

稳定的同伦路径跟踪算法及其应用

张丽琴 王家映 严德天 徐健

(中国地质大学·武汉) (胜利油田临盘采油厂)

摘要

张丽琴,王家映,严德天,徐健.稳定的同伦路径跟踪算法及其应用.石油地球物理勘探,2004,39(5):515~518

地球物理反问题大部分是非线性问题,基于路径跟踪的同伦法是求解该类问题的有效方法。常规的同伦法有时会发生路径跳跃而不能有效地解决精确路径跟踪问题。本文提出了稳定求解非线性方程组的同伦路径跟踪算法,它利用同伦零点曲线的局部曲率来控制预测步长,用文献[19]中改进的牛顿迭代终止判据,进一步提高了同伦路径跟踪的稳定性和可靠性,实现了精确的路径跟踪,避免了跟踪过程中路径跳跃问题。数值计算实例说明,本文方法具有良好的稳定性和广泛的实用性,对初值的选取没有严格的限制,即使任意选取的初值远离目标函数的解,解仍能很好地收敛,因此它是一种大范围收敛的方法,适合于地球物理非线性反问题的求解。

关键词 同伦算法 路径跟踪 反问题

引言

众所周知,地球物理反演问题可分为线性反演和非线性反演。线性反演已经形成了完整、系统的理论,并获得了广泛应用;而对于非线性反演问题,其中一个重要的方法是将非线性问题线性化,并用求解线性问题的方法求解。但由于非线性反演问题的目标函数往往存在多个极值,因此用常规线性化方法求解容易陷入局部极值,其有效性严重依赖于初值的选取,初值选取不当常导致迭代过程不收敛。

同伦(homotopy)^[1]是代数拓扑学中的一个基本概念,在20世纪70年代开始用于数值法求解非线性反演问题,并且效果很好。基于同伦概念求解非线性问题(下称同伦法)的基本思想是:借助同伦函数,从辅助映射的零点集出发,跟踪同伦映射的零点曲线,并逐步过渡到目标映射的零点集。由此可以看出,同伦法克服了传统数值迭代法容易陷入局部收敛的弱点,且对初值的选取没有严格限制,因此它是一种大范围收敛的方法。Keller和Perozzi于1983年最先将同伦法用于地震射线跟踪问题^[2],随后Vasco将同伦法用于地震旅行时层析成像反问题^[3];在20世纪90年代,Vasco和Bube及Langan

又进一步发展了同伦法,并将其用于地震正则化反问题^[4,5];Everett将同伦法用于基于有限差分模型的大地电磁反问题^[6];Jegen等用同伦法求解基于正态方程的大地电磁反问题^[7]。在国内,韩波、刘家琦等在同伦法求解地球物理反问题方面进行了广泛的研究^[8~13];刘舒考等提出了将同伦法用于神经网络学习阶段的一种算法——同伦神经优化算法,并将其用于地震数据反演^[14,15]。

需要指出,常规的路径跟踪算法在跟踪同伦路径时,可能会导致“路径跳跃”^[16,17],即有可能从一条路径跳跃到另一条路径,从而出现漏失映射某些零点的问题。本文对路径跟踪中出现的一些问题进行了研究,提出了一种稳定的、基于欧拉预测—牛顿校正法的解非线性方程组的路径跟踪算法,并采用步长控制和迭代终止判据进行约束。文中用数值算例证明了方法的有效性。

同伦连续法^[18,19]

考虑非线性方程组

$$f(x) = 0 \quad (1)$$

其中 $f: D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ 是连续光滑的函数。定义同伦函数 $h(x, \lambda)$,使得

$$\begin{aligned} h(x, 0) &= g(x) \\ h(x, 1) &= f(x) \end{aligned}$$

上两式中: $\lambda \in R$ 为同伦参数; $g: E \subset R^n \rightarrow R_n$ 为连续光滑函数(辅助映射), 其解 $x^0 \in D \subset E$ 已知或很容易求得。现构造线性同伦函数如

$$h(x, \lambda) = \lambda f(x) + (1 - \lambda) g(x) = 0 \quad (2)$$

式中 $\lambda \in [0, 1]$ 。其中辅助映射 $g(x)$ 可任意选取, 文献[20]给出了两种广泛使用的选取方法, 即

$$g(x) = f(x) - f(x^0) \quad (\text{牛顿同伦})$$

$$g(x) = x - x^0 \quad (\text{定点同伦})$$

设同伦函数 $h(x, \lambda)$ 的零点集 $h^{-1}(0)$ 中的解曲线为

$$c(s) = [x(s), \lambda(s)]$$

式中 s 为曲线弧长, 并满足 $0 < s < s_0$ 。从 $(x^0, 0)$ 出发, 有

$$c(0) = [x(0), \lambda(0)] = (x^0, 0)$$

显然 (x, λ) 是弧长 s 的单值映射, 且

$$h[c(s)] = h[x(s), \lambda(s)] = 0 \quad (3)$$

对 s 求导, 代入式(2)有

$$\left\{ \lambda(s) \frac{\partial f}{\partial x}[x(s)] + [1 - \lambda(s)] \frac{\partial g}{\partial x}[x(s)] \right\} \dot{x}(s) + \\ + \{f[x(s)] - g[x(s)]\} \lambda(s) = 0 \quad (4)$$

