗传算法进行研究。在简单介绍方法原理的基础上，着重对全局与局部优化方法以及全局与全局优化方法的结合上进行深入研究，以提高全局最优化方法的寻优性能。

5.1 模拟退火算法

5.1.1 模拟退火算法的发展概况

自从二十世纪 50 年代，Metropolis 等人就在量子场论中模拟磁偶极子的自旋运动中，采用模拟退火思想确定其分子的运动轨迹，并提出了 Metropolis 算法和重要性采样准则 (Important Sample Criterion)。但由于没有形成完整的理论体系以及受到应用领域的限制，一直没有得到学术界的重视。直到 1982 年，Krikpatrick 等人在对晶体生长过程研究取得成功，该方法才得到正式承认。在随后的几年里，许多学者也纷纷投入到模拟退火法理论的研究当中，主要体现在冷却进度表的合理选择、产生新解所遵循的分布准则、变异的模拟退火算法 (如有记忆的模拟退火法、回火退火法和加温退火法等) 以及如何采用并行策略来缩减算法的运行时间等几个方面。Szu 和 Hartley^[123] (1986) 采用 Cauchy 分布产生新解；Green 和 Supowit^[124] (1985) 采用无舍弃法产生新解，这些都是通过改进新解产生的方式来提高算法的效率。而 Johnson 等^[125] (1986) 用函数 $1 - \Delta E/T$ 取代 (5.1-2) 式中的指数 $\exp(-\Delta E/T)$ ，简化了判断运算，使算法加速约 30%；Sechen^[126] (1987) 采用查询表技巧缩减算法用于指数 $\exp(-\Delta E/T)$ 的运算时间。Johnson 等^[125] (1986) 以及 Laarhoven^[127] (1986) 通过计算若干次随机变换目标

函数平均增量的方法来确定冷却进度表中的初始温度 T_0 ；Stoffa P. L. 和 Sen M. K 等^[53]（1990）提出用实验方法估算最低温度，但没有从理论上解决问题，存在着很大的盲目性。姚姚^[128]（1994）通过计算系统的局部势能来估算终止温度 T_c ，避免了实验方法的盲目性，而且使计算效率大为提高。刘鹏程和纪晨^[129]（1994）将模拟退火和单纯形法结合起来提高算法的局部搜索能力，并用于一维声波波形反演，具有较强的抗干扰能力。为改进模拟退火算法的性能，它也产生了很多变种，谢云和尤矢勇^[130]（1994）给出了加温退火算法，并引入了并行策略，而且出版了专著《非数值并行算法——模拟退火算法》，系统的介绍了模拟退火算法的理论和应用；何军^[131]（1991）给出了退火回火算法，在跳出局部极值和提高算法效率方面有较大改善。随着模拟退火算法研究的不断深入，它已经越来越广泛的应用于自然科学的各个领域，如计算机设计、图像处理、信号处理、地球物理等方面。

5.1.2 模拟退火算法的基本理论

1982 年 Krikpatrick 等在 Metropolis 研究的基础上提出了模拟退火算法（Simulated Annealing Algorithm）。它源于对固体退火过程的模拟，采用 Metropolis 接受准则，并以冷却进度表的参数来控制算法的进程，使算法在有限的时间里得到最优解的近似解。固体退火过程的物理图象和统计性质是模拟退火算法的物理背景；Metropolis 接受准则使算法跳离局部最优的“陷阱”；而冷却进度表的合理选择是算法的应用前提。下面将从这三方面探讨模拟退火算法的基本理论：

一. 模拟退火算法的物理背景

模拟退火算法源于对固体退火过程的模拟，而固体退火过程是先将固体加热至融化，再徐徐冷却使之凝固成规整晶体的热力学过程，它属于热力学与统计物理研究的范畴。

在加热固体时，固体粒子的热运动不断加强，随着温度的升高，粒子与其平均位置的偏离越来越大。当温度升至溶解温度后，固体的规则性被彻底破坏，固体溶解成液体，粒子排列从较有序的结晶态变为无序的液态，这个过程叫溶解。溶解过程的目的是消除系统中原先可能存在的非均匀状态，使随后进行的冷却过程以某一平衡态为始点；在冷却固体时，液体粒子的热运动逐渐减弱，随着温度的徐徐降低，粒子运动渐趋有序。当温度降至结晶温度后，粒子运动变为围绕晶体格点的微小振动，液体凝固成固态的晶体，此过程为退火。退火过程之所以“徐徐”进行，是为了使系统在每一个温度下都达到平衡态，最终达到固体的基态。退火过程中系统的熵值不断减小，系统的能量也随温度降低趋于最小值^[130]。

模拟退火算法之所以能够应用到地球物理反演当中,主要由于地球物理模型空间中的模型参数变化与固体退火过程中的粒子运动有一定相似性,即逐步修正模型参数使其逐渐逼近最优解与逐渐冷却固体使粒子达到结晶状态存在共性,这使之成为在地球物理反演中得到应用的依据。

二. Metropolis 接受准则

Metropolis 准则是由 Metropolis 等人在 1953 年提出的应用蒙特卡罗 (Monte Carlo) 技术的一种方法。其特点是算法简单,但必须大量采样才能得到比较精确的结果,计算量很大。1953 年, Metropolis 提出了重要性采样法:

先假定粒子的初始状态 i 作为固体的当前状态,其能量为 E_i ; 然后随机选取某个粒子,并使其随机产生一微小变化,得到新的状态 j ,新状态的能量为 E_j ; 如果 $E_j < E_i$, 则该新状态就作为“重要”状态; 若 $E_j > E_i$, 考虑到热运动的影响,该状态是否为“重要”状态,要依据固体在该温度下的概率进行判断。即

$$r = \exp \frac{E_i - E_j}{k \cdot T}, \quad (5.1-1)$$

其中 k 为 Boltzmann 常数,通常取 1。 r 是一个小于 1 的数; 用随机数产生器产生一个 $[0,1)$ 区间的随机数 ξ , 若 $r > \xi$, 则新状态 j 作为重要状态, 否则舍去。

若新状态 j 是重要状态,就以 j 取代 i 成为当前状态, 否则仍以 i 为当前状态。重复以上新状态的产生过程,在大量的状态变换后,系统趋于能量较低的平衡状态。由上式可知,在高温下,当 $T \rightarrow \infty$ 时,系统可接受与当前状态能差较大的新状态作为重要状态,而随着温度的降低,系统只能接受与当前状态能差较小的新状态作为重要状态,当 $T \rightarrow 0$ 时,系统就不能接受任一 $E_j > E_i$ 的新状态 j 了。

上述这种判断新解是否接受的准则被称为 Metropolis 接受准则, 而由 Metropolis 准则对应的转移概率 P

$$P_i = \begin{cases} 1, & \text{当 } E_j \leq E_i \\ \exp\left(\frac{E_i - E_j}{T}\right), & \text{否则} \end{cases}, \quad (5.1-2)$$

开始让温度 T 取较大的值 (与固体溶解的温度相对应), 在进行足够多的转移后, 缓慢减小 T 的值 (与“徐徐”降温相对应), 如此重复, 直至满足某个终止准则时, 算法结束。因此, 模拟退火算法可视为递减控制参数时的 Metropolis 算法的迭代。

三. 冷却进度表及其选取原则

模拟退火算法能否在有限时间内收敛于整体最优解集分布, 与一组控制算法进程的参数有关, 这组参数集被称为冷却进度表。它们包括以下几个参数^[130]:

1. 控制参数 T 的初值 T_0 ;

2. 控制参数 T 的衰减函数;
3. 控制参数 T 的终值 T_c ;
4. *Марков* 链的长度 L_k .

冷却进度表是影响模拟退火算法实验性能的重要因素,其合理的选取是算法应用的关键。它的构造是建立在准平衡 (quasi-equilibrium) 的基础之上的,准平衡的定义为:若在第 k 个 *Марков* 链的 L_k 次变换后,解的概率分布 $P(L_k, T_k)$ 充分逼近 $T = T_k$ 时的平衡分布 $Q(T_k)$, 亦即 $\|P(L_k, T_k) - Q(T_k)\| < \varepsilon$ 成立, (ε 为某些确定的正数), 则称模拟退火算法达到准平衡。其中 T_k 为第 k 次循环迭代的温度。对于任意小的正数 ε , 算法至少要进行解空间规模的平方次变换才能达到准平衡。此外,对于多数问题而言,解空间规模是问题规模的指数量级,因此对平稳分布任意近似的逼近将导致模拟退火算法指数时间的执行过程。所以,在模拟退火算法的实际应用中,不得不采用准平衡的较低量化标准去构造冷却进度表。

任一有效的冷却进度表都必须妥善解决两个问题:(1) 算法的收敛性问题:由热物理学的平衡统计理论以及随机过程的 *Марков* 链理论,前人已经证明模拟退火算法在一定条件下的渐进收敛性。但并不是任一冷却进度表都保证算法收敛,不合理的冷却进度表可能使算法的解在某些解之间“振荡”而不能收敛于某一近似最优解。所以,我们只有通过合理的选择冷却进度表中的各项参数使算法收敛于近似最优解。(2) 最终解的质量和 CPU 时间:可以证明模拟退火算法最终解的质量与相应的 CPU 时间呈反向关系。如果要得到高质量的最终解,就需要较高量化标准的准平衡,使算法在解空间内大范围的搜索,当然花费的 CPU 时间也就越长。一般采取折衷方案,即在合理的 CPU 时间内尽量提高最终解的质量。下面分别对各项参数的选取原则做详细讨论:

1. 控制参数 T 的初值 T_0 的选取

基于“ T_k 值只要选得充分大,就会立即达到准平衡”的论证,为使算法进程一开始就达到准平衡,应让初始接收率满足

$$\chi_0 = \frac{\text{接收变换数}}{\text{提出变换数}} \approx 1.$$

由 Metropolis 准则 $\exp(-\Delta E/T_0) \approx 1$, 可推知 T_0 值很大。而 Krikpatrick 等在 1982 年提出的确定 T_0 的经验法则是,选取一个较大的值作为 T_0 的当前值,并进行若干次变换,若接收率 χ 小于预定的初始接收率 χ_0 (Krikpatrick 等取 $\chi_0 = 0.8$), 则将当前值加倍。以新的 T_0 作为当前值重复上述过程,直至得到使 $\chi > \chi_0$ 的 T_0 值。

Johnson 等将 Krikpatrick 的经验法进一步深化,建议通过计算若干次随机变换目标函数的平均能量 $\overline{\Delta E}$ 的方法来确定 T_0 值,即由式

$$\chi_0 = \exp(-\overline{\Delta E}/T_0)$$

求解 T_0 。因此

$$T_0 = \frac{\overline{\Delta E}}{\ln(\chi_0^{-1})}. \quad (5.1-3)$$

Arts 等人也提出了与上式类似的计算公式。他们假定对控制参数的某个确定值 T 产生 m 个尝试的序列, 并设 m_1 和 m_2 分别是其中目标函数减小和增大的变换数, $\overline{\Delta E}$ 为目标函数增大的平均能量。则接收率由下式近似:

$$\chi \approx \frac{m_1 + m_2 \cdot \exp(-\overline{\Delta E}/T)}{m_1 + m_2},$$

则可得

$$T = \frac{\overline{\Delta E}}{\ln \frac{m_2}{m_2 \cdot \chi - m_1(1 - \chi)}}. \quad (5.1-4)$$

只要将 χ 设定为初始接收率 χ_0 , 就能求出相应的 T_0 值。

总之, T_0 值必须选得“足够大”, 才能使解的质量较高, 而过大的 T_0 值又可能导致过长的 CPU 时间, 同样使模拟退火算法丧失可行性, 故 T_0 必须依据折衷原则选取。

2. 控制参数 T 的衰减函数的选取

为避免算法进程产生过长的 *Марков* 链, 控制参数 T_k 的衰减量以小为宜。在控制参数小衰减量的情况下, 两个相继值 T_k 和 T_{k+1} 是相互逼近的。因此, 如果在 T_k 值上已经达到准平衡, 那么可以期望在 T_k 衰减为 T_{k+1} 后, 可能只需要进行少量的变换就足以恢复 T_{k+1} 上的准平衡。这样就可以选取较短长度的 *Марков* 链来缩减 CPU 时间。

控制参数小衰减量还可能导致算法进程迭代次数的增加, 因而可以期望算法进程接受更多的变换, 访问更多的邻域, 搜索更大范围的解空间, 返回高质量的最终解, 当然花费更多的 CPU 时间, 在这种情况下, 只有通过缩短每一个准平衡状态时的 *Марков* 链来缩减 CPU 时间。

一些常用的控制参数的衰减函数为

Krikpatrick^[132]等人提出的控制参数的衰减函数为

$$T_k = \alpha \cdot T_{k-1} = \alpha^k \cdot T_0, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (5.1-5)$$

其中 α 是一个接近于 1 的常数, 通常在 0.7~0.99。由上式可知, α 值越小, 退火速度越快。上述衰减函数具有随算法进程递减的衰减量, 它可以控制 T_k 衰减的速率, 因此可延缓变换接受概率随算法进程衰减的态势, 这无疑有益于模拟退火算法实验性能的稳定。在模拟退火算法的实际应用中, 它是最为常用的一种退火策略。

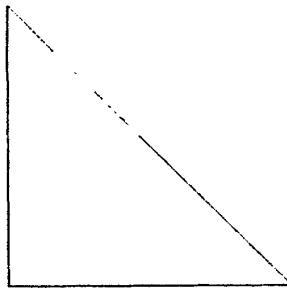
Nahar 等人固定控制参数的衰减步数 K , 再通过实验确定 T_k 的值, $k = 1, \dots, K$ 。Skiscim 等人把区间 $[0, T_0]$ 划分为 K 个小区间, 把控制参数的衰减函

数取为

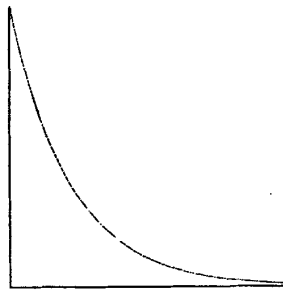
$$T_k = \frac{K-k}{K} T_0, \quad k=1, \dots, K. \quad (5.1-6)$$

由上式可知, 这个衰减函数使控制参数相继值间的差值保持不变, 亦即控制参数的衰减量不随算法进程而变, 它属于一种直线下降的退火策略^[130]。需要注意的是, Nahar 和 Skiscim 等人的衰减函数只适用于以迭代次数为终止准则的冷却进度表。

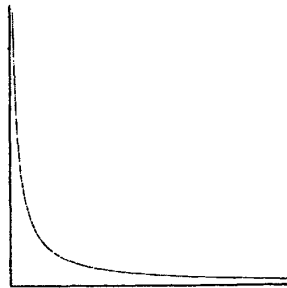
当以迭代次数 N 和终止温度 T_c 作为终止准则时, 类似的退火方案还有以下几种^[133], 如图 5.1 (式中 $k=0, 1, \dots, N$)。从降温曲线来看, (2) 式与 (9) 式、(3) 式与 (7) 式、(5) 式与 (8) 式以及 (6) 式与 (10) 式的退火方式相同。



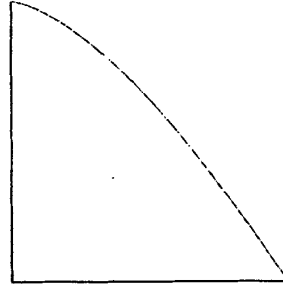
$$(1) T_k = T_0 - k \cdot \frac{T_0 - T_c}{N}$$



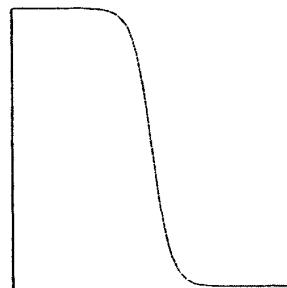
$$(2) T_k = T_0 \cdot (T_c/T_0)^{k/N}$$



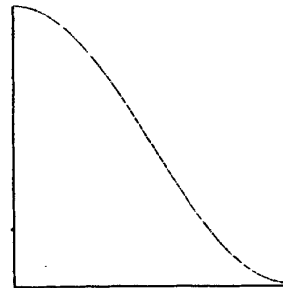
$$(3) T_k = T_0 - \frac{k(T_0 - T_c)(N+1)}{(k+1)N}$$



$$(4) T_k = T_0 - k \frac{\ln(T_0 - T_c)}{\ln(N)}$$



$$(5) T_k = \frac{T_0 - T_c}{1 + e^{1.5(k-N/2)}} + T_c$$



$$(6) T_k = \frac{1}{2}(T_0 - T_c) \cdot \left[1 + \cos\left(\frac{k\pi}{N}\right) \right] + T_c$$

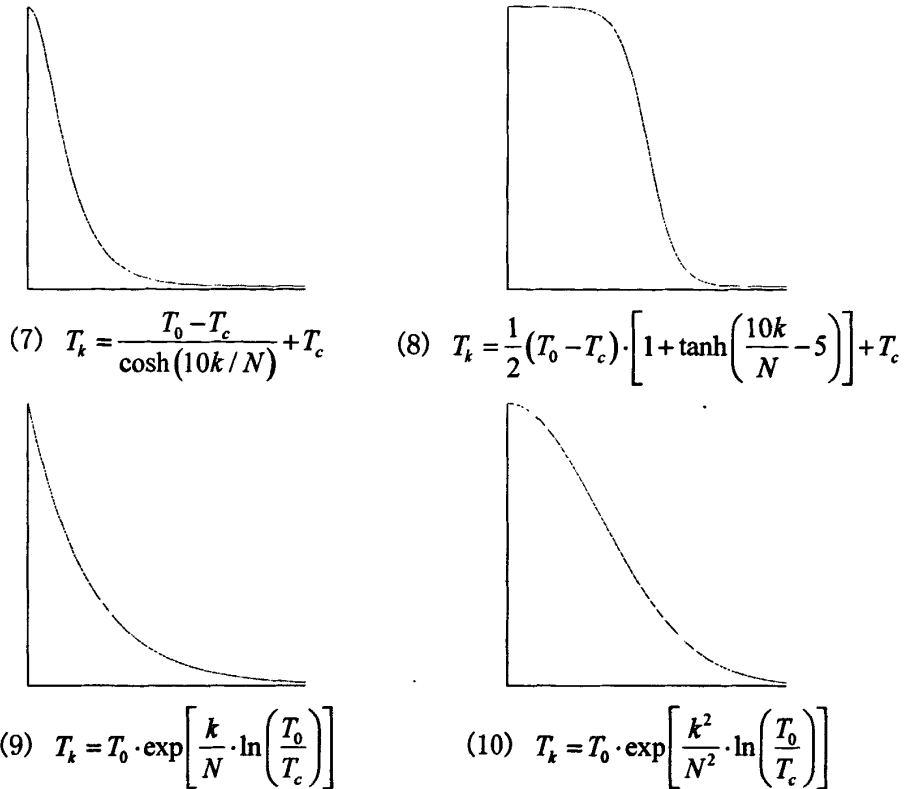


图 5.1 不同衰减函数的降温曲线

3. 控制参数 T 的终值 T_c 的选取

控制参数 T 的终值 T_c 通常由终止准则确定。合理的终止准则即要确保算法收敛于某一近似解，又要使最终解具有一定的质量。

从 CPU 时间考虑，Nahar 等人提出用事先确定好控制参数 T_k 的个数，亦即 *Марков* 链的长度或迭代次数 k 作为终止准则。他们选取的迭代次数为 6~50，这对于不同规模的优化问题，未免存在很大的局限性。

从最终解的质量出发，根据模拟退火算法渐进收敛性的启示：算法收敛于最优解集是随控制参数 T 值的缓慢减小渐进地进行的。只有在控制参数终值 T_c “充分小”时，才有可能得出高质量的最终解。因此，可用 T_c “充分小”在某种程度上替代“最终解质量”的判据作为终止准则。在实际应用时，一种方法是使控制参数 $T_c < \delta$ ，由它直接构成终止准则判别式，其中 δ 是一个充分小的正数；另一种方法是由算法进程的接收率随控制参数值递减而减小的性态来确定一终止参数 χ_c ，若算法进程的当前接收率 $\chi_k < \chi_c$ ，就终止算法，Johnson 等采用的就是这种终止准则。而合理的给定参数 δ 和 χ_c 也是不容易的，也许只有理论分析的方法才能做到这一点。

从最终解的质量选取终止准则的另一途径是以算法进程所得到的某些近似

解作为衡量标准,判断算法当前解的质量是否持续得到明显提高,从而确定是否终止算法。Krikpatrick 等人选取的终止准则是在若干个相继的 *Марков* 链中解无任何变化(含优化或恶化)就终止算法^[132],这种终止准则兼顾最优解质量和 CPU 时间,它是本文推荐使用的一种确定终止准则的方法。

4. *Марков* 链长度 L_k 的选取

Марков 链长度的选取原则是:在控制参数 T 的衰减函数以选定的前提下, L_k 应选得在每一个控制参数 T_k 上都能恢复准平衡。

在控制参数 T_k 的每一取值上恢复准平衡需要进行的变换数可通过恢复准平衡至少接受的变换数(某些固定数)来推算。但由于变换的接受概率随控制参数 T_k 的递减而减小,接受固定数量的变换需进行的变换数随之增多,最终在 $T_k \rightarrow 0$ 时, $L_k \rightarrow \infty$ 。为此可用某些常量 \bar{L} 限定 L_k 的值,从而避免在小值 T_k 时产生过长的 *Марков* 链。

多数组合优化问题的解空间规模 $|S|$ 随问题规模 n 呈指数型增大,为使模拟退火算法最终解的质量得以保证,理应建立 L_k 和 n 之间的某种关系。然而指数型的关系显然是不切实际的,因此 \bar{L} 通常取为问题规模 n 的一个多项式函数。如 Krikpatrick 等人采用 $\bar{L} = n$,本文算法也选取了这种方式,而有些学者选定 $\bar{L} = n^2$ 、 $\bar{L} = 100n$ 等。这些多项式函数可以依据优化组合问题的性质、规模以及处理问题的经验来确定。

至此已经探讨了冷却进度表各项控制参数的选取原则,而冷却进度表对模拟退火算法的影响是所有参数共同作用的结果。因此,只有辨明各参数影响的主次关系及参数的交互作用,才能构造出有效的冷却进度表。各个参数的最佳组合可以使算法既能保证最终解的质量,又不显著增加 CPU 时间。

5.1.3 模拟退火算法的实现步骤

模拟退火反演的基本思想就是将待反演的模型参数看作是熔化物体的每一个分子,将目标函数看作是熔化物体的能量函数,通过徐徐降低温度,使目标函数在给定的模型空间内最终达到全局极小点。目前,常用的模拟退火算法的实现步骤为^[134]

(1) 确定模型空间:可通过地质信息或广义线性反演结果给定每一模型参数的变化范围 $[m^{\min}, m^{\max}]$,在这个范围内随机选择一个初始模型 m_0 ,并计算相应的目标函数值 $E(m_0)$ 。

(2) 模型扰动:对当前模型 m_0 采用依赖于温度的似 Cauchy 分布产生新的扰动模型 m ,即

$$m = m_0 + \eta \cdot (m^{\max} - m^{\min}), \quad (5.1-7)$$

其中

$$\eta = T_k \cdot \tan[\pi(r - 0.5)],$$

式中 T_k 表示第 k 步迭代的温度状态; r 为区间 $(0, 1)$ 内均匀分布的随机数。接着, 计算相应的目标函数 $E(m)$, 得到 $\Delta E = E(m) - E(m_0)$ 。

(3) 接受概率: 如果 $\Delta E \leq 0$, 则新模型 m 被接收; 否则新模型 m 按概率

$$P = \exp(-\Delta E/T_k), \quad (5.1-8)$$

进行接收。当模型被接收时, 置 $m_0 = m$, $E(m_0) = E(m)$ 。

(4) 在温度 T_k 下, 根据事先给定 Марков 链的长度, 重复一定次数的扰动和接收过程, 即重复 (2)、(3) 步。

(5) 徐徐降温: 根据 Ingber^[135] (1989) 给出的快速模拟退火算法的降温方式:

$$T_k = T_0 \exp(-c \cdot k^{1/n}), \quad (5.1-9)$$

式中 T_0 为初始温度; k 为迭代次数; c 为给定常数; n 为待反演的参数个数。在实际应用中, 通常将上式改写成

$$T_k = T_0 \cdot \alpha^{k^{1/n}}. \quad (5.1-10)$$

式中选择 $0.7 \leq \alpha < 1$, 并采用 0.5 或 1 代替上式的 $1/n$ 。

重复 (2) ~ (5) 步, 直至满足收敛条件为止。以上的算法实际上分两步交替进行计算: 首先, 随机扰动产生新模型并计算目标函数的变化; 其次, 决定新模型是否被接收。由于算法是在高温条件下开始进行的, 因此使 E 增大的模型可能被接收, 因而能舍去局部极小值, 通过徐徐降低温度, 算法能收敛到全局最优解或次全局最优解。

5.1.4 基于模拟退火算法的全局混合反演方法

在地球物理反演当中, 没有一种反演方法对任何反问题都是有效的, 即每种方法都有各自的适用范围, 而算法的混合正是拓宽其适用范围和提高性能的有效手段。我们知道, 模拟退火算法虽然属于全局最优化方法, 并且具有对初始模型依赖性小及不易收敛于局部极值的优点, 但在实际应用当中, 该方法往往只能得到次优解而不是最优解。据此, 笔者考虑到模拟退火法具有全局搜索能力强, 而局部直接优化方法具有收敛速度快的特点, 并且它们都不需要计算偏导数矩阵, 那么, 就可将两者有机的结合起来, 起到取长补短的作用, 在这里笔者把它称为全局混合反演方法。那么作为混合反演方法, 如何根据不同算法的特点将它们有机的结合起来, 以改善算法的整体结构和搜索机制, 最终达到提高算法的整体优化性能, 这是本节乃至本章开展混合反演方法研究的目的。

谈及多种方法的结合就涉及到结合方式问题, 在这里笔者给出了混合算法的串行和镶嵌结合方式: 串行结构是混合算法中最简单的一种结合方式, 如图 5.2。它吸取不同算法的优点, 用一种算法的搜索结果作为另一种算法的初始解依次对

问题进行优化，其目的主要是在保证次全局最优解具有一定优化质量的前提下，再进一步提高全局最优解的质量。串行结构的混合算法需要解决的问题是确定算法的转换时机。镶嵌结构如图 5.3，它表现为一种算法作为另一种算法某个步骤的优化操作，进而增强混合算法的整体优化性能。镶嵌结构的混合算法需要解决的问题主要是子算法与嵌入点的选择。

在本节中，分别采用镶嵌和串行结构方式将单纯形法和鲍尔方向加速法两种局部优化方法引入到模拟退火算法当中，以增强模拟退火算法的局部搜索性能，这可极大的改善模拟退火法的搜索能力和效率问题。

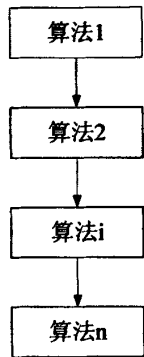


图 5.2 混合算法的串行结构图

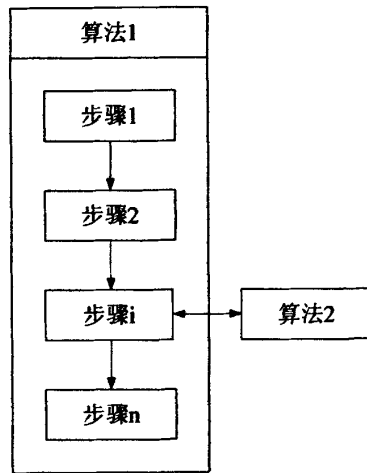


图 5.3 混合算法的镶嵌结构图

一. 模拟退火算法与单纯形法的镶嵌式结合

模拟退火算法与单纯形法结合的实质就是由单纯形法产生一个中间模型，由模拟退火法对其进行随机扰动^[129]。那么，产生新模型的公式可表示为

$$m^j = m_d^j + \chi_k^j \cdot \Phi_k^j = m_d^j + T_k \cdot \tan[\pi(\xi - 0.5)] \cdot \Phi_k^j, \quad (5.1-11)$$

式中上标 j 表示模型转移的序号；下标 k 表示迭代序号； m^j 表示经第 j 次模型转移产生的新模型； m_d^j 表示利用单纯形法并经过模型选择后产生的一中间模型； T_k 表示由初始温度与退火原则确定的第 k 步迭代时的温度； ξ 表示区间 $[0, 1]$ 内均匀分布的随机数； χ_k^j 为模型转移的步长； Φ_k^j 是由均匀设计试验法形成的模型转移方向矢量，其中 Φ_k^j 的第 j 个分量 φ_i^j 为

$$\varphi_i^j = \left(2 \left\{ \frac{jb^{l_i}}{p} \right\} - 1 \right) \cdot (m_i^{\max} - m_i^{\min}), \quad (5.1-12)$$

式中 p 为一奇素数，在本文中取为大于模型参数个数 n 的最小素数； $\{x\}$ 表示 x 的小数部分； $i=1, 2, \dots, n$ ； l_i 为幂指数， l_1, l_2, \dots, l_n 是 n 个整数 $0 \sim n-1$ 的随机排列，并且在每次迭代之前，都要重新进行一次这样的随机排列； m_i^{\max} 和 m_i^{\min} 分别为第

i 个模型参数预先设定的上下限; b 为待定的正整数, 且满足 $1 < b < p$ 。王元等^[136]证明: 使得偏差函数

$$D(p, b) = \frac{1}{p} \sum_{j=1}^{p-1} \prod_{i=1}^n \left[1 - \frac{2}{\pi} \ln \left(2 \sin \pi \left\{ \frac{jb^{i-1}}{p} \right\} \right) \right],$$

达到最小时的 b , 代入式 (5.1-12) 中来构造布点的点列。

对于单纯形法不再做具体赘述, 下面直接给出模拟退火算法与单纯形法相结合的全局混合反演方法的实现步骤:

(1) 确定模型空间: 首先可通过地质信息或线性反演方法给定每一模型参数的变化范围 $[m^{\min}, m^{\max}]$ 。然后由式

$$m_i^j = m_i^{\min} + \left\{ \frac{jb^i}{p} \right\} \cdot (m_i^{\max} - m_i^{\min}), \quad (5.1-13)$$

自动生成 $n+1$ 个初始模型, 其中 $i=1, 2, \dots, n$; $j=1, 2, \dots, n+1$ 。模型参数向量 m_1, \dots, m_{n+1} 构成了由 $n+1$ 个顶点组成的初始单形, 并计算每一个顶点上的目标函数值 $E(m_1), \dots, E(m_{n+1})$ 。

(2) 模拟退火算法开始。首先确定

$$\begin{aligned} E_R^{k,j} &= E(m_R^{k,j}) = \max_{1 \leq i \leq n+1} E(m_i^{k,j}), \\ E_G^{k,j} &= E(m_G^{k,j}) = \max_{1 \leq i \leq n+1 \text{ 且 } i \neq R} E(m_i^{k,j}), \\ E_L^{k,j} &= E(m_L^{k,j}) = \min_{1 \leq i \leq n+1} E(m_i^{k,j}), \\ m_F^{k,j} &= \frac{1}{n} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq R}}^{n+1} m_i^{k,j}. \end{aligned} \quad (5.1-14)$$

其中 $E_R^{k,j}$ 、 $E_G^{k,j}$ 和 $E_L^{k,j}$ 以及 $m_F^{k,j}$ 分别为第 k 次迭代、第 j 次模型转移时目标函数的最大点、次最大点、最小点和单纯形所有顶点的形心。

(3) 在 T_k 温度下, 计算第 k 次迭代、第 j 次模型转移时最坏点 $m_R^{k,j}$ 的对称点, 并在此基础上产生随机扰动, 得到新模型 $m_T^{k,j}$:

$$m_T^{k,j} = 2m_F^{k,j} - m_R^{k,j} + T_k \cdot \tan[\pi(\xi - 0.5)] \cdot \Phi_k^j, \quad (5.1-15)$$

(4) 用新的顶点替代原顶点, 从而构成新的单形。替代原则如下:

若 $P = \exp\left(\frac{-\Delta E}{T_k}\right) = \exp\left(\frac{E(m_L^{k,j}) - E(m_T^{k,j})}{T_k}\right) \geq \xi$, 则进行扩张步, 即将 $m_T^{k,j}$ 按一定倍数放大, 并产生随机扰动, 得到新模型 $m_E^{k,j}$:

$$m_E^{k,j} = (1 + \mu)m_T^{k,j} - \mu m_F^{k,j} + T_k \cdot \tan[\pi(\xi - 0.5)] \cdot \Phi_k^j, \quad (5.1-16)$$

其中 $\mu \in (1.2, 2)$ 为扩张系数。在这种情况下, 如果 $P = \exp\left(\frac{E(m_L^{k,j}) - E(m_E^{k,j})}{T_k}\right) \geq \xi$,

则 $m_E^{k,j} \Rightarrow m_R^{k,j}$, $E(m_E^{k,j}) \Rightarrow E(m_R^{k,j})$; 否则 $m_T^{k,j} \Rightarrow m_R^{k,j}$, $E(m_T^{k,j}) \Rightarrow E(m_R^{k,j})$ 。

若 $E(m_T^{k,j}) \leq E(m_G^{k,j})$, 则 $m_T^{k,j} \Rightarrow m_R^{k,j}$, $E(m_T^{k,j}) \Rightarrow E(m_R^{k,j})$ 。

若 $E(m_T^{k,j}) > E(m_G^{k,j})$ 。如果 $E(m_T^{k,j}) < E(m_R^{k,j})$ ，则 $m_T^{k,j} \Rightarrow m_R^{k,j}$ ， $E(m_T^{k,j}) \Rightarrow E(m_R^{k,j})$ 。然后进行收缩步，即将 $m_T^{k,j}$ 按一定倍数缩小，并产生随机扰动，得到新模型 $m_S^{k,j}$ ：

$$m_S^{k,j} = \eta m_R^{k,j} + (1-\eta)m_T^{k,j} + T_k \cdot \tan[\pi(\xi - 0.5)] \cdot \Phi_k^j, \quad (5.1-17)$$

其中 $\eta \in (0,1)$ 为收缩系数。如果 $P = \exp\left(\frac{E(m_R^{k,j}) - E(m_S^{k,j})}{T_k}\right) \geq \xi$ ，则 $m_S^{k,j} \Rightarrow m_R^{k,j}$ ，

$E(m_S^{k,j}) \Rightarrow E(m_R^{k,j})$ ；否则重新生成 $n+1$ 个单形顶点

$$m_i^{k,j} \leftarrow (m_i^{k,j} + m_L^{k,j})/2, i=1,2,\dots,n+1, \quad (5.1-18)$$

$$E_i^{k,j} = E(m_i^{k,j}), i=1,2,\dots,n+1.$$

(5) 接着返回到第(2)步，进行 $j+1$ 次随机扰动，直至达到事先给定 Марков 链的长度。然后降低温度，进行 $k+1$ 步迭代。

重复(2)~(5)步，直至满足收敛条件为止。以上步骤详细的描述了模拟退火法和单纯形法的镶嵌式结合过程。从两种算法的本身特性分析，基于可变多面体结构的单纯形法收敛速度快，但容易陷入局部极小点。而基于概率分布机制的模拟退火法具有突跳性，不易陷入局部极小点，但收敛速度慢。两种算法的结合可以互相补充不足，有利于优化各自的搜索行为，增强全局和局部意义下的搜索能力和效率。而且通过将两种结合，可大大削弱模拟退火算法对冷却进度表参数选择的苛刻性。实例试算也表明，融入单纯形法的模拟退火算法的优化性能和鲁棒性均有很大提高，反演对比结果将在 5.3.1 节中给出。