同伦路径上某点 $[x(s), \lambda(s)]$ 处的切向矢量为

$$v(s) \equiv \left[\frac{\partial x}{\partial s}, \frac{\partial \lambda}{\partial s} \right]^T$$

并且满足

$$\left[\frac{\partial x}{\partial s} \right]^T \left[\frac{\partial x}{\partial s} \right] + \left(\frac{\partial \lambda}{\partial s} \right)^2 = 1 \quad (5)$$

在给定步长的情况下, 首先通过欧拉预测法(或其他预测方法)求解式(4)和式(5), 再用校正法(如牛顿校正)可将预测点校正到同伦路径上(在误差允许范围内)(图 1)。

步长控制

在路径跟踪算法中, 有效地实现精确路径跟踪的关键在于选取合适的步长。目前, 大多数步长控制方法中, 选取步长的原则是所选步长必须使校正

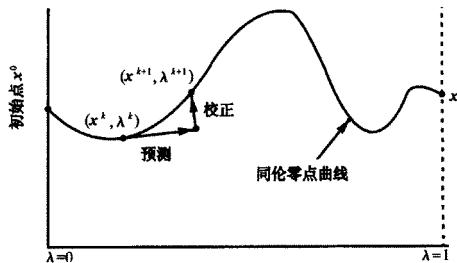


图 1 预测—校正算法路径跟踪示意图

迭代次数基本保持不变。基于这一原则的步长选取方法的缺点是当预测点距同伦零点曲线较远时, 在校正过程中很难进入收敛范围, 此时需要多次减小步长, 因此在能够加速之前已经耗费了大量机时。

步长的选取必须反映同伦零点曲线的局部曲率。如果同伦零点曲线局部曲率较小, 则可以选取相对较大的步长; 相反, 若同伦零点曲线局部曲率较大, 则应选取相对较小的步长。因此, 本文利用同伦零点曲线的局部曲率来控制步长的选取。

根据曲率的定义

$$K = \lim_{\Delta s \rightarrow 0} \left| \frac{\Delta \alpha}{\Delta s} \right| \quad (6)$$

式中: Δs 表示曲线上相邻两点间的弧长; $\Delta \alpha$ 为相邻两点处切向矢量所夹锐角。在路径跟踪时, 假定 (x^k, λ^k) 为同伦零点曲线上的当前点, (x^{k-1}, λ^{k-1}) 为 (x^k, λ^k) 的前一点, v^k 和 v^{k-1} 分别对应这两点的切向矢量, 则

$$\cos(\Delta \alpha) = \frac{(v^{k-1})^T, v^k)}{\|v^{k-1}\| \cdot \|v^k\|} \quad (7)$$

$$\Delta s \approx \| (x^k, \lambda^k) - (x^{k-1}, \lambda^{k-1}) \| \quad (8)$$

式中 $\|\cdot\|$ 表示欧几里德范数。从式(7)、式(8)可以看出, 在路径跟踪过程中, 可以很方便地计算出同伦零点曲线的局部曲率, 进而可根据该曲率值选取一个合适的步长用于下一次预测。

牛顿校正迭代终止判据

假定 (x^k, λ^k) 为牛顿校正迭代第 k 次后的点, ϵ 为给定精度。在常用的路径跟踪算法中, 一般采用

$$h(x^k, \lambda^k) < \epsilon \quad (9)$$

作为校正迭代收敛的判据。实际上, 这个判据有时并不很合适^[18], 因为尽管 $\|h(x^k, \lambda^k)\|$ 很小, 但 (x^k, λ^k) 很可能与真实零点相差较远, 从而导致判断失误。文献[16]给出了另一种数值收敛判据, 即

$$\|h(x^k, \lambda^k)\| < \epsilon \left\| \frac{\partial h}{\partial (x, \lambda)}(x^k, \lambda^k) \right\| \quad (10)$$

它能在一定程度上防止判断失误, 但在跟踪分叉同伦路径时, 该判据也会导致判断失误, 从而使得校正点不能很好地校正到同伦路径上。

本文采用文献[19]中给出的校正终止判据

$$\begin{aligned} \|h(x^k, \lambda^k)\| &< \epsilon_1 \times \max \left[\epsilon_2 \left| \det J(x^0, \lambda^0) \right|, \right. \\ &\quad \left. \left| \det J(x^k, \lambda^k) \right|^{1/n} \right] \end{aligned} \quad (11)$$