二. 模拟退火算法与鲍尔方向加速法的串行式结合

鲍尔方向加速法是鲍尔(Powell)于1964年首先提出的解无约束最优化问题的一种直接搜索方法^[137]，它不需要计算导数，只需要计算函数值和要求函数连续，许多学者不断对它进行改进，使其在理论上不断完善。1973年Sargent提出一个改进方案^[138]。1977年吴方对Powell法共轭梯度量中去掉哪一个方向最好的问题，提出了简单的判别条件，使算法进一步得到简化^[139]。1979年邓乃扬等人对Powell法的理论基础进行了探讨，使Powell方法在理论上逐步完善，得到了目前通用的Powell方向法^[140]。由于此方法只要求函数连续，只需要计算函数值，对凸二次函数可在有限步收敛到最优解，因而公认为是目前解无约束最优化问题十分有效的直接法，应用十分广泛。下面给出修正鲍尔法的迭代过程^[141]：

给定初始向量 $m^{(0)}$ 及 n 个搜索方向 (n 为参数个数)，通常设为 e_1, e_2, \dots, e_n ， e 为单位向量。给定控制误差 ε ，较大的正数 M 。

$$(1) 0 \Rightarrow k, e_j \Rightarrow P_j, j=1,2,\dots,n.$$

$$(2) 0 \Rightarrow j, m^{(k)} \Rightarrow m^{(k,j)}, -M \Rightarrow \Delta.$$

(3) $\mathbf{m}^{(k,j+1)} = \mathbf{m}^{(k,j)} + \lambda_{j+1} \mathbf{P}_{j+1}$, 其中 $f(\mathbf{m}^{(k,j)} + \lambda_{j+1} \mathbf{P}_{j+1}) = \min_{\lambda} f(\mathbf{m}^{(k,j)} + \lambda \cdot \mathbf{P}_{j+1})$ 。

(4) 若 $f(\mathbf{m}^{(k,j)}) - f(\mathbf{m}^{(k,j+1)}) > \Delta$, 则 $f(\mathbf{m}^{(k,j)}) - f(\mathbf{m}^{(k,j+1)}) \Rightarrow \Delta$, $j+1 \Rightarrow J$; 若 $f(\mathbf{m}^{(k,j)}) - f(\mathbf{m}^{(k,j+1)}) \leq \Delta$, 则 Δ 、 J 保持不变, 转到(5)。

(5) $j+1 \Rightarrow j$, 如果 $j < n$, 转到(3), 否则, 转到(6)。

(6) 若 $\|\mathbf{m}^{(k,n)} - \mathbf{m}^{(k,0)}\| \leq \varepsilon$, 则最优解 $\mathbf{m}^* = \mathbf{m}^{(k,n)}$, 终止计算。否则, 转到(7)。

(7) 计算 $f_1 = f(\mathbf{m}^{(k,0)})$, $f_2 = f(\mathbf{m}^{(k,n)})$, $f_3 = f(2\mathbf{m}^{(k,n)} - \mathbf{m}^{(k,0)})$ 。若 $f_3 \geq f_1$, 转到(9)。否则, 转到(8)。

(8) 若 $(f_1 - 2f_2 + f_3) \cdot (f_1 - f_2 - \Delta)^2 \geq \Delta \cdot (f_1 - f_3)^2 / 2$, 转到(9)。否则, 转到(10)。

(9) $\mathbf{m}^{(k,n)} \Rightarrow \mathbf{m}^{(k+1)}$, $k+1 \Rightarrow k$, 转到(2)。

(10) 令 $\mathbf{P} = \mathbf{m}^{(k,n)} - \mathbf{m}^{(k,0)}$, $\mathbf{m}^{(k+1)} = \mathbf{m}^{(k,n)} + \lambda^* \mathbf{P}_{j+1}$, 其中

$$f(\mathbf{m}^{(k,n)} + \lambda^* \cdot \mathbf{P}) = \min_{\lambda} f(\mathbf{m}^{(k,n)} + \lambda \cdot \mathbf{P})。$$

$$\mathbf{P}_{j+1} \Rightarrow \mathbf{P}_j, \quad j=1,2,\dots,n-1, \quad \frac{\mathbf{P}}{\|\mathbf{P}\|} \Rightarrow \mathbf{P}_n, \quad k+1 \Rightarrow k, \quad \text{转到(2)}。$$

其中 λ 是解向量 \mathbf{m} 在共轭方向 \mathbf{P} 上的一维搜索步长。对于上述的一维搜索过程, 本文选择的是黄金分割法。

从以上鲍尔方向加速法的迭代过程可以看出, 由于要进行数次迭代和线性搜索才能得到局部极值点, 需要的计算量较大, 所以考虑将鲍尔方向加速法和模拟退火算法以串行方式结合, 即只在模拟退火算法终止时, 在近似全局最优解的基础上, 进行一次局部寻优来改善最终解的质量。而对于模拟退火算法, 终止方式有多种选择, 诸如在相继的若干个 *Марков* 链中解未得到任何改善; 控制参数 T 的值小于某个充分小的正数 δ ; 两个相继 *Марков* 链所得解之差的绝对值小于某个正数 ε ; 以及当前解的误差小于规定的误差 e 等, 这些均可作为终止准则。但由于模拟退火算法的搜索过程是随机的, 且当 T 值较大时可以接收部分恶化解, 随着 T 值的减小, 恶化解被接收的概率逐渐减小直至趋于零。另一方面, 某些当前解要达到最优解时必须经过暂时恶化的“山脊”^[130]。因此, 上面停止准则均无法保证算法所得到的最终解必定是最优的, 特别地, 它们甚至无法保证最终解正好是整个搜索过程中曾经达到过的最优解。对于那些多极值问题, 这种情况更为突出。因此, 给算法增加一个记忆器, 使之能够记住搜索过程中遇到过的最好结果, 当退火结束时, 将记忆器中的解作为鲍尔方向加速法的初始解, 进行一次局部寻优, 尽量使次最优解能达到全局最优。两种算法相结合的过程如下:

(1) 给定初始温度 T_0 ; 终止温度 T_c ; *Марков* 链的长度 L_k 。根据先验信息给

定模型空间 $[m^{\min}, m^{\max}]$, 随机产生初始解 m_0 , 并计算目标函数值 $E(m_0)$ 。令全局最优解 m^* 和抽样过程最优解 m_i^* 为 $m^* = m_i^* = m_0$ 及 $E(m^*) = E(m_i^*) = E(m_0)$; 迭代序号 $k=0$; 令 $p=q=0$, 其中 p 、 q 分别记录退火和抽样过程中最优解未改善的次数及分别对应的最大限制次数 p_{\max} 、 q_{\max} 。

(2) 在 T_k 温度下, 对当前模型 m_0 采用依赖于温度的似 Cauchy 分布产生新的扰动模型 m , 即

$$m = m_0 + T_k \cdot \tan[\pi(\xi - 0.5)] \cdot (m^{\max} - m^{\min}),$$

式中 T_k 表示第 k 步迭代的温度状态; ξ 为区间 $[0,1]$ 内均匀分布的随机数。接着, 计算相应的目标函数 $E(m)$, 得到 $\Delta E = E(m) - E(m_0)$ 。

(3) 进行概率接收。如果 $P = \exp(-\Delta E/T_k) \geq \xi$, 则新模型 m 被接收, 置 $m_0 = m$, $E(m_0) = E(m)$ 。接着判断: 如果 $E(m) < E(m_i^*)$, 则 $m_i^* = m$, $E(m_i^*) = E(m)$, $q=0$; 否则 $q=q+1$ 。

(4) 在温度 T_k 下, 根据事先给定 Марков 链的长度 L_k , 重复一定次数的扰动和接收过程, 即重复 (2)、(3) 步。如果抽样次数达到 L_k 或 $q > q_{\max}$ 则转 (5)。

(5) 如果 $E(m_i^*) < E(m^*)$, 则 $m^* = m_i^*$, $E(m^*) = E(m_i^*)$, $p=0$; 否则, $p=p+1$ 。

(6) 如果退火满足终止温度 T_c 或 $p > p_{\max}$, 则终止模拟退火算法, 并以次最优解 m^* 作为鲍尔方向加速法的初始解进行局部寻优, 否则, 继续降低温度, $T_{k+1} = \alpha^k \cdot T_0$, $k=k+1$, 转到 (2), 直到满足终止条件。

以上步骤详细的描述了模拟退火法和鲍尔方向加速法的串行式结合过程。在 5.3.1 节中, 将其应用到直流激电测深反演中, 验证它的反演效果。

5.2 遗传算法

遗传算法 (GA)、演化策略 (ES) 和演化规划 (EP) 均属于演化计算的范畴。而遗传算法则是应用最广泛、最具代表性的一种演化计算模式。遗传算法与模拟退火法相似, 也是一种具有指导性地、而不是盲目性地进行随机搜索的全局最优化反演方法, 它可以解决复杂的、大尺度、多变量非线性问题, 但它是模拟生物在自然环境中的遗传和进化过程而形成的一种自适应全局概率搜索算法。目前, 遗传算法的理论基础不如模拟退火法成熟, 但它在某些方面表现出的优越性能是模拟退火法无法比拟的, 因此, 它具有更强的潜在生命力。迄今为止, 遗传算法已经在信号处理、图像识别、地球物理、城市规划、社会科学以及家用电器控制等方面得到了越来越广泛的应用。

由 John Holland 最早建立的遗传算法, 又称为基本遗传算法, 或简单遗传算法。它以采用二进制编码、单点交叉、单点变异及遗传参数为常数等为主要特征。在实际应用中, 存在对参数选择敏感、进化过程后期收敛速度慢, 且有早熟收敛

现象,易于陷入局部极值点。针对这种情况,目前许多学者把注意力转移到遗传算法的理论研究上,并提出一些改进方法。在本节中,首先对遗传算法的发展概况作以综述,并简单探讨遗传算法的基本思想、理论基础及参数选择,最后给出基于遗传算法的混合反演方法。

5.2.1 遗传算法的发展概况

早在 20 世纪 40 年代就有许多学者开始研究如何利用计算机进行生物模拟,他们从生物学的角度进行了生物进化过程的模拟、遗传过程模拟等研究工作。进入 60 年代后,美国密西根大学的 John Holland 及其学生们受到这种生物模拟技术的启发,提出了这种生物遗传和进化机制的适合于复杂系统的自适应概率优化技术——遗传算法(Genetic Algorithm,GA)。70 年代初,Holland 提出了遗传算法的基本原理——模式定理,从而奠定了遗传算法研究的理论基础。1975 年,Holland 教授的专著《自然界和人工系统的自适应性》问世^[142],该书系统的论述了遗传算法和人工自适应系统的原理,因此遗传算法得到正式承认,Holland 也被誉为遗传算法的创始人。此后,遗传算法无论在理论研究方面,还是在实际应用方面都有了长足的发展。70 年代中期,DE Jong 在他的博士论文中设计了一系列遗传算法的执行策略和性能评价指标,对遗传算法性能做了大量的分析。他的在线(on-line)和离线(off-line)指标仍是目前衡量遗传算法性能的主要手段,而他精心挑选的 5 个实验函数也是目前遗传算法数值实验中用的最多的实验函数^[143]。1989 年,Goldberg 在前人研究的基础上,出版了专著《搜索、优化和机器学习中的遗传算法》^[144],系统总结了遗传算法的主要研究成果,全面而完整的论述了遗传算法的基本原理及应用,可以说这本书奠定了现代遗传算法的科学基础,也标志着遗传算法从古典阶段到现代阶段。

近些年,为了提高遗传算法的性能和效率,许多学者在编码策略、基因操作、参数选择以及混合全局优化方法等方面进行了大量的研究。在编码策略方面,Vose (1991) 扩展了 Holland 的模式概念,揭示了不同编码之间的同构性^[145]。张晓姬等(1997)研究了二进制和十进制编码在搜索能力和保持群体稳定性上的差异,得到二进制编码比十进制编码搜索能力强,但前者不能保持群体的稳定性^[146]。徐宗本(2000)提出的可分解/可拼接的二进制编码方式,可以以任意精度获得问题的全局最优解^[147]。在某些问题上,许多学者发现,采用大字符集编码的遗传算法比用二进制编码的遗传算法的性能要好,并且 Autonisse 从理论上证明了 Holland 在推导最小字符集规则时存在的错误,指出了大字符编码的设计可提供更多的模式,与最小字符集编码规则得出的结论截然不同^[148]。基因操作主要包括繁殖、交叉和变异,它是遗传算法实施优化进程的关键步骤,优良的基因操作对改善算法性能和提高算法效率具有重大作用。对于二进制编码的遗传算

法,其操作算子为串型操作算子。目前,许多高级基因操作得到了研究,如显性操作、倒位操作、分离和易位操作、增加和缺失操作以及迁移操作等,这些操作来源于遗传学,其机理和应用还有待于进一步研究^[149]。参数选择是影响遗传算法性能和效率的关键,然而,由于参数空间的庞大和各参数的相关性,尚无确定最优参数的一般方法,求解实际问题时主要靠经验选取。Grefenstette 提出用上层遗传算法来优化下层遗传算法参数的方法,这种有自组织能力的遗传算法具有更高全局最优性和效率,适用范围较广,但工作量较大^[149]。Davis 提出了交叉和变异概率随遗传操作的性能而自适应取值的有效方法,性能提高则交叉概率增加,反之则变异概率增加^[150]; Srinivas 提出一种交叉和变异概率随父串的适应度值自适应变化的新方法,并进行了详细的理论分析和广泛的试验研究,结果显示该方法在非线性和多目标问题的优化中性能优异^[151]。宋爱国提出了一种基于排序操作的进化算子自适应遗传算法,在该算法中,每个个体按适应度大小进行排序,个体的选择、交叉、变异算子的概率均根据个体排序值来自适应地确定,其中进化概率还随进化进程而调节,并用 Markov 链证明了该算法地全局收敛性^[152]。袁慧梅针对简单遗传算法存在着收敛速度慢、易陷入局部极小等缺陷,设计出随相对遗传代数呈双曲线下下降的自适应交换概率。实例测试表明,具有自适应交换概率和变异概率的遗传算法在收敛速度和获得全局最优解的概率两个方面都有很大的提高^[153]。为了提高优化性能和效率,一些并行策略和混合搜索算法应运而生。Grefenstette 全面研究了遗传算法并行实现的结构问题,给出同步主从式、半同步主从式、非同步分布式及网络式等结构形式^[149]。Muhlenbein 等用并行遗传算法在 64 个处理器的并行机上求出了 400 维 Rastrigin 模型函数的全局最小解^[154]。Goldberg 提出把遗传算法与爬山法、梯度法等局部搜索算法相结合的思想^[144]; 张讲社等(1997)、王凌等(1998)将模拟退火法和遗传算法相结合,以克服模拟退火法收敛缓慢和遗传算法易早熟的缺点^[155-156]。对于混合算法的收敛性和复杂性的严格理论分析还有待于进一步研究。

遗传算法尽管有各种新策略和新提案不断的被提出,但它们几乎都是针对特定问题求解而言的,对它们的评估也都是基于对比实验,缺乏深刻而且更具有普遍意义的理论分析。因此,遗传算法现阶段的研究重点又回到了基本理论的开拓和深化以及更通用、有效的操作技术和方法的研究上^[157]。

5.2.2 遗传算法的理论基础

本节将从模式定理、隐含并行性、积木块假设简单介绍遗传算法的理论基础。

一. 模式定理(Schema theorem)

遗传算法的核心是由选择、交叉和变异三个基本步骤组成,那么,它为何能

通过这三步使群体向优化（高适应度）方向发展，其真正的内涵是什么？Holland 所提出的模式定理对遗传算法的原理作了本质的揭示。为了引出模式定理，首先分别给出模式（Schema）、模式阶（Schema order）以及定义距（Defining length）的定义^[157-158]。

模式：基于字符集 $\{0,1,*\}$ 的具有结构相似的字符串。

其中符号“*”代表不确定符号，即在一特定位置上与 0 或 1 相匹配。例如，模式 $H=1*0*$ 表示长度为 4，且在位置 1、3 分别取值为“1”和“0”，则所有字符串的集合 $\{1000, 1100, 1001, 1101\}$ ；而位串 $A=1101$ 是模式 H 的一个表示，这是由于位串 A 与模式 H 在确定位置 1、3 上相匹配。

模式阶：模式 H 中确定位置的个数，记 $O(H)$ 。例如模式 $H=1*0*$ 的阶数为 2，模式 $H=*101$ 的阶数为 3，而模式 $H=1101$ 的阶数为 4。显然，模式的阶数越高，其样本数就越少，因而确定性越高。

定义距：模式 H 中第一个确定位置和最后一个确定位置之间的距离，记 $\delta(H)$ 。例如模式 $H=1*0*$ 的定义距为 2，模式 $H=**01$ 的定义距为 1，模式 $H=**0*$ 的定义距为 0。

在严格地讨论和区分串的相似性时，模式、模式阶以及定义距是非常有用的符号，有这三个概念，就可以讨论模式在遗传操作下的变化。由前面的叙述知道，在引入模式的概念后，遗传算法的实质可看作是对模式的一种运算，即某一模式 H 的各种样本经过选择运算、交叉运算以及变异运算之后，得到一些新的样本和新的模式。

假设在进化过程中的第 t 代时，当前群体 $A(t)$ 中能与模式 H 匹配的样本数记为 $m(H,t)$ ，下一代群体 $A(t+1)$ 中能与模式 H 匹配的样本数记为 $m(H,t+1)$ 。下面对遗传算法在选择算子、交叉算子和变异算子的连续作用下，模式 H 的样本数 $m(H,t)$ 的变化情况进行分析。

首先，讨论选择操作对模式的作用。在选择阶段，每个串是以它的适应度值 f_i 进行选择，或者更确切的说，一个串 A_i 是以选择概率 $P_i = f_i / \sum f_j$ 进行选择的。若一代中群体大小（群体中的总数）为 n ，则模式 H 在 $t+1$ 代中的样本数为

$$m(H,t+1) = m(H,t) \cdot n \cdot f(H) / \sum f_i, \quad (5.2-1)$$

其中 $f(H)$ 为在时间步 t 模式 H 的所有可能的样本适应度的平均值，称为模式 H 的适应度或适应值。设群体平均适应度为 $\bar{f} = \sum f_i / n$ ，则有

$$m(H,t+1) = m(H,t) \cdot f(H) / \bar{f}, \quad (5.2-2)$$

若再假设 H 的平均适应度总是高于群体平均适应度的 c 倍，即 $f(H) = (1+c) \cdot \bar{f}$ 。则有

$$m(H,t+1) = m(H,t) \cdot (1+c), \quad (5.2-3)$$

当从 $t=0$ 开始时, 并假设 c 是一固定值, 则有

$$m(H, t+1) = m(H, 0) \cdot (1+c)^t, \quad (5.2-4)$$

由此式可知, 在选择算子作用下, 平均适应度高于 (低于) 群体平均适应度的模式将按指数增长 (衰减) 的方式进行选择。在一定程度上, 选择可以把按指数增长或减少的模式并行的分配到下一代。但仅有选择过程并无助于检测搜索空间中的新区域, 这是因为选择的结果并没有搜索新的点, 需要进行交叉步。

下面讨论交叉操作对模式的作用。更一般地, 对任意模式可计算出交叉生存概率 P_c 的下界。由于当交叉位置落在定义长度之外时, 这个模式就可以生存。在单点交叉算子的作用下的生存概率为 $P_c = 1 - \delta(H)/(l-1)$ 。考虑到交叉操作本身也是按随机选择方式执行的, 即以概率 P_c 进行特定的交配, 则生存概率有下面的估计

$$P_c \geq 1 - P_c \cdot \delta(H)/(l-1), \quad (5.2-5)$$

这样, 经过选择操作和交叉操作以后, 模式 H 的样本数满足下面估计

$$m(H, t+1) \geq m(H, t) \cdot \frac{f(H)}{\bar{f}} \cdot \left[1 - P_c \cdot \frac{\delta(H)}{(l-1)} \right], \quad (5.2-6)$$

上式表明: 模式增长和衰减依赖于两个因素: 一是模式的适应度值 $f(H)$ 与平均适应度值的相对大小; 另一个是模式定义阶 $\delta(H)$ 的大小 (当交叉概率 P_c 和串长 l 一定时)。显然, 那些即在群体平均适应度值之上同时又具有短的定义距的模式样本数将按指数增长。

最后考虑变异操作对模式的作用。假设编码串的某个位置发生改变的概率为 P_m , 则该位置不变的概率为 $1 - P_m$, 而模式 H 在变异算子的作用下若要不受破坏, 则其中所有的确定位置必须保持不变。因此 H 保持不变的概率为 $(1 - P_m)^{O(H)}$, 其中 $O(H)$ 为模式的阶数。当 $P_m \ll 1$ 时, 模式 H 在变异算子作用下的生存概率为

$$P_c \approx (1 - P_m)^{O(H)} \approx 1 - O(H) \cdot P_m. \quad (5.2-7)$$

因此, 在复制、杂交和变异算子的作用下, 一个特定模式 H 在下一代中期望出现的次数可近似的表示为

$$m(H, t+1) \geq m(H, t) \cdot \frac{f(H)}{\bar{f}} \cdot \left[1 - P_c \frac{\delta(H)}{l-1} - O(H) \cdot P_m \right]. \quad (5.2-8)$$

从上式可以看出, 增加变异几乎不改变之前的结论。

综上所述, 可以得到遗传算法的一个非常重要的结论——模式定理:

模式定理: 在遗传算法中的选择、交叉和变异三种操作相继的作用下, 且变异的概率很小, 则具有低阶、短定义距以及平均适应度高于群体平均适应度的模式, 在子代中将以幂指数增长。

模式定理奠定了遗传算法的理论基础。尽管模式定理在一定意义上解释了遗传算法的有效性, 但它仍然存在一些缺点: 它仅适用于二进制编码的遗传算法,

对其它编码方式此定理未必成立；仅提供了期望值的下界，仍不能说明算法的收敛性；对算法参数的选择不能提供实用的指导，

二. 隐含并行性(Implicit parallelism)

一个串实际上隐含着多个模式，遗传算法实质上是模式的运算。对于一个长度为 l 的二进制串，其中隐含着 2^l 个模式。那么，若群体规模为 n ，则其中隐含的模式个数介于 2^l 和 $n \cdot 2^l$ 之间。显然，由于交叉操作的作用，并非所有的模式都能以较高概率进行处理，这是因为一些定义距较长的模式将遭到破坏^[157]。下面通过一定的分析来给出隐含并行性定理的结论。

假如在 n 个串长为 l 的二进制串中，我们仅考虑那些生存概率大于 P_s 的模式（其中 P_s 为一常数），即在单点交叉和低概率变异的情况下，其出错率 ε 小于 $1 - P_s$ 的模式。因此，我们考虑那些定义距 $l_s < \varepsilon(l-1) + 1$ 的模式。

以 $l_s = 5$ 为例，计算下面串长 l 为 10 的串中所包含的这样的模式

1011100010

首先考虑在下面下划线部分中所包含的模式数

1011100010

则第 5 位是固定的，即计算下列模式的个数：

◇◇◇◇1*****

其中 ‘*’ 代表不确定符号；而 ◇ 即可表示确定值（0 或 1），也可表示为不确定值。显然，由于在 $l_s - 1 = 4$ 个位置上可以是确定的值或不确定的值，因此这样的模式有 $2^{l-1} = 16$ 个。为了计算整个串中的这类模式，我们将上面的下划线向右移动一个位置，即

1011100010

共可移动 $l - l_s + 1$ 次，由此得出一个长度为 l 的串，定义距小于等于 l_s 的模式数为 $2^{l-1} \cdot (l - l_s + 1)$ 。对于群体数为 n ，则此类模式总数为 $n \cdot 2^{l-1} \cdot (l - l_s + 1)$ 。显然，这个结论在群体规模较大的情况下存在着重复计算的问题。为了修正它，取群体数 $n = 2^{l/2}$ ，由此期望阶数不低于 $l_s/2$ 的模式最多重复计数一次。另一方面，考虑到模式数目的分布呈二项式分布，则阶数高于 $l_s/2$ 的模式与低于 $l_s/2$ 的模式数目大致相等，各占一半。如果只考虑高阶的部分，则有关模式数的下界为

$$n_s \geq n \cdot (l - l_s + 1) \cdot 2^{l-2}. \tag{5.2-9}$$

如果 $n = 2^{l/2}$ ，则有

$$n_s = (l - l_s + 1) \cdot n^3 / 4 = C \cdot n^3. \tag{5.2-10}$$

由上式可得到这个结论：模式数与群体规模的立方成比例，记为 $O(n^3)$ 。Holland 称之为遗传算法的隐含并行性。此定理表明，表面上仅对 n 个串进行处理，但实际上并行处理了大约 $O(n^3)$ 个模式，并且无需额外的存储，这正是遗传

算法具有高效搜索能力的所在，即隐含并行性。

三. 积木块假设 (Building block hypothesis)

根据模式定理可知，具有低阶、短定义距以及平均适应度高于群体平均适应度的模式在子代中按指数增长，这类模式在遗传算法中非常重要。通常情况下，把具有低阶、短定义距以及高适应度的模式称为积木块 (Building block)。正如搭积木一样，好的模式在遗传操作的作用下相互拼搭、结合，产生适应度更高的串，从而找到更优的可行解，这正是积木块假设所揭示的内容^[157]。

积木块假设：低阶、短定义距、高平均适应度的模式（积木块）在遗传算子的作用下，通过相互结合能生成高阶、长定义距、高平均适应度的模式，从而最终能生成全局最优解。

积木块假设指出，遗传算法具备寻找到全局最优解的能力，即积木块在遗传算子的作用下，能生成高阶、长距、高平均适应度的模式，最终生成全局最优解。然而，遗憾的是上述结论并没有得到证明，正因为如此才被称为假设，而非定理。目前已有大量的实践证据支持这一假设，从 Bagley 和 Rosenberg 的两篇开创性的文章^[159-160]到现在大量遗传算法的应用实例都表明，积木块假设在许多领域都获得了成功。尽管在理论上还未得到证明，但至少可以肯定，对多数经常遇到的问题，遗传算法都是适用的。

5.2.3 遗传算法的基本思想

遗传算法是基于 Darwin 进化论和 Mendel 的遗传学说演化而来的一种随机搜索优化方法。Darwin 进化论最重要的是适者生存原理。它认为每一物种在发展中越来越适应环境。物种每个个体的基本特征由后代所继承，但后代又会产生一些异于父代的新变化。在环境变化时，只有那些能适应环境的个体特征方能保留下来。Mendel 遗传学说最重要的是基因遗传原理。它认为遗传以密码方式存在细胞中，并以基因形式包含在染色体内。每个基因有特殊的位置并控制某种特殊性质；所以，每个基因产生的个体对环境具有某种适应性。基因突变和基因杂交可产生更适应于环境的后代。经过存优去劣的自然淘汰，适应性高的基因结构得以保存下来。那么，基于进化论和遗传学而发展起来的遗传算法主要是由选择、交叉和变异三步组成，也就是这三个基本步骤构成了遗传算法的核心。在其中的每一步中都可以千变万化，由此形成各具特色的具体遗传算法。但是，它们都有共同的要求和目的^[161]。

(1) 选择 (Selection): 选择是从当前群体中选择出生命力较强的个体，使其能将自身的特征传给下一代，以产生新的群体过程，故有时也称这一操作为再生 (Reproduction)。对“选择”的要求是当前群体中的所有成员均有机会被“选”上，

但生命力较强的（对应于转换计算出适应度值较大的）个体被选中的机会更多一些。所遵循的原则就是自然界中的“适者生存”原则。

(2)交叉(Crossover): 交叉是对选择出的父本模型通过遗传物质的变换, 并重新组合构成新的子本模型的过程。即对被选中的用于繁殖下一代的个体中, 对两个不同个体的相同位置的基因进行交换, 从而产生新个体的过程。“交叉”要求子本模型要继承父本模型的特征, 但又不能与父本模型完全一样。

(3)变异(Mutation): 变异即随机的扰动模型, 增加群体的多样性。对变异操作的要求是以一个较小的变异概率进行。

由上述三个基本步骤即可组成遗传算法的转移过程。但是作为一个完整的算法, 仅有这三个基本步骤还不够, 还必须有许多其它方面的考虑, 将在下一节中做进一步探讨。

遗传算法把问题的解表示成“染色体”, 在算法中也就是以二进制编码的串。并且, 在执行遗传算法之前, 给出一群“染色体”, 即问题的初始解。然后, 把这些初始解置于问题的“环境”中, 并按适者生存的原则, 从中选择出较适应环境的“染色体”进行复制, 再通过交叉、变异过程产生更适应环境的新一代“染色体”群。这样, 一代一代地进化, 直到满足最终的期望条件, 最后就会收敛到最适应环境的一个“染色体”上, 它就是问题的最优解或次最优解, 它的基本流程如图 5.4。

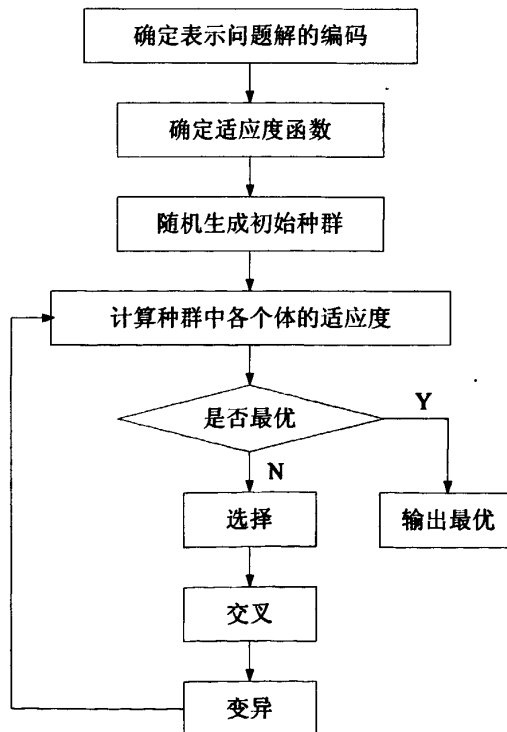


图 5.4 遗传算法的基本流程图

5.2.4 遗传算法的实现技术及改进措施

本节主要从遗传算法的编码方案、适应度函数、操作算子以及遗传参数设置等几个方面探讨遗传算法的实现技术。

一. 编码方案

将待处理问题空间中的参数转换成遗传空间的由基因按一定结构组成的染色体,这一转换操作称为编码,其反操作称为解码。遗传算法中的进化过程是建立在编码机制基础上的,它是遗传算法实现从参数空间到遗传空间非线性映射的桥梁。编码的形式决定了搜索空间的大小,直接影响算法的运行效率。对编码的基本要求是两个空间的解需一一对应,并且编码尽量简明。

优化问题的一般形式为

$$\begin{aligned} \min f(\mathbf{m}), \quad \mathbf{m} &= (m_1, m_2, \dots, m_n) \\ a_i &\leq m_i \leq b_i, \quad i=1, 2, \dots, n. \end{aligned}$$

式中 $f(\mathbf{m})$ 为目标函数; \mathbf{m} 为模型参数; a_i 和 b_i 为第 i 个模型参数的下限和上限; n 为模型空间的维数。对于这类优化问题,可选择的编码方式较多,如二进制编码、十进制编码、浮点数编码及指数编码等^[146]。

1. 二进制编码

二进制编码是应用最早、最广泛的一种编码方式,它根据公式

$$m_i = a_i + \frac{\sum_{j=1}^L t_j 2^{j-1}}{2^L - 1} (b_i - a_i), \quad (5.2-11)$$

将模型参数 m_i 映射成长度为 L 的二进制位串,然后按顺序将每个模型参数 m_i 所对应的位串连接起来,即构成种群的基本单位(个体或染色体),其长度为 $n \times L$ 。式中 t_j 为长 L 的子串中第 j 位的值,取为 0 或 1。 L 的大小根据实际要求确定,与模型参数所要求的精度 ε 和模型的取值范围有关,即可由式

$$2^L \geq (b_i - a_i) / \varepsilon + 1 \quad (5.2-12)$$

确定,其中模型参数 $m_i \in [a_i, b_i]$ 。

2. 十进制编码

与二进制编码相似,只是每个基因位有 10 种可能取值(0~9)。

3. 浮点数编码

浮点数编码则直接把每个变量当作基因处理,它是一种变形的十进制编码,也是一种没有编码的编码方式。与二进制编码相比,它在变异操作上能保持更好的种群多样性,但搜索能力不如二进制编码强。对于地球物理反演中的优化问题,涉及到的反演参数较多,二进制编码和解码过程要耗费大量的计算机时间,从这

个角度考虑,采用浮点数编码还是有一定优势的。所以,在本文中笔者选择了浮点数编码方式。

4. 指数编码

指数编码将变量分成数字段与一位指数位进行编码,其中数字段由变量所有有效数字组成,它特别适合于大范围搜索。

二. 适应度函数

在遗传算法中,适应度函数是用来区分群体中个体好坏的标准,是算法演化过程的驱动力,也是进行自然选择的唯一依据。在进化过程中,利用种群中每个个体的适应度值进行搜索。因此适应度函数的选取至关重要,直接影响到遗传算法的收敛速度以及能否搜索到最优解。一般而言,适应度函数是由目标函数变换而成的。适应度函数可以按下面方式给出^[162]:

1. 若目标函数 $f(m)$ 为最小问题,则适应度函数

$$F(m) = \begin{cases} f_{\max} - f(m), & f(m) < f_{\max} \\ 0, & \text{其它} \end{cases}, \quad (5.2-13)$$

其中 f_{\max} 为 $f(m)$ 的最大值估计。 $f(m)$ 的另一种形式为

$$F(m) = \frac{1}{1 + f_c + f(m)}, \quad f_c \geq 0, f_c + f(m) \geq 0, \quad (5.2-14)$$

式中 f_c 为目标函数的一个保守估计值。

2. 若目标函数 $f(m)$ 为最大问题,则适应度函数

$$F(m) = \begin{cases} f(m) - f_{\min}, & f(m) > f_{\min} \\ 0, & \text{其它} \end{cases}, \quad (5.2-15)$$

其中 f_{\min} 为 $f(m)$ 的最小值估计。 $f(m)$ 的另一种形式为

$$F(m) = \frac{1}{1 + f_c - f(m)}, \quad f_c \geq 0, f_c - f(m) \geq 0, \quad (5.2-16)$$

式中 f_c 的含义同上。

在遗传算法的早期群体中,常常会出现某一个体适应度远远超过群体平均适应度,使其在应用比例选择时出现过多的复制机会而导致早熟现象;当后期群体个体适应度差异较小时,容易导致遗传迭代继续优化的潜能降低或停滞现象。因此,在遗传迭代中要采取一些措施对适应度函数进行调节。通常采用的方式有:

$$\text{线性变换: } F' = \alpha F + \beta, \quad (5.2-17)$$

$$\text{指数变换: } F' = \exp(-\mu F), \quad (5.2-18)$$

$$\text{幂变换: } F' = F^k, \quad (5.2-19)$$

其中 F 和 F' 分别为变换前后的适应度函数; α 、 β 和 μ 为修正系数; k 为幂指数。Kreinovich V. 详细讨论了如何选取变换方式来克服遗传迭代中的早熟和停滞现象^[163]。在本文中,笔者选择(5.2-18)式进行指数比例变换。对于修正系数

系数 μ ，在进化初期要选择较大的值，减少适应度函数的差异；在进化后期要选择较小的值，增加适应度函数的差异。因此笔者将修正系数 μ 化为以进化世代数为自变量的函数，有

$$\mu = 1/\sqrt{g_n}$$

关系，其中 g_n 为进化的世代序号。

三. 遗传操作

在应用遗传算法求解优化问题时，首先要确定初始种群，求出各个体的适应度，并进行适应度变换，再通过编码转化为染色体群，这时就可进行遗传操作。遗传操作包括三个基本操作算子：选择算子、交叉算子和变异算子。它们都采用随机搜索的方法，但不是传统的无方向的随机搜索，而是高效的有方向的随机搜索，这点与模拟退火方法相同。