式中: ϵ_1, ϵ_2 为小的正数(开始校正时可令 $\epsilon_1 = 10^{-5}$,

当接近同伦零点时,可令 $\epsilon_1=10^{-7}$;一般 $\epsilon_2=10^{-7}$ 保持不变); $J=\left[\frac{\partial h}{\partial(x, \lambda)}, \frac{\partial(x, \lambda)}{\partial s}\right]^T$ 为雅可比矩阵(一阶导数矩阵),若给不出具体形式,可用差分来代替。如果满足式(11),则将最后一个校正点作为同伦零点曲线新的近似点,再将该点作为新的起点继续进行下一步预测一校正过程。重复该过程,直到求得目标函数的解。式(11)能克服式(9)和式(10)的不足。

模型试算

为检验本文方法的有效性,进行了数值试算。

算例 1

设某一映射($f: R^3 \rightarrow R^3$)为

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, x_3) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 1 \\ f_2(x_1, x_2, x_3) = 2x_1^2 + x_2^2 - 4x_3 \\ f_3(x_1, x_2, x_3) = 3x_1^2 - 4x_2 + x_3^2 \end{cases}$$

辅助映射采用定点同伦形式

$$\begin{cases} g_1(x) = x_1 - x_1^0 \\ g_2(x) = x_2 - x_2^0 \\ g_3(x) = x_3 - x_3^0 \end{cases}$$

则,构造的线性同伦函数为

$$\begin{cases} h_1(x_1, x_2, x_3, \lambda) = \lambda f_1(x_1, x_2, x_3) + (1-\lambda)(x_1 - x_1^0) \\ h_2(x_1, x_2, x_3, \lambda) = \lambda f_2(x_1, x_2, x_3) + (1-\lambda)(x_2 - x_2^0) \\ h_3(x_1, x_2, x_3, \lambda) = \lambda f_3(x_1, x_2, x_3) + (1-\lambda)(x_3 - x_3^0) \end{cases}$$

其中 $x^0 = (x_1^0, x_2^0, x_3^0)$ 为任意选取的初始值。对于不同的初值,其计算结果见表 1。

表 1 算例 1 的计算结果

初始近似值 x^0	$\ f(x^0)\ _2$	(x_1^*, x_2^*, x_3^*)	$\ f(x^*)\ _2$
(1.0, 1.0, 1.0)	2.236068	$(-7.851970 \times 10^{-1}, 4.966115 \times 10^{-1}, 3.699229 \times 10^{-1})$	2.679482×10^{-7}
(1.0, 2.0, 3.0)	14.866069	$(-7.851970 \times 10^{-1}, 4.966115 \times 10^{-1}, 3.699229 \times 10^{-1})$	2.399983×10^{-7}
(-0.5, 1.0, 2.0)	7.802243	$(-7.851970 \times 10^{-1}, 4.966114 \times 10^{-1}, 3.699228 \times 10^{-1})$	1.047455×10^{-7}
(-0.5, -0.5, 3.0)	18.354155	$(-7.851970 \times 10^{-1}, 4.966113 \times 10^{-1}, 3.699229 \times 10^{-1})$	3.865411×10^{-7}
(1.0, -0.5, 2.0)	11.494564	$(-7.851970 \times 10^{-1}, 4.966115 \times 10^{-1}, 3.699229 \times 10^{-1})$	3.067717×10^{-7}

注: $x^* = (x_1^*, x_2^*, x_3^*)$ 为目标映射 f 的根; $\|f(x^0)\|_2$, $\|f(x^*)\|_2$ 分别为目标函数在初值及解处函数值的 L_2 范数

算例 2

分别设计两层模型和三层模型,并对每个模型选取不同的初始参数应用文中方法进行层状介质地震反射波走时反演,反演结果如表 2、图 2 所示。

效果分析

从算例 1 和算例 2 可看出,本文提出的同伦路径跟踪算法对初值的选取没有严格限制,即使任意选取的初值远离目标函数的解,解仍速度能很好地

表 2 模型参数及反演结果

真实模型参数	初始模型参数	反演结果
两层模型 (200,2000)	(400,5000) (10,100)	(200.000000,1999.414062) (200.002143,1999.561235)
三层模型 (200,2000); (300,3000)	(150,1500); (350,3500) (300,2500); (400,4000)	(200.132799,1999.908896); (299.711593,3000.764713) (200.313355,2000.945768); (299.688659,3000.340221)