1. 选择算子

选择也被称为复制，即对群体中的个体进行优胜劣汰操作，适应度高的个体被遗传到下一代群体中的概率较大；适应度较低的个体被遗传到下一代中的概率较小。所以，选择操作就是选出一部分最佳个体直接复制到下一代，它为进化过程提供了历史信息，避免了最佳个体被交叉操作破坏，可提高全局收敛性和计算效率。

目前普遍采用的选择算子为比例选择算子，它的基本思想是各个体被选中的概率与其适应度大小成正比。则个体 i 被选中的概率为

$$P_i = F_i / \sum_j^n F_j, \tag{5.2-20}$$

式中 F_i 和 F_j 分别为个体 i 和 j 的适应度； n 为种群规模。除比例选择算子外，针对不同的问题还有许多其它选择算子，如最优保存策略、随机联赛选择、排序选择等^[162]。

2. 交叉算子

所谓交叉操作，是指两个相互配对的染色体按某种方式交换其部分基因，从而形成新的个体。它在进化过程中起到了关键性的作用，有效的交叉策略可保证全局搜索的质量和效率。常用的交叉算子主要有单点交叉、双点交叉、多点交叉及算术交叉算子等^[158]。下面以双点交叉为例简要说明交叉操作的运算过程，双点交叉是在个体编码串中随机设置两个交叉点，然后进行部分基因交换，图 5.5 为双点交叉示意图。假设 A、B 为两两随机配对后的两条染色体随机设置某一基

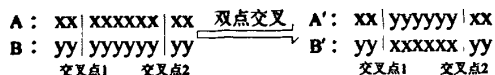


图 5.5 为双点交叉示意图

因座（图中的虚竖线位置）作为交叉点，然后以一定的交叉概率 P_c 相互交换两个交叉点的中间部分基因。图中的 A' 、 B' 为交叉运算后产生的两个新的染色体。

在本文中，笔者选择算术交叉算子进行运算，它常用于浮点数编码遗传算法中。对于选择的两个母体 $s_1 = (u_1, u_2, \dots, u_n)$ 和 $s_2 = (v_1, v_2, \dots, v_n)$ ，通过交叉操作获得两个后代 $s'_1 = (u'_1, u'_2, \dots, u'_n)$ 和 $s'_2 = (v'_1, v'_2, \dots, v'_n)$ 。则算术交叉过程可描述为：首先随机产生 n 个 $[0, 1]$ 区间的随机数 r_1, r_2, \dots, r_n ，两个后代的个体可表示为

$$\begin{cases} u'_i = r_i u_i + (1-r_i) v_i = v_i + r_i (u_i - v_i) \\ v'_i = r_i v_i + (1-r_i) u_i = u_i + r_i (v_i - u_i) \end{cases}, \quad i=1, 2, \dots, n. \quad (5.2-21)$$

可以看出，通过算术交叉后产生的两个子代，其分量仍在其限定的区域之内。

3. 变异算子

变异是生物进化中产生新种群的重要环节，即遗传基因不完全来源于父母，而是由于受外界环境的影响发生少量改变。遗传算法中的变异操作，是指将个体编码串中的某些基因座上的基因值用该基因座的其它等位基因来替换，从而形成一个新的个体。交叉运算是产生新个体的主要方法，它决定了遗传算法的全局搜索能力；而变异运算只是产生新个体的辅助方法，但它决定了遗传算法的局部搜索能力。交叉算子和变异算子相互配合，共同完成对搜索空间的全局和局部搜索，从而使得遗传算法能够以良好的搜索性能完成最优化问题的寻优过程。

对于浮点数编码，笔者选择均匀变异算子进行计算。均匀变异操作是指分别用符合某一范围内均匀分布的随机数，以某一较小的概率来替换个体编码串中各个基因座上的原有基因值。假设某染色体 $s = (u_1, u_2, \dots, u_i, \dots, u_n)$ 的元素 u_i 被选择变异，且 $u_i \in [u'_i, u''_i]$ 。变异后的结果为 $s' = (u_1, u_2, \dots, u'_i, \dots, u_n)$ ，则经变异的元素 u' 可表示为

$$u'_i = u'_i + r(u''_i - u'_i), \quad i=1, 2, \dots, n. \quad (5.2-22)$$

其中 r 为 $[0, 1]$ 区间的随机数。目前常用的变异算子还有：基本变异算子、逆转变异算子、非均匀变异算子等^[158]。

四. 遗传参数设置

在遗传算法中，控制参数主要有编码长度、种群规模、交叉概率、变异概率和终止代数等。编码长度与选择的编码方式有关，对于二进制编码可由式(5.2-12)进行估计；对于浮点数编码，编码长度一般与模型参数个数相等。种群规模一般在数十到数百之间。如果种群过小，使初始群体中所含有的模式就越少，遗传算法只在有限的模式空间，从而不易得到最优解；如果种群规模过大，遗传操作所处理的模式就越多，就越有利于生成好的积木块，从而得到最优解的可能性就越大，但群体规模过大会影响计算效率^[158]。

在遗传操作中最主要的控制参数是交叉概率 P_c 和变异概率 P_m 。交叉概率控

制着交叉操作被使用的频度,较大的交叉概率可增强遗传算法的大范围搜索的能力,但群体中的优良模式遭到破坏的可能性增大,可能产生较大的代沟,不利形成积木块;交叉概率越低,产生的代沟就越小,这样可保持一个连续的解空间,找到全局最优解的可能性增大,但进化的速度就越慢;若交叉概率很低,就会使得较多的个体直接复制到下一代,遗传搜索可能陷入停滞状态。建议取值范围 $0.4 \sim 0.99$ ^[164]。变异概率则控制着变异操作被使用的频度,变异概率取值较大时,虽然能够增加群体的多样性,但也有可能破坏掉很多较好的模式,使得遗传算法的性能近似于随机搜索算法的性能;变异概率取的过小时,则变异操作产生新个体和抑制早熟现象的能力会变的较差。建议的取值范围 $0.0001 \sim 0.1$ ^[164]。

鉴于上述原因,不少学者提出了自适应调整遗传概率的策略^{[152~153][165~166]}。他们的基本思想是:遗传概率采用适应度函数自适应给出,在进化的初期使用较大的遗传概率,从而使得种群具有多样性,保证遗传算法有较高的搜索能力;在进化的后期,较小的遗传概率将使算法具有良好的收敛性。Srinivas 等首先提出了一种自适应遗传算法, P_c 和 P_m 能够随适应度值自适应的改变^[165]。其交叉概率 P_c 和变异概率 P_m 的自适应计算公式为

$$P_c = \begin{cases} k_1 (F_{\max} - F') / (F_{\max} - \bar{F}) & F \geq \bar{F} \\ k_2 & F < \bar{F} \end{cases}, \quad (5.2-23)$$

$$P_m = \begin{cases} k_3 (F_{\max} - F) / (F_{\max} - \bar{F}) & F \geq \bar{F} \\ k_4 & F < \bar{F} \end{cases}, \quad (5.2-24)$$

式中 k_1 、 k_2 、 k_3 、 k_4 在区间 $(0, 1)$ 内取值,本文在计算过程中, $k_1 = k_2 = 0.6$, $k_3 = k_4 = 0.05$; F_{\max} 为群体中最大的适应度值; \bar{F} 为群体的平均适应度值; F' 为两个待交叉个体中较大的适应度值; F 为两个待交叉个体中较小的适应度值或待变异个体的适应度值。分析(5.2-23)和(5.2-24)式,当适应度值低于平均适应度值时,说明该个体是性能不好的个体,对它就采用较大的 P_c 和 P_m ,使该个体被淘汰掉;反之,说明该个体性能优良,则根据适应度值计算 P_c 和 P_m 。然而,当适应度值越接近最大适应度值时, P_c 和 P_m 就越小;当适应度值等于最大适应度值时, P_c 和 P_m 等于零,相当于采用了精英选择策略,使其直接复制到下一代。因此,自适应的遗传算法在保持群体多样性的同时,保证遗传算法的收敛性。

对于遗传算法的终止准则,主要有以下几种:已经找到能接受的优秀个体;预先设定最大世代数;在连续若干代种群最优个体没有改进;最适应个体占群体的比例已达到规定比例;以及在预定世代数内种群平均适应度无改进(变化量小于某一阈值)等形式或几种形式相结合。

5.2.5 基于遗传算法的全局混合反演方法

遗传算法由于其运算简单和解决问题的高效性而被广泛应用于众多领域。理

论上已经证明, 遗传算法能从概率的意义上以随机的方式寻求到问题的最优解。但实践表明, 遗传算法在应用中易出现早熟、局部搜索能力差等问题。那么, 怎样才能使遗传算法在实践中得到更好的应用呢? 一个有效的途径就是采用混合策略, 即把遗传算法与其它一些搜索能力较强的优化方法(如模拟退火法、最速下降法、禁忌搜索法等)有效的结合起来^{[157][162][168]}, 融和成一种非线性全局混合优化方法, 以提高遗传算法的运行效率和求解质量。在本节中, 将提出遗传算法与模拟退火算法以及遗传算法与鲍尔方向法相结合的混合反演方法, 并给出它们的具体结合方式和迭代过程。

一. 遗传算法与模拟退火算法的镶嵌式结合

在众多的混合全局优化方法中, 模拟退火和遗传算法的结合是近些年国内外研究的热点^[169-172], 主要由于它们都是源于自然界某些规律的算法, 并且都属于概率随机搜索的一类算法, 它们之间具有很多的相似性。所以, 研究将它们有机的结合起来, 提高各自的计算效率和求解质量, 是一项很有意义的工作。遗传算法的局部搜索能力相对较弱, 但把握全局搜索过程的能力较强; 相比之下, 模拟退火算法局部搜索能力相对较强, 但它对搜索空间的情况了解不多, 导致了大量的多余迭代。那么, 如果将两种算法结合, 彼此间取长补短, 则有可能构造出性能更加优良的全局优化算法。

由模拟退火和遗传算法相结合构成的混合方法与基本遗传算法的运行过程相类似, 首先从一组随机产生的初始群体开始全局最优解的搜索过程, 然后通过选择、交叉、变异等遗传操作产生一组新个体, 接着, 再独立地对所产生地各个个体进行模拟退火过程, 以其结果作为下一代群体的个体。这个过程反复迭代进行, 直到满足终止条件为止。退火遗传算法的具体描述如下^[164]:

(1) 给遗传算法的参数赋初值。包括种群规模 m ; 模型参数个数 n 及其模型空间 $[m', m'']$; 遗传计算所允许的最大迭代数; 交叉概率 P_c 和变异概率 P_m 分别采用式(5.2-23)和(5.2-24)自适应给出; 以及模拟退火过程的初始温度 T_0 ; 控制温度 T 的衰减因子 α 。

(2) 随机产生初始群体 $P(t)$, 并计算 $P(t)$ 的适应度。适应度值采用式(5.2-14)进行定义, 并利用式(5.2-18)对其进行指数拉伸。

(3) 个体的选择操作: 采用式(5.2-20)进行轮盘赌选择操作。

(4) 个体的交叉操作: 按(5.2-23)式计算交叉概率 P_c , 并采用算术交叉算子(5.2-21)式进行交叉操作。

(5) 个体的变异操作: 按(5.2-24)式计算变异概率 P_m , 并采用均匀变异算子(5.2-22)式进行变异操作。

(6) 个体的模拟退火过程: 对所产生地各个个体进行模拟退火过程, 并将退

火后的模型参数限定在模型空间 $[m', m'']$ 内。

(7) 计算新个体的适应度值。转到第(3)步, 继续遗传操作, 直至种群规模 m 。

(8) 判断是否满足终止条件。如果满足, 输出最优结果; 否则, 转到第(3)步, 继续进化。

上述描述即为模拟退火与遗传算法以镶嵌式结合方式构成的混合反演方法的迭代过程。遗传算法在与全局优化方法结合方面, 除能与模拟退火方法结合外, 还可以与混沌算法、神经网络法等方法结合。限于篇幅, 不再赘述。在 5.3.2 节中, 将退火遗传算法应用到直流激电测深反演当中, 验证其反演效果。

二. 遗传算法与鲍尔方向法的镶嵌式结合

将遗传算法与鲍尔方向法有机结合起来, 是优化遗传算法性能的一个卓有成效的方法^[173]。这种混合型遗传算法不但模拟了生物种群的学习过程, 而且事实上还模拟了种群个体在其生命周期内具有学习行为的这一生物现象。在本节中, 将 5.1.4 节中介绍的鲍尔方向法融入到浮点编码遗传算法中, 把它作为与选择、交叉、变异平行的一个操作算子, 构成一种镶嵌式结合方式的混合反演方法。该算法的具体迭代步骤如下

(1) 给遗传算法的参数赋初值。包括种群规模 m , 模型参数个数 n 及其模型空间 $[m', m'']$, 进行鲍尔方向法搜索的概率 P_{powell} 及遗传计算所允许的最大迭代数, 交叉概率 P_c 和变异概率 P_m 分别采用式(5.2-23)和(5.2-24)自适应给出。

(2) 种群初始化(随机产生), 并计算各个体的适应度值。适应度值采用式(5.2-13)进行定义, 并利用式(5.2-18)对其进行指数拉伸。

(3) 个体的选择操作: 采用式(5.2-20)进行轮盘赌选择操作。

(4) 个体的交叉操作: 按(5.2-23)式计算交叉概率 P_c , 并采用算术交叉算子(5.2-21)式进行交叉操作。

(5) 个体的变异操作: 按(5.2-24)式计算变异概率 P_m , 并采用均匀变异算子(5.2-22)式进行变异操作。

(6) 对每个个体按照概率 P_{powell} 进行鲍尔寻优。并将局部寻优后的模型参数限定在模型空间 $[m', m'']$ 内。

(7) 计算新个体的适应度值。转到第(3)步, 继续遗传操作, 直至种群规模 m 。

(8) 判断是否满足终止条件。如果满足, 输出最优结果; 否则, 转到第(3)步, 继续进化。

上述描述即为鲍尔方向法与遗传算法以镶嵌式结合方式构成的混合反演方法的迭代过程。遗传算法在与局部优化方法结合方面, 除能与鲍尔方向法结合外, 还可以与拟牛顿法、最小二乘法(如果目标函数可微)以及单纯形等方法结合, 限于篇幅和时间关系, 笔者将其作为今后混合反演方法的研究方向。在 5.3.2 节

中, 将鲍尔方向法与遗传算法结合的混合方法应用到直流激电测深反演当中, 验证其反演效果。

5.3 基于全局混合反演技术的直流激电测深反演

在本节中, 笔者将前面提出的基于模拟退火的混合反演技术, 以及基于遗传算法的混合反演技术, 应用到直流激电测深反演当中, 验证全局混合反演方法的反演性能, 并进行对比分析。

5.3.1 基于模拟退火混合反演技术的直流激电测深反演

在本节中, 将 5.1 节中的模拟退火混合反演技术应用到直流激电测深反演当中, 验证其反演效果。对于直流激电测深反演, 为提高解估计的质量及加快反演的收敛速度, 采用如下目标函数作为拟合尺度

$$E = \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\ln \rho_{ai} - \ln \rho_{ci})^2 \right]^{1/2}, \quad (5.3-1)$$

其中 ρ_{ai} 和 ρ_{ci} 分别为第 i 个极距的实测和模拟的视电阻率。先反演出各层的电阻率 ρ 和层厚 h , 然后再进行极化率反演。对于极化率反演, 应用下式

$$\rho_a^* = \frac{\rho_a}{1 - \eta_a}, \quad (5.3-2)$$

将实测的视电阻率 ρ_a 和视极化率 η_a 转化为等效视电阻率 ρ_a^* , 然后应用模拟退火混合反演技术反演各层的等效电阻率 ρ^* , 再根据等效电阻率公式

$$\eta = \frac{\rho^* - \rho}{\rho^*}, \quad (5.3-3)$$

换算出各层的极化率 η , 反演结束。

下面对文献[174]中给出的四个模型进行反演试算, 其中模型参数见表 5.1。在反演中, 冷却进度表的参数分别为: 以初始拟合差的维数 (模型参数的个数) 倍作为初始温度 T_0 ; 控制温度 T 的衰减因子为 0.98; 选择最大迭代次数 2000, 以及连续 10 次迭代误差没有变化作为终止条件; *Марков* 链的长度 L_k 与模型空间的维数相等。图 5.1 为模型一电阻率和极化率反演拟合差随迭代次数的变化曲线。从图中可以看出, 当迭代次数达到 1200 时, 误差下降曲线基本趋于稳定, 拟合差已达到 $10^{-8} \sim 10^{-9}$ 量级, 在奔四 1.7GHz 的 PC 机上耗费约 2 秒钟。

表 5.2~表 5.5 分别为模型一到模型四的电阻率和极化率反演结果。在表中, 单纯形与模拟退火法结合用 SMSA 表示; 鲍尔法与模拟退火法结合用 PSA 表示。从表中可以看出, 两种混合反演方法的反演效果都非常好。当模型参数小于或等于四层时, 模型参数的相对误差基本都控制在 1% 以内, 可见其寻优能力是比较强的。但对于高阻和低阻的混层情况 (如模型四), 相对误差较大, 特别是层厚

参数。对于单纯形模拟退火法，第三层的层厚相对误差约 5%；对于鲍尔模拟退火法，第三层的层厚相对误差已达到约 10%。说明对于混层情况，混合反演法也是不能完全克服的。而鲍尔模拟退火法的相对误差要大些，这也说明模拟退火法的反演结果对最终反演结果有一定的影响，如果给鲍尔法的初始解较好，经少数迭代就可达到全局最优解；如果给鲍尔法的初始解不理想，它依然容易陷入局部极值。从计算量的角度分析，它们都需要上万次目标函数的计算，并且随模型参数的增加而增大，说明它们仅适合求解模型参数少、正演耗费时间短的反问题。对于大型地球物理反问题，唯有在向量机上采用并行算法进行计算，否则，在 PC 机上计算将失去实际意义。

表 5.1 四组模型的模型参数

模型编号	模型参数	第一层	第二层	第三层	第四层	第五层
	电阻率 Ωm	20	50	200	—	—
模型一	极化率%	2	10	5	—	—
	厚度(m)	5	10	—	—	—
	电阻率 Ωm	40	20	200	—	—
模型二	极化率%	4	8	16	—	—
	厚度(m)	5	10	—	—	—
	电阻率 Ωm	100	50	20	500	—
模型三	极化率%	2	5	15	10	—
	厚度(m)	5	10	20	—	—
	电阻率 Ωm	50	20	100	50	500
模型四	极化率%	2	10	5	15	10
	厚度(m)	5	10	20	40	—

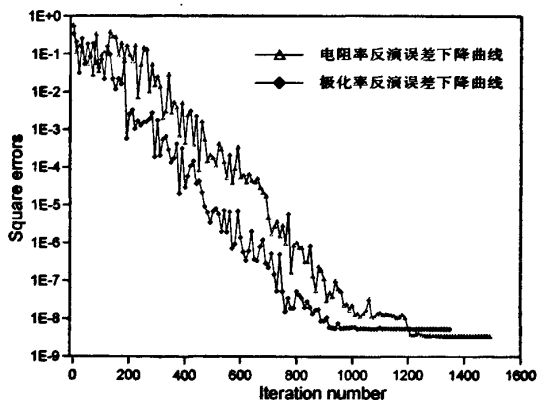


图 5.6 模型一电阻率和极化率反演拟合差随迭代次数的变化曲线

表 5.2 模型一的电阻率/极化率反演结果

	模型参数	第一层	第二层	第三层
初始模型空间	电阻率 Ωm	10-30	25-75	100-300
	极化率%	1-3	5-15	2.5-7.5
	厚度(m)	2.5-7.5	5-15	
SMSA 法反演结果	电阻率 Ωm	20.0031	50.0136	200.001
	极化率%	2.00177	10.0021	4.99912
	厚度(m)	5.00239	9.99876	—
	目标函数的计算次数	23681		
PSA 法反演结果	电阻率 Ωm	20.0032	50.0152	200.001
	极化率%	2.00183	10.0019	4.9992
	厚度(m)	5.00249	9.99882	—
	目标函数的计算次数	20827		

表 5.3 模型二的电阻率/极化率反演结果

	模型参数	第一层	第二层	第三层
初始模型空间	电阻率 Ωm	20-60	10-30	100-300
	极化率%	2-6	4-12	8-24
	厚度(m)	2-10	5-20	
SMSA 法反演结果	电阻率 Ωm	40.0006	20.0244	200.006
	极化率%	3.99841	7.99607	16.0015
	厚度(m)	4.99485	10.0156	—
	目标函数的计算次数	22513		
PSA 法反演结果	电阻率 Ωm	40.0006	20.0241	200.006
	极化率%	3.99852	7.99607	16.0014
	厚度(m)	4.99491	10.0154	—
	目标函数的计算次数	20589		

表 5.4 模型三的电阻率/极化率反演结果

	模型参数	第一层	第二层	第三层	第四层
初始模型空间	电阻率 Ωm	50-200	20-80	5-30	200-700
	极化率%	1-5	2-8	5-25	5-15
	厚度(m)	2-10	5-20	10-40	
SMSA 法反演结果	电阻率 Ωm	99.9998	50.0458	20.012	499.985
	极化率%	2.0014	4.98366	14.9988	10.0015

	厚度(m)	4.9972	9.98512	20.0213	
	目标函数的计算次数	33175			
PSA 法 反演结果	电阻率 Ωm	99.9999	50.0476	20.0164	499.986
	极化率%	2.00136	4.98304	14.998	10.0016
	厚度(m)	4.99712	9.98337	20.0265	—
	目标函数的计算次数	34588			

表 5.5 模型四的电阻率/极化率反演结果

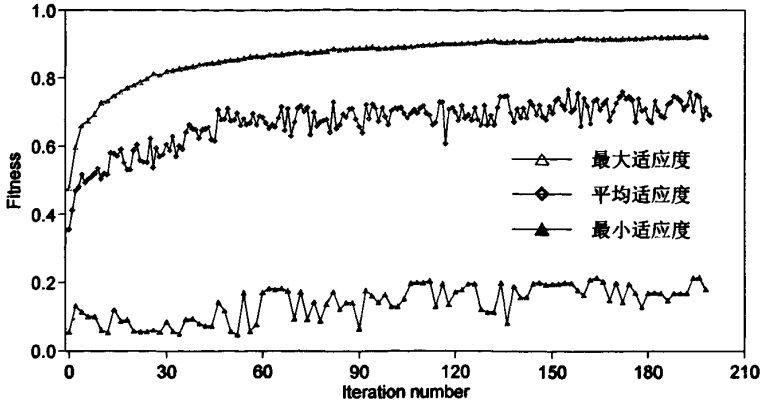
	模型参数	第一层	第二层	第三层	第四层	第五层
初始模型空间	电阻率 Ωm	40-80	10-30	50-150	20-60	200-600
	极化率%	1-5	5-20	1-8	5-20	5-15
	厚度(m)	2-10	5-15	10-30	20-60	—
SMSA 法 反演结果	电阻率 Ωm	50	20.0421	101.784	51.0101	500.095
	极化率%	1.99967	10.0079	4.74317	14.8926	10.0032
	厚度(m)	4.9952	10.0672	19.0006	41.3973	
	目标函数的计算次数	39769				
PSA 法 反演结果	电阻率 Ωm	50.0028	20.1692	105.523	50.5139	499.888
	极化率%	1.99786	9.97395	4.58849	14.792	10.0026
	厚度(m)	4.98189	10.2447	18.0766	41.4659	—
	目标函数的计算次数	37457				

5.3.2 基于遗传算法混合反演技术的直流激电测深反演

在本节中，将 5.2 节中基于遗传算法的混合反演技术应用到直流激电测深反演当中，验证其反演效果。为提高解估计的质量及加快反演的收敛速度，依然采用 (5.3-1) 式作为目标函数。对于极化率反演，同样采用 5.3.1 节的方法，即先完成电阻率反演过程，再对等效电阻率进行反演，然后将各层的等效电阻率转化为各层的极化率，整个反演过程结束。

在下面模型反演中，遗传参数分别为：种群规模为 100；最大世代数 200；交叉概率和变异概率由式 (5.2-23) 和 (5.2-24) 自适应给出，其中最大交叉和变异概率分别为 0.6 和 0.05。对于退火遗传混合反演方法，初始温度 T_0 和控制温度 T 的衰减因子按 5.3.1 节方式给出；对于鲍尔方向法与遗传算法结合的混合反演方法，在遗传操作过程中，启动鲍尔方向法进行局部搜索过程的概率 P_{powell} 为 0.001。

下面首先对 5.3.1 节中的模型四进行电阻率和极化率反演，图 5.7 为退火遗传算法的适应度随迭代次数的变化曲线。从图中可以看出，群体的适应度随世代数的增加，最优个体的适应度逐渐增大，并趋于稳定；群体的平均适应度也呈现



5.7 退火遗传算法的适应度随迭代次数的变化曲线

出增大趋势，反映了整个群体向高级进化的过程；对于适应性最差的个体，在整个进化过程中，适应度的总体趋势也是增大的。进化过程结束后，将进化过程中的最大适应度值对应的个体作为最佳解估计，也就是最优的反演结果。应用上述两种基于遗传算法的混合反演技术对模型四进行反演，反演结果见表 5.6，在表中，退火与遗传算法结合用 SAGA 表示；鲍尔法与遗传算法结合用 PGA 表示。对比两种方法的反演结果，反演参数的相对误差是相当的，但退火遗传算法的计算量要大的多，约为鲍尔与遗传混合法的四倍，可见计算量是相当可观的。

表 5.6 模型四的电阻率/极化率反演结果

	模型参数	第一层	第二层	第三层	第四层	第五层
初始模型空间	电阻率 Ωm	40—80	10—30	50—150	20—60	200—600
	极化率%	1—5	5—20	1—8	5—20	5—15
	厚度(m)	2—10	5—15	10—30	20—60	—
SAGA 法反演结果	电阻率 Ωm	50.221	21.5438	100.182	47.9394	499.088
	极化率%	2.03043	11.0719	5.48782	13.936	11.7891
	厚度(m)	5.24269	11.2289	20.6661	39.3249	—
	目标函数的计算次数	80200				
PGA 法反演结果	电阻率 Ωm	50.003	20.1704	103.907	49.1649	499.762
	极化率%	1.99892	9.95495	4.86426	14.9084	9.98908
	厚度(m)	4.98133	10.2187	19.0469	39.8032	—
	目标函数的计算次数	18895				

我们知道，直流激电测深曲线的反演属于典型的多解性问题，即在一定的误差范围内，易于出现 S 等值 ($v_2 = h_2 / h_1 \ll 1, \mu_3 = \rho_3 / \rho_2 \gg 1$) 和 T 等值 ($v_2 \ll 1, \mu_3 \ll 1$) 现象，具体表现在反演时，目标函数出现很多几乎相等的次级大。下面对等值现象较严重的三组模型采用前面给出的四种混合方法进行反演试算，模型

参数见表 5.7。

表 5.7 三组模型的模型参数

模型编号	模型参数	第一层	第二层	第三层	第四层
模型一	电阻率 Ωm	20	5	200	—
	极化率%	2	10	5	—
	厚度(m)	20	2	—	—
模型二	电阻率 Ωm	40	500	20	—
	极化率%	5	10	5	—
	厚度(m)	20	2	—	—
模型三	电阻率 Ωm	100	50	5	500
	极化率%	2	5	15	10
	厚度(m)	5	20	5	—

表 5.8~5.10 分别为模型一到模型二的电阻率/极化率反演结果。在表格中，带下划线的模型参数为相对误差最大的模型参数。从计算量的角度分析，SMSA、PSA 及 PGA 法的计算量相当，GASA 法的计算量最大，几乎是另外三种算法计算量的四倍；从最大相对误差的角度分析，模型参数的最大相对误差基本都出现在等值性较严重的层参上。如果将反演模型参数的最大相对误差 5% 作为一种衡量克服等值现象的标准，那么，四种混合反演方法都没有达到要求。说明等值现象是客观存在的，只能尽量减小或压制，而不能被完全克服。从压制等值现象的角度来看，在四种混合反演方法当中，PGA 混合法最好；SAGA 混合法次之，但计算量较大；SMSA 和 PSA 法相对前两者要差一些，但对于不具有等值性的层参，反演结果的相对误差很小。对于电测深曲线固有的等值现象，可通过改变模型参数空间和算法的参数进行多次反演，合理的给出等值薄层的解估计，作者对大量理论模型进行反演试算，也证明了这种方式是可行的。

表 5.8 模型一的电阻率/极化率反演结果

	模型参数	第一层	第二层	第三层	模型参数的最大相对误差(%)
初始模型空间	电阻率 Ωm	10—40	2—8	50—300	
	极化率%	1—5	5—15	2—8	
	厚度(m)	10—30	0.5—4	—	
SMSA 法反演结果	电阻率 Ωm	19.9995	<u>6.6795</u>	200.007	33.590
	极化率%	1.99661	<u>9.83834</u>	5.00189	1.617
	厚度(m)	19.8446	<u>2.72476</u>	—	36.238
	目标函数的计算次数			24748	

PSA 法 反演结果	电阻率 Ωm	19.9996	<u>7.99988</u>	200.011	59.998
	极化率%	1.99564	<u>9.66047</u>	5.00442	3.395
	厚度(m)	19.6718	<u>3.33405</u>	—	66.703
	目标函数的计算次数		21847		
SAGA 法 反演结果	电阻率 Ωm	29.4178	<u>3.36675</u>	183.15	32.665
	极化率%	2.19142	8.07442	<u>2.95065</u>	40.987
	厚度(m)	17.4817	<u>1.42265</u>	—	28.868
	目标函数的计算次数		75213		
PGA 法 反演结果	电阻率 Ωm	19.9994	<u>4.39669</u>	200	20.110
	极化率%	1.99954	<u>10.0565</u>	4.99961	0.565
	厚度(m)	20.0519	<u>1.74689</u>	—	12.655
	目标函数的计算次数		21769		

表 5.9 模型二的电阻率/极化率反演结果

	模型参数	第一层	第二层	第三层	模型参数的最大相对误差(%)
初始模型空间	电阻率 Ωm	20—60	200—700	10—30	
	极化率%	2—8	5—15	2—8	
	厚度(m)	10—30	0.5—4		
SMSA 法 反演结果	电阻率 Ωm	39.9976	<u>368.985</u>	19.9996	26.203
	极化率%	5.00042	<u>9.97273</u>	5.00259	0.273
	厚度(m)	19.9447	<u>2.71842</u>	—	35.921
	目标函数的计算次数		24215		
PSA 法 反演结果	电阻率 Ωm	39.997	<u>253.428</u>	19.9985	49.314
	极化率%	4.99788	<u>9.91119</u>	5.00482	0.888
	厚度(m)	19.8088	<u>3.98909</u>	—	99.455
	目标函数的计算次数		19095		
SAGA 法 反演结果	电阻率 Ωm	43.7775	<u>428.626</u>	20.4206	14.275
	极化率%	<u>3.02367</u>	10.1775	5.71681	39.527
	厚度(m)	<u>16.6373</u>	2.08378	—	16.814
	目标函数的计算次数		80183		
PGA 法 反演结果	电阻率 Ωm	39.9978	<u>467.102</u>	19.9999	6.579
	极化率%	5.00132	<u>9.99361</u>	5.00195	0.064
	厚度(m)	19.9897	<u>2.14182</u>	—	7.091
	目标函数的计算次数		22092		

表 5.10 模型三的电阻率/极化率反演结果

	模型参数	第一层	第二层	第三层	第四层	模型参数的最大相对误差(%)
初始模型空间	电阻率 Ωm	5-150	20-80	2-8	200-700	
	极化率%	0.5-4	2-8	10-25	5-15	
	厚度(m)	2-8	10-35	2-8	-	
SMSA 法反演结果	电阻率 Ωm	99.9949	49.9949	<u>6.16808</u>	500.063	23.362
	极化率%	2.00177	<u>4.98676</u>	14.9797	10.0108	0.265
	厚度(m)	5.00088	19.911	<u>6.17971</u>	-	23.594
	目标函数的计算次数		36129			
PSA 法反演结果	电阻率 Ωm	99.9942	49.9833	<u>2.65246</u>	499.984	46.951
	极化率%	1.99844	<u>5.02338</u>	15.0314	9.99065	0.468
	厚度(m)	5.00184	20.1329	<u>2.64469</u>	-	47.106
	目标函数的计算次数		28637			
SAGA 法反演结果	电阻率 Ωm	79.0312	58.2907	5.01354	<u>637.73</u>	27.031
	极化率%	<u>3.11029</u>	6.65683	16.1852	9.66793	55.515
	厚度(m)	4.05971	<u>28.2383</u>	4.97676	-	41.192
	目标函数的计算次数		79154			
PGA 法反演结果	电阻率 Ωm	99.9951	49.9909	<u>5.37235</u>	500.039	7.447
	极化率%	2.00054	<u>4.99816</u>	14.9954	10.0042	0.037
	厚度(m)	5.00119	19.9771	<u>5.37475</u>	-	7.495
	目标函数的计算次数		23740			

本章小结

1、考虑到大多地球物理反问题都具有多参数、非线性的特点,对具有全局搜索能力的两种完全非线性方法——模拟退火法和遗传算法进行了研究。

2、对于模拟退火算法:简要介绍了模拟退火算法的发展概况,从模拟退火算法的物理背景、Metropolis 接受准则以及冷却进度表等三方面详细探讨了模拟退火算法的基本理论,并给出了常规模拟退火算法的实现步骤。由于模拟退火法在应用中往往只能得到次优解而不是最优解,因此,将单纯形法和鲍尔方向法分别与模拟退火法有机的结合起来,使得两种方法能够起到取长补短的作用,最终能够改善模拟退火算法的整体优化性能。

3、对于遗传算法:简要介绍了遗传算法的发展概况,从模式定理、隐含并行性、积木块假设三个方面介绍遗传算法的理论基础;然后从选择、交叉和变异三个步骤介绍了遗传算法的基本思想,并给出了遗传算法的实现技术和改进措施。最后将模拟退火法和鲍尔方向法与遗传算法有机的结合起来,给出了基于遗传算法的混合反演方法,提高了遗传算法的全局和局部搜索性能。

4、最后,将四种混合反演方法应用到直流激电测深反演当中。对于不具有等值性的激电测深曲线,反演效果很好,模型参数的相对误差基本控制在 1%以内;对于等值性较严重的激电测深曲线,全局混合反演方法也是不能完全克服的,但可以通过改变模型参数空间和算法参数进行多次反演,最终可给出合理的解估计。

5、对于全局混合反演方法,它需要上万次目标函数的计算,才能得到全局最优解,可见计算量是相当可观的。所以它较适用于正演耗费时间少、目标函数不可微的优化问题。对于耗费时间较多的直流激电二维、三维反问题,如果在 PC 机上进行计算,从实际应用的角度讲,它是不适用的。

第六章 结论与建议

为增强直流激电数据反演的稳定性和健全性,有效压制随机干扰,减少反演的多解性,提高反演的分辨率,以及加快反演的运算速度等问题。本文从线性和非线性反演方法出发,对直流激电数据反演所涉及的一些问题进行了系统研究,取得了一些具有理论和应用意义的成果。主要体现在以下几个方面:

1、从正则化参数的选择、稳定化泛函的构造、引入某种先验约束及修正迭代步长等几个方面系统研究了最小二乘广义线性反演的正则化技术。通过在反演中引入正则化技术,可有效抑制反演过程的不稳定性,最终能够达到提高反演分辨率的目的。在正则化参数的选择方面,除总结和改进国内外一些先进的方法外,还提出了一种基于偏导数矩阵自适应计算正则化因子的方法,并与共轭梯度法结合,形成了变阻尼共轭梯度算法。将其应用到直流激电二维三维反演中,与常规固定阻尼共轭梯度法相比,反演收敛速度快,分辨率高;在稳定化泛函的构造方面,给出了一阶和二阶 Tikhonov 稳定化算子,将其作用于模型参数或模型参数修正量,可有效改善反演的稳定性;在施加约束方面,如果事先了解工区局部区域待反演的物性参数值、整个工区物性参数的背景值及上下界限值,都可将其作为反演的约束,提高反演的分辨率和稳定性;在修正迭代步长方面,由于在反演迭代过程中,存在修正过量的问题,进而通过增加一次或两次正演的计算量,采用一维搜索或插值的方式给出较优的修正步长,可增强反演过程的稳定性。

2、在实际勘探过程中,由于受非高斯噪音的影响,使采集的数据含有突变噪音。鉴于此,为增强反演过程的健全性,提出了混合范数下的最优化反演方法,即根据观测数据品质的优劣,对数据空间和模型空间分别采用不同的范数进行测度,达到压制干扰突出有用异常的目的。由于混合范数的引入,增加了线性反演方程的复杂性,对其求解比较困难。因此,通过对加权矩阵进行规范化,并采用混合范数下迭代再加权阻尼共轭梯度算法进行求解,使得问题得到解决。最后,通过对含有和不含有猝发噪音的模拟电阻率数据进行反演对比,验证了该方法具有较强的抗猝发噪音的能力,反演过程稳定,反演结果令人满意。同样,混合范数下的最优化反演方法也可以应用到其它地球物理数据反演当中。

3、在电阻率反演当中,偏导数矩阵的计算要耗费较多的机时。因此,采用互换原理与 Broyden 拟牛顿技术相结合的计算方式,即在前两次或三次迭代,采用互换原理计算偏导数矩阵,在后续迭代中,应用 Broyden 更新技术,在不损失反演分辨率的情况下,可极大的提高反演的运算速度。

4、在垂直激电测深(VES)二维反演中,网格剖分采用的双网格系统(细网格用于正演,粗网格用于反演),可有效减少反演的运算时间。在水平地形条件下,

对正演模拟的误差（主要由边界和场源引起）进行了校正，可有效的提高正演模拟的精度；在进行反演之前，应用电测深曲线的直接反演方法给定非均匀初始模型，可有效改善反演的分辨率。

5、在电阻率最小二乘间歇反演中，通过引入时间和空间稳定化泛函，将前期所有观测数据的反演结果作为后期反演数据的约束，进而可将不同时刻的观测数据联系起来，使得所有信息得到充分利用，可极大的提高反演的分辨率和减少反演的多解性；

6、对于复杂条件下的三维直流激电数据反演：针对起伏地形情况，给出了按方位局部多重二次曲面插值法，可有效对起伏地表大量网格节点的高程进行插值；在正演过程中，为更好的适应地形，将三维地质体分割成若干个四面体单元，并且节点间电导率线性连续变化；由于刚度矩阵元素的存储要占用大量的内存空间，所以采用了一维压缩存储方式，仅存储下三角阵中的非零元素，并采用超松弛迭代预优共轭梯度法(SSORCG)对其构成的线性方程进行求解；考虑到正、反演的计算精度和效率问题，在相邻电极间隔间至少要剖分两个单元。并且当电极较多时，验证了采用SSORCG法求解方程的耗费时间要比应用乔里斯基法 LDL^T 的耗费时间多。最后，对起伏地形条件下的三维高密度激电数据、三维井间激电数据以及充电法电位数据进行了反演，反演效果较好。

7、考虑到大多地球物理反问题都具有多参数、非线性的特点，对具有全局搜索能力的两种完全非线性方法——模拟退火法和遗传算法进行了研究。考虑到单独的模拟退火算法或遗传算法，在应用中往往只能得到次优解而不是最优解。因此，将模拟退火法与单纯形法和鲍尔方向法、遗传算法与模拟退火法和鲍尔方向法分别有机的结合起来，形成混合反演方法，使得相互混合的两种方法能够起到取长补短的作用，最终改善算法的全局寻优性能。

8、将四种混合反演方法(SMSA、PSA、SAGA、PGA)应用到直流激电测深反演当中。对于不具有等值性的激电测深曲线，反演效果很好，模型参数的相对误差基本控制在1%以内；对于等值性较严重的激电测深曲线，全局混合反演方法也是不能完全克服的，但可以通过改变模型参数空间和算法参数进行多次反演，最终可给出合理的解估计。

9、对于全局混合反演方法，它需要上万次目标函数的计算，才能得到全局最优解，可见计算量是相当可观的。所以它较适用于正演耗费时间少、目标函数不可微的优化问题。对于耗费时间较多的直流激电二维、三维反问题，如果在PC机上进行计算，从实际应用的角度讲，它是不适用的。

本文在取得上述成果的同时,仍存在许多不足及尚未完成的工作,主要有以下三个方面:

1、对于三维电阻率正演的精度问题,由于受场源项的影响,在场源附近,误差较大。如果增加相邻电极间的网格剖分数,将使正演的计算量迅速增加,得不偿失。当地形水平时,采用异常电位的有限单元法进行正演模拟,可消除场源项的影响;当地形起伏时,正常场的电位无法解析计算,但如果通过某种数值方法能较准确的计算起伏地形下正常场的电位,则也可采用异常电位的有限单元法进行正演模拟来消除场源项的影响。所以,进一步的工作就是寻求某种数值方法计算正常场的电位,然后采用起伏地形条件下异常电位有限单元法进行正演模拟,消除或压制场源项的影响,以提高三维电阻率正演模拟的精度。

2、在全局混合反演方法方面,当目标函数可微时,将全局优化方法与拟牛顿法、最小二乘法进行混合也是一项比较有意义的研究工作。

3、编制一套高效的、操作方便的 Windows 图形界面下三维直流激电数据反演软件。

参考文献

- [1] 杨文采.地球物理反演的理论与方法[M].地质出版社, 1996.
- [2] Backus,G.E.,and Gilbert,J.F.,1967,Numerical application of a formulism for geophysical problem[J], Geophys.J.R.astr.Soc.,13,247-276.
- [3] Backus,G.E.,and Gilbert,J.F.,1968,T he resolving power of gross earth data[J]. Geophys.J.R. astr.Soc.,16,169-205.
- [4] Backus,G.E.,and Gilbert,J.F.,1968,T he resolving power of gross earth data[J]. Geophys.J.R. astr.Soc.,16,169-205.
- [5] Wiggins,R.A.,1972, The generalized linear inverse problem: Implication of surfacewaves and free oscillations for earth structure[J]. Rev.Geophys. Space Phys.,10,251-285.
- [6] Jackson,D.D.,1972, Interpretation of inaccurate, insufficient, and inconsistent data[J]. Geophys.J.R.astr.Soc.,28, 97-109.
- [7] Parkcr, R.L.,1976, understanding inverse theory[J]. Ann. Rev. Earth Planet, Sci.,5,35-64.
- [8] 艾伯特.塔兰托拉.反演理论—数据拟合和模型参数估计.刘福田译.学术出版社,1989.
- [9] 王家映.地球物理反演理论[M].中国地质大学出版社, 1998.
- [10] 付良魁等.应用地球物理教程—电法 放射性 地热.地质出版社, 1991.4.
- [11] Coggon, J. H., Electromagnetic and electrical modeling by the finite element method. Geophysics,1971,36(2),132-151.
- [12] Rijo L., Modeling of electric and electromagnetic data. Ph.D. dessertation, 1977,Univ. of Utah.
- [13] Jeffrey J, Daniels.Three-dimensional reesistivity and induced-polarization modeling using buried electrodes. Geophysics,1977,42(5),1006-1019.
- [14] Dey,A., Morrison,H.F., Resistivity modeling for arbitrarily shaped three-dimensional structures. Geophysics,1979,44,p753.
- [15] 周熙襄,钟本善.有限单元法在直流电法勘探正问题中的应用.物化探电子计算技术,1980.2.
- [16] 周熙襄.电法勘探正演数值模拟的若干结果.地球物理学报,VOL.26, NO.5,1983.9.
- [17] Pelton, W. H., Rijo, L., and Swift, Jr., C.M., Inversion of two-dimensional resistivity and induced-polarization data. Geophysics,1978,43,788-803;
- [18] Petrick, W.R.,Jr.,Sill,W.R.,and Ward,S.H., Three dimensional resistivity inversion

- using alpha centers, *Geophysics*, 1981, 46, 1148-1163.
- [19] Sasaki, Y. Automatic interpretation of induced polarization data over two-dimensional structures. *Memoirs of the Faculty of Engineering, Kyushu University*, 1982, 42: 59-74.
- [20] Tripp A C, Hohmann G W, Swift C M Jr. Two dimensional resistivity inversion. *Geophysics*, 1984, 49: 1708-1717.
- [21] Smith N.C., Vozoff K. Two-dimensional DC resistivity inversion for dipole-dipole data. *Trans Geosci Remote Sensing*, 1984, 22: 21-28.
- [22] Shima, H. and Sakayama, T.. Resistivity tomography: An approach to 2-D resistivity inverse problems, 57th SEG, Expanded Abstracts, 204-2D7. 1987.
- [23] Shima, H. and Saito, H.. Application of resistivity tomography for detection of faults and evaluation of their hydraulic continuity: some numerical experiments, 58th. SEC, Anaheim, Expanded Abstracts, 204-207, 1988.
- [24] Shima, H.. Effects on reconstructed images of surrounding resistivity structures in resistivity tomography. 59th. SEG, Dallas, Expanded Abstracts, 385-389, 1989.
- [25] Shima, H.. Two dimensional automatic resistivity inversion technique using alpha centers, *Geophysics*, 1990, 55: 682-694.
- [26] Shima, H., 2-D and 3-D resistivity image reconstruction using crosshole data. *Geophysics*, 1992, 57, 1270-1281;
- [27] Park, S.K., and Van, G.P., Inversions of pole-pole data for 3-D resistivity structure beneath arrays of electrodes, *Geophysics*, 1991, 56, 951-960.
- [28] Li, Y., Oldenburger, D.W., Approximate inverse mappings in DC resistivity problem. *Geophysical Journal International*, 1992, 109, 343-362.
- [29] Li, Y., Oldenburg, D.W., Inversion of 3-D DC resistivity data using an approximate inverse mapping. *Geophysical Journal International*, 1994, 116, 527-537.
- [30] 庄浩, 三维电阻率层析成像研究, 博士学位论文, 中南工业大学, 1998.
- [31] Sasaki Y. 3-D resistivity inversion using the finite-element method. *Geophysics*, 1994, 59: 1839-1848.
- [32] Zhang, J., Mackie, R.L., Madden, T.R., 3-D resistivity forward modeling and inversion using conjugate gradients. *Geophysics*, 1995, 60, 1313-1325.
- [33] 吴小平, 徐果明, 李时灿. 利用不完全 Cholesky 共扼梯度法求解点源三维地电场. *地地球物理学报*, 1998, 41(6): 848-854.
- [34] 吴小平, 徐果明, 李时灿. 解大型稀疏方程组的 ICCG 方法及其计算机实现. *煤田*

- 地质与勘探,1999,27(6):54-56.
- [35] 吴小平,徐果明.利用共扼梯度法的电阻率三维反演研究.地球物理学报,2000,43(3):420-427.
- [36] 吴小平,汪彤彤.利用共扼梯度方法的电阻率三维反演若干问题研究.地震地质,2001,23(2):321-327.
- [37] 吴小平,汪彤彤.利用共扼梯度方法的电阻率三维有限元正演.地球物理学报,2003,46(3):428-432.
- [38] Oldenburg, D.W., Li,Y., Inversion of induced polarization data. Geophysics, 1994,59:1327-1341.
- [39] Li,Y., Oldenburg D.W..3-D inversion of induced polarization data. Geophysics, 1999,65:1931-1945.
- [40] 毛先进.边界积分方程和以其为基础的电阻率层析成像.博士学位论文,中南工业大学,1997.
- [41] 毛先进,鲍光淑.一种适于电阻率成像的正演新方法.地球物理学报, 1998,41:385-393, 增刊.
- [42] 毛先进,鲍光淑.2.5 维电阻率成像的新方法.物探与化探,1999,23:150-152.
- [43] 底青云,王妙月,电流线追踪电位电阻率层析成像方法初探,地球物理学进展,1997,12:27-35.
- [44] 底青云,1998.电阻率层析成像方法研究.博士学位论文.中国科学院地球物理所。
- [45] 底青云,王妙月.积分法三维电阻率成像.地球物理学报,2001,44:843-851.
- [46] 阮百尧,徐世浙.电导率分块线性变化二维地电断面电阻率测深有限元数值模拟.地球科学,1998,23:303-307.
- [47] 阮百尧,村上裕,徐世浙.激发极化数据的最小二乘二维反演方法,地球科学,1999,24:619-624.
- [48] 阮百尧,村上裕,徐世浙.电阻率/激发极化法数据的二维反演程序.物探化探计算技术,1999,21:116-125.
- [49] 阮百尧.三角单元剖分电导率分块连续变化点源二维电场有限元数值模拟.广西科学,2001,8:1-3.
- [50] 熊彬,阮百尧.电位双二次变化二维地电断面电阻率测深有限元数值模拟.地球物理学报,2002,45:285-294.
- [51] 阮百尧,熊彬.电导率连续变化的三维电阻率测深有限元模拟.地球物理学报,2002,45:131-137.
- [52] Rothman D. H. . Automatic estimation of large residual static correction,

- Geophysics, 1986, 51:323-346.
- [53] Stoffa P. L. and Sen M. K. . Nonlinear multi-parameter optimization using genetic: inversion of plane wave seismograms. *Geophysics*, 1991, 56:1794-1810.
- [54] 侯安宁,何樵登.地震弹性波参数的非线性数值反演.石油地球物理勘探,1994, 29:469—473.
- [55] 陶春辉,何樵登,王晓春.用遗传算法反演层状弹性介质.石油地球物理勘探,1994, 29:382—386.
- [56] 王兴泰,李晓芹,孙仁国.电测深曲线的遗传算法反演.地球物理学报,1996,39:280-284.
- [57] Raghu K.Chunduru, Mrinal K.Sen, and Paul L.Stoffa.2D resistivity inversion using spline parameterization and simulated annealing. *Geophysics*, 1996, 61:151-161.
- [58] 卢元林,王兴泰,王若等.电阻率成像反演中的模拟退火方法.地球物理学报, 1999,42 (增刊):225-233.
- [59] Carlos Calderron-macias, Mrinal K.Sen and Paul L.Stoffa., Artificial neural networks for parameter estimation in Geophysics, *Geophysical Prospecting*; 2000, 48:21-47.
- [60] Gad EI-Qady and Keisuke Ushijima. Inversion of DC resistivity data using neural networks. *Geophysical Prospecting*, 2001,49:417-430.
- [61] 吉洪诺夫,阿尔先宁.不适定问题的解法.王秉枕译,北京:地质出版社,1979.
- [62] Hansen P.C., "Regularization Tools: A Matlab Package for Analysis and solution of Discrete Ill-posed Problems", *Numerical Algorithms*, 6 (1994). pp.1-35.
- [63] 陈小斌,赵国泽,汤吉等.大地电磁自适应正则化反演算法.地球物理学报,2005, 48:937-946.
- [64] G.E.Forsythe, M.A.Malcolm, C.B.Moler 著.计九三译,计算机数值计算方法.清华大学出版社,1987.
- [65] 杨文采.用于位场数据处理的广义反演技术,地球物理学报,1988 (29): 283—291.
- [66] 夏江海.奇异值分解在位场资料处理中的应用,物探化探计算技术,1989 (11): 93—98.
- [67] 何昌礼.解病态线性方程组的奇异值分解法及其应用.中国地质大学出版社,1990.
- [68] Golub,G.H. and van Loan,C.F.. *Matrix Computations*. The Johns Hopkins University Press,1996.

- [69] Golub Gene H., Michael Heath and Grace Wahba. Generalized cross-validation as a method for choosing a good ridge parameter, *Technometrics*, Vol.21, No.2, May 1979, pp215-222.
- [70] Golub Gend H. and Urs Von Matt. Generalized cross-validation for large scale problems, Technical report, TR-96-28, Swiss Center for Scientific Computing, sep.1996.
- [71] Hansen P.C., The use of the L-curve in the regularization of discrete ill-posed problems, *SIAM J.Sci.Comput.* Vol.14, 1993, pp.1487-1503.
- [72] 袁亚湘等, 最优化理论与方法, 科学出版社, 1997.1.
- [73] 周竹生, 赵荷晴. 广义共轭梯度算法. *物探与化探*, 1996, 20(5): 351-357.
- [74] 李祺. *物探数值方法导论*. 地质出版社, 1991.
- [75] Constable, S. C., Parker, R.L., and Constable, C.G, Occam's inversion: A practical algorithm for generating smooth models from electromagnetic sounding data. *Geophysics*, 1987, 52, 289-300.
- [76] Li, Y., Oldenburg D.W.. Fast inversion of large-scale magnetic data using wavelet transforms and a logarithmic barrier method. *Geophys. J. Int.*, 2003, 152: 251 – 265.
- [77] Oldenburg, O. W. . The inversion and interpretation of gravity anomalies. *Geophysics*, 1974, 39: 526-536.
- [78] Inman, J. R. . Resistivity inversion with ridge regression. *Geophysics*, 1975, 40: 798-817.
- [79] Oristaglio, M. L., Worthington M H. Inversion of surface and borehole electromagnetic data for two dimensional electrical conductivity models. *Geophysical prospecting*. 1980, 26: 633-657.
- [80] Gjoystdal, H., Ursin, B. Inversion of reflection times in three dimensions. *Geophysics*, 1981, 46: 972-983.
- [81] Sharma, S.P, and Kaikonen, P., Two-dimensional non-linear inversion of VLF-R data using simulated annealing. *Geophysical Journal International*, 1998, 133: 649-668.
- [82] 王兴泰, 李晓芹, 孙仁国. 电测深曲线的遗传算法反演. *地球物理学报*, 1996, 39(2): 280-284.
- [83] Zhang, Z., and Zhou, Z. . Real-time quasi 2-D inversion of array resistivity logging data using neural networks. *Geophysics*, 2002, 67: 517-524.
- [84] De Groot-Hedin C, Constable S. C.. Occam's inversion to generate smooth, two-

- dimensional models from magnetotelluric data. *Geophysics*, 1990, 55 (12): 1613~1624.
- [85] Ellis R G, Oldenburg D W. Applied geophysical inversion. *Geophysical Journal International*, 1994, 116:5-11.
- [86] Scales, J. A., Gersztenkorn, A., Treitel, S., and Lines, L. R., 1988, Robust optimization methods in geophysical inverse theory: 58th Ann. Internat. Mtg, Session: S7.1.
- [87] Darche, G., 1989, Iterative L1 deconvolution: Stanford Exploration Project Report, 61:281-302.
- [88] Nichols, D., 1994, Velocity-stack inversion using Lp norms: Stanford Exploration Project Report, 82:1-16.
- [89] 王兴泰等, 电阻率图象重建的佐迪(Zohdy)反演及应用效果, 物探与化探, VOL.20, NO.3, 1996.6.
- [90] 王若等, 改进的佐迪反演方法及在考古中的应用研究, 工程地质学报, VOL.7, NO.3, 1999.9.
- [91] 阮百尧等, 电阻率影像法及在水文和工程地质中的应用, 工程勘察, 2000年第1期。
- [92] 何玉贵等, 高密度电阻率法二维反演在工程勘探中的应用, 物探与化探, VOL.26, NO.2, 2002.4.
- [93] 邓居智等, 高密度电阻率法在探测水坝隐患中的应用, 华东地质学院学报, VOL.24, NO.4, 2001.12.
- [94] 单娜琳, 阮百尧, 程志平. 二维有限元反演法在金属矿电法勘探中的应用. 桂林工学院学报, Vol.20 Sup.2000.5, P.14-21.
- [95] Seigel, H.O., Mathematical formulation and type curves for induced polarization. *Geophysics*, 1959, 24, 547-565.
- [96] Oldenburg, D.W., Li, Y., Inversion of induced polarization data. *Geophysics*, 1994, 59, 1327-1341.
- [97] 姚文斌. 电测深数值计算和解释入门. 北京: 地质出版社, 1989, P.129-141.
- [98] 阮百尧. 视电阻率对模型电阻率的雅克比矩阵计算方法, 地质与勘探, VOL.37, NO.6, 2001.11.
- [99] 罗延钟等. 电子计算机在电法勘探中的应用. 武汉地质学院出版社, 1987.8.
- [100] 阮百尧, 徐世浙. 二维直流电阻率测深曲线的快速反演. 物探与化探, VOL.20, NO.6, 1996.10.
- [101] Torres-Verdin, C. Druskin, V. Fang. A dual-grid nonlinear inversion technique with

- applications to the interpretation of dc resistivity data. *Geophysics* 65, 2000,1733-1745.
- [102] 阮百尧. 直流电阻率测深曲线解释中的直接反演法. *物探化探计算技术*, 1999, 21:118-123.
- [103] 李庆扬, 王能超, 易大义. 数值分析. 武汉: 华中理工大学出版社, 1999年.
- [104] 张宏. K剖面法应用初探. *长沙交通学院学报*, 1996年6月, 第12卷, 第2期: 33—37.
- [105] 敬容中, 林剑, 肖志强. K剖面法在岩溶勘查中的应用, *地质与勘探*, 2002年3月, 第38卷, 第2期: 78-81.
- [106] Loke, M. H., 1999, Time-Lapse resistivity imaging inversion, Proceeding of the 5th meeting of environmental and engineering European, Em1, Budapest, Hungary.
- [107] 黄俊革. 三维电阻率/极化率有限元正演模拟与反演成像(D). 博士学位论文, 中南大学, 2003.
- [108] 吴小平. 非平坦地形条件下电阻率三维反演. *地球物理学报*, 2005, 48:932-936.
- [109] 芮小平, 余志伟, 许友志等. 多重二次曲面插值法在地质曲面拟合中的应用, *中国矿业大学学报*, 2000, 29(6):377-380.
- [110] 熊彬, 阮百尧, 罗延钟. 复杂地形条件下直流电阻率异常三维数值模拟研究, *地质与勘探*, 2003, 30(4):60—64.
- [111] 徐世浙. 地球物理中的有限单元法. 北京: 科学出版社, 1994, 178—182.
- [112] 胡家赣. 线性代数方程组的迭代解法. 北京: 科学出版社, 1999, 173—201.
- [113] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling. *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*, 2nd Edition. CAMBRIDGE UNIVERSITY PRESS, 1992, 78-83.
- [114] 寇绳武, 李克祥, 郭舜等. 高密度电阻率法探测洞穴、采空区的效果分析. *工程勘察*, 1994, 6:61~65.
- [115] 孟琪, 丑景俊. 高密度电阻率法探测岩溶的应用研究. *东北地震研究*, 1996, 12(3):58~63.
- [116] 王士鹏. 高密度电法在水文地质和工程地质中的应用. *水文地质工程地质*, 2000, 1:52~56.
- [117] 汤洪志, 宫云鹏. 高密度电阻率法在地下涵洞勘测中的应用. *华东地质学院学报*, 1997, 20(4):343~348.

- [118] 重庆奔腾技术研究所.WGMD-6 分布式三维高密度电阻率成像系统仪器说明书。 [Http://www.cqbtsk.com.cn](http://www.cqbtsk.com.cn).
- [119] W.Daily, E.Owen. Cros-borehole resistivity tomography. *Geophysics*. 1991. 56:1228-1235.
- [120] Zhou Bing, S.A. Greenhalgh. Cross-hole resistivity tomography using different electrode configurations. *Geophysical prospecting*. 2000, 48: 887-912.
- [121] Aria Abubakar, Peter M. van den Berg. Non-linear three-dimensional inversion of cross-well electrical measurements. *Geophysical Prospecting*. 2000, 48: 109-134.
- [122] 何裕盛, 夏万芳. 充电法, 北京: 地质出版社, 1978.
- [123] H. H. Szu, R. L. Hartley, Fast simulated annealing, *Physics Letters*. 1987, 122:157-162.
- [124] J. W. Green, K. J. Supowit, Simulated annealing without rejected moves, *IEEE Trans. On Computer-Aided Design*, 1986, 5:221-228.
- [125] D. S. Johnson, C. R. Aragon, L. A. Mcgeoch etc. Optimizaton by simulated annealing: An experimental evaluaton, Part I, AT&T Bell Laboratories, Murray Hill (NJ), 1987.
- [126] C. Sechen, VLSI placement and global routing using simulated annealing, Kluwer Academic, 1988.
- [127] P. J. M. Van Laarhoven, E. H. L. Aarts, *Simulated annealing: Theory and applications*, 1987.
- [128] 姚姚. 地球物理非线性反演模拟退火法的改进, *地球物理学报*, 1995, 38:643-650.
- [129] 刘鹏程, 纪晨, Stephen H. Hartzell. 改进的模拟退火——单纯形综合反演方法, *地球物理学报*, 1995, 38:199~346.
- [130] 康立山, 谢云, 尤矢勇等. 非数值并行算法——模拟退火算法, 科学出版社, 1994.
- [131] 何军. 解优化问题的退火回火算法, *武汉大学学报, 并行计算专刊*, 1991, 71-83.
- [132] Kirkpatrick S, Gelatt C P and Vecchi M P. Optimization by simulated annealing, *Science*, 1983, 220:671~68.
- [133] Brian T. Luke. Simulated Annealing Cooling Schedules, <http://members.aol.com/btluke/simanfl.htm>.
- [134] 张霖斌, 姚振兴, 纪晨等. 快速模拟退火算法及应用, 石油地球物理勘

- 探, 1997, 22:654~660.
- [135] Ingber L. Very fast simulated rcannealing. *Math Comput Modeling*, 1989, 12:967~973.
- [136] 王元, 方开泰. 关于均匀分布与试验设计(数论方法), *科学通报*, 26(2):65~70, 1981.
- [137] Powell, M. J. D. An Efficient Method for Finding Minimum of Function of Several Variables Without Calculating Derivatives, *Comput.* 1964, 7:155~162.
- [138] R. W. H. Sargent. Minimization without constraints. In M. Avriel, M. J. Rijckaert, and D. J. Wilde, editors, *Optimization and Design*, pages 37-75. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1973.
- [139] 吴方. 关于 Powell 方法的一个注. *数学学报*, 1977, 20: 14-15.
- [140] 邓乃扬, 诸梅芳. 关于 Powell 方法理论基础的探讨. *科学通报*. 1979:24: 433-437.
- [141] 席少霖, 赵凤治. 最优化计算方法, 上海科学技术出版社, 1983, 183~189.
- [142] Holland J.H, *Adaptation in nature and artificial systems*. The University of Michigan Press, 1975.
- [143] De Jong K.A. An analysis of the behavior of a class of genetic adaptive system .Ph.D Dissertation, University of Michigan, 1975.
- [144] Goldberg D. E. *Genetic algorithms in search, optimization and machine learning*. Reading, MA: Addison-Wesley Publishing Company, 1989.
- [145] Vose M. D. Generalizing the notion of schema in gentic algorithms. *Artificial intelligence*, 1991, 50:385-396.
- [146] 张晓姬, 方浩, 戴冠中. 遗传算法的编码机制研究, *信息与控制*, 1997, 26 (2) :134~139.
- [147] 孙建永, 申建中, 徐宗本. 一类自适应遗传算法, *西安交通大学学报*, 2000, 34 (10): 84~88.
- [148] 戴晓辉, 李敏强, 寇纪淞. 遗传算法理论研究综述, *控制与决策*, 2000, 15 (3) :263~268.
- [149] Grefenstette J. J. Optimization of control parameters for genetic algorithms[J]. *IEEE Transaction on Systems, Man, and Cybernetics*, 1986, 16(1): 122~128.
- [150] Davis L. *Handbook of genetic algorithms*. New York: Van Nostrand

- Reinhold, 1991.
- [151] Srinivas M, Patnaik L M. Adaptive probabilities of crossover and mutation in genetic algorithms. *IEEE Transaction on Systems, Man, and Cybernetics*, 1994, 24(4): 656~667.
- [152] 宋爱国, 陆信人. 一种基于排序操作的进化算子自适应遗传算法, *电子学报*, 1999, 27 (1) :85~88.
- [153] 袁慧梅. 具有自适应交换率和变异率的遗传算法, *首都师范大学学报*, 2000, 21 (3) :14~20.
- [154] Muhlenbein H. Evolution in time and space-The parallel genetic algorithm. In: Rawlins G. *Foundations of genetic algorithms*. CA: Morgan Kaufmann, 1991. 316~337.
- [155] 张讲社, 徐宗本, 梁怡. 整体退火遗传算法及其收敛充要条件, *中国科学 (E 辑)*, 1997, 27 (2) :154~164.
- [156] 王凌, 郑大钟. 一类 GASA 混合策略及收敛性研究, *控制与决策*, 1998, 13 (6) :669~672.
- [157] 陈国良, 王煦法, 庄镇泉等. *遗传算法及其应用*, 人民邮电出版社, 1996.
- [158] 徐果明. *反演理论及其应用*, 地震出版社, 2003.
- [159] Bagley J D. *The Behavior of Adaptive Systems Which Empoly Genetic and Correlation Algorithms*. *Dissertation Abstracts International*, 1967, 28 (12).
- [160] Rosenberg R S. *Simulation of Genetic Populations with Biochemical Properties*. *Dissertation Abstracts International*, 1967, 28 (7).
- [161] 姚姚. *蒙特卡洛非线性反演方法及应用*, 冶金工业出版社, 1997.
- [162] 王小平, 曹立明. *遗传算法——理论、应用与软件实现*, 西安交通大学出版社, 2002.
- [163] Kreinovich V, Quintana C, Fuentes O. Genetic algorithms-what fitness scaling is optimal. *Cybern. and Systems*, 1993, 24(1):9-26.
- [164] 周明, 孙树栋. *遗传算法原理及应用*. 北京:国防工业出版社, 1999.
- [165] Srinivas M., Patnaik L. M.. Adaptive probabilities of crossover and mutation in genetic algorithms. *IEEE Trans Syst Man and Cyber*, 1994, 24(4) :656~667.
- [166] 雷德明. 自调整遗传算法. *系统工程与电子技术*, 1999, 21(11) :70-71.
- [167] 张雪江, 朱向阳, 钟秉林. 自适应基于遗传算法及其在知识获取中的应用. *系统工程与电子技术*, 1997, 19(7) :67~72.

- [168] 刘勇, 康立山, 陈毓屏. 非数值并行算法——遗传算法, 科学出版社, 1995.
- [169] Sirag, D J., Weisser D J.. Toward unified thermodynamic genetic operator, In: Proc int Confon Genetic Algorithm and their Applications, Erbum Association, Hillsdale, Nj. 1987.
- [170] Boseniuk T, Ebeling W. Boltzmann- Darwin- and Heackel- strategies in optimization problems, Parallel Problem Solving from Nature, New York, 1990.
- [171] 王雪梅, 王义和. 模拟退火算法与遗传算法的结合, 计算机学报, 1997, 20(4):381-384.
- [172] 蓝海, 王雄, 王凌. 一类遗传退火算法的函数优化性能分析, 2001, 系统仿真学报, 2001, 13(S):111-113.
- [173] 谢巍, 方康铃. 一种求解不可微非线性函数的全局解的混合遗传算法, 控制理论与应用, 2000, 17(2):44-48.
- [174] 阮百尧. 激发极化法测深曲线解释中的快速反演法, 高校地质学报, 1997, 3(3):301~307.

攻读博士学位期间发表的学术论文

1. 柳建新, 刘海飞. 倾角扫描多剖面互相关分析及应用效果[J], 地球物理学进展, 2004, 19(1): 161~165.
2. 柳建新, 刘海飞. 计算最优化离散波数的优化算法[J], 物探化探计算技术, 2005, 27(1): 34~38.
3. 柳建新, 刘海飞. 直流激电测深多参数综合分析划分含水异常岩体[J], 煤田地质与勘探, 2005, 33(3): 74~77.
4. 刘海飞, 阮百尧, 柳建新. 激电测深数据一维自动迭代反演进行拟二维反演解释[J], 工程地球物理学报, 2005, 2(5): 343~347.
5. 刘海飞, 阮百尧. 二维直流激电测深最小二乘反演, 第七界中国国际地球电磁学学术讨论会论文集, 2005. 11.
6. 徐志锋, 刘海飞. 频率域垂直磁偶源典型地形的响应模拟, 第七界中国国际地球电磁学学术讨论会论文集, 2005. 11.
7. 刘海飞, 张赛民, 阮百尧. 数据断面中突变点的快速剔除方法[J], 物探化探计算技术, 2006, 28(3): 201~204.
8. 李耐宾, 刘海飞. 二维直流电测深反演中雅克比矩阵的改进及应用[J], 桂林工学院学报, 2006(4): 473~475.
9. 刘海飞, 阮百尧. 地球物理监测数据的最小二乘反演, 第22界中国地球物理学会论文集, 2006. 10.
10. 刘海飞, 阮百尧. 直流激电测深二维反演中的若干问题研究[J], 物探与化探, 2007, 2007, 31(1): 47~50.
11. 刘海飞, 阮百尧. 直流电阻率数据最小二乘间歇反演[J], 物探化探计算技术, 2007, 29(4): 339~341.
12. 刘海飞, 阮百尧, 柳建新. 利用变阻尼共轭梯度法进行电阻率二维反演[J], 地球物理学进展, 2007, 已录用.
13. 刘海飞, 阮百尧, 吕玉增. 按方位取点局部多重二次曲面插值[J], 工程地球物理学报, 2007, 4(3): 186~189.
14. 刘海飞, 阮百尧, 柳建新, 吕玉增. 混合范数下的最优化反演方法[J], 地球物理学报, 已录用.
15. 刘海飞, 阮百尧. 电导率连续变化的三维点源场有限元数值模拟[J], 地质与勘探, 待刊.

致 谢

首先，衷心的感谢我的导师阮百尧教授，几年来，无论在学习上还是在生活上，都给了我无微不至的关怀和帮助。论文从选题到完成的每一个环节，无不饱含着导师的心血和汗水。他严谨的治学态度，勤奋认真、刻苦耐劳、忘我的工作精神，富有启发性的指导以及宽以待人的处世原则使我终生受益。在此，特向导师致以崇高的敬意和由衷的感谢。

感谢柳建新教授在学习和生活上给予的诸多关心、帮助和支持，为我论文的顺利完成起到了一定的作用。

感谢湖南省地质工程勘察院物探处吴述来高工在生活和学习上给予的关心和鼓励，审阅了全文并提出了许多宝贵建议。

感谢桂林工学院的吕玉增博士、徐志锋博士在生活上的关心和照顾，并经常在一起做些有益的探讨，使我从中得到不少启发。还要感谢师妹韦柳柳硕士、周丽硕士和朱光萍硕士给予的照顾。

还要感谢师兄弟和同窗好友张赛民博士、佟铁钢博士、付国红博士、罗维斌博士、刘春明博士、谢维博士、王恒中博士、郭容文博士等，在此难以一一列举。在生活和学习上，得到了他们的鼎力相助，在此向他们表示诚挚的谢意！

最后，感谢我的妻子廖建龙女士，我们的女儿在我攻读博士学位期间悄然降生，带孩子的艰辛是可想而知的，但她从无怨言，为我作出了巨大牺牲，正是她的爱、关心和理解使我顺利完成学业。感谢父母和岳父母对我的关心和支持，使我无后顾之忧，更加专心的投入工作。

再次对给予我关心和帮助的师长、同学和亲人表示衷心的感谢！