注:模型参数由厚度、速度所表示,如(400,5000),表示该层厚度为400m,速度为5000m/s

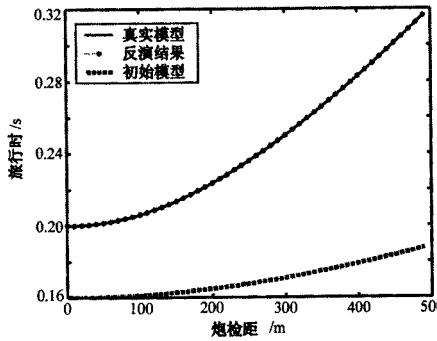


图 2a 两层模型旅行时反演结果

初始模型参数:厚度为 400m,速度为 5000m/s

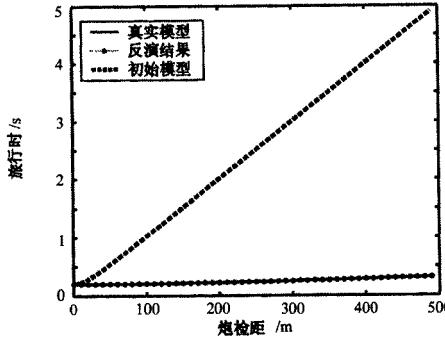


图 2b 两层模型旅行时反演结果

初始模型参数:厚度为 10m,速度为 100m/s

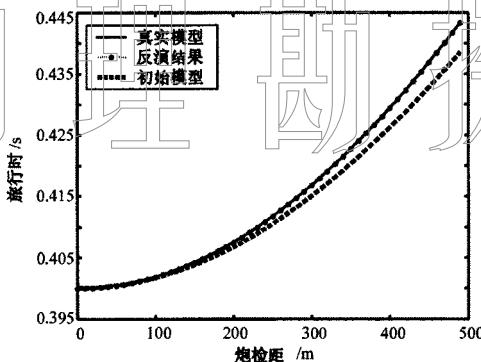


图 2c 三层模型旅行时反演结果

初始模型参数: 厚度为 150m, 速度为 1500m/s;
厚度为 350m, 速度为 3500m/s

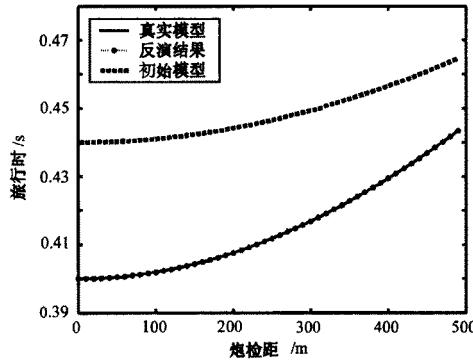


图 2d 三层模型旅行时反演结果

初始模型参数: 厚度为 300m, 速度为 2500m/s;
厚度为 400m, 为 4000m/s

收敛。这种大范围的收敛方法, 克服了传统迭代法直接求解、局部收敛的弱点, 且具较高的计算精度和可信度, 适用于求解非线性、多极值最优化问题和地球物理反问题, 具有很好的应用前景。

结 束 语

本文提出了稳定求解非线性方程组的同伦路径跟踪算法, 利用同伦零点曲线的局部曲率来控制预测步长, 用文献[19]中改进的牛顿迭代终止判据, 进一步提高了同伦路径跟踪的稳定性和可靠性, 实现了精确的路径跟踪, 避免了跟踪过程中“路径跳跃”的问题。数值计算实例说明, 该法具有良好的稳定性和广泛的实用性, 适合于地球物理非线性反问题求解。

参 考 文 献

- [2] Keller H B and Perozzi D J. Fast seismic ray tracing. *SIAM J Appl Math*, 1983, 43: 981~992
- [3] Vasco D W. Singularity and branching: A path-following formalism for geophysical inverse problems. *Geophys J Int*, 1994, 119: 809~830
- [4] Vasco D W. Regularization and trade-off associated with nonlinear geophysical inverse problems: penalty homotopies. *Inverse Problem*, 1998, 14: 1033~1052
- [5] Bube K P and Langan R T. On a continuation approach to regularization for crosswell tomography. *Expanded Abstracts of 60th SEG Mtg*, 1990
- [6] Everett M E. Homotopy, polynomial equations, gross boundary data, and small Helmholtz systems. *J Comput Phys*, 1996, 124: 431~441
- [7] Jegen M D et al. Using homotopy to invert geophysical data. *Geophysics*, 2001, 66: 1749~1760
- [8] 韩波等. 反演地层电阻率的单调同伦法. 地球物理学报, 1991, 34(4): 517~522
- [9] Han B et al. Regularizing-numerical-continuation method for solving the resistivities of the earth. *Mathematics and Computers in Simulation*, 1995, 39: 109~114
- [10] 韩波等. 微分连续正则化方法与一维声波方程系数反演问题求解. 高校应用数学学报, 1994, 9(4): 351~360
- [11] 韩波等. 二维波动方程反问题的一种大范围收敛方法. 哈尔滨工业大学学报, 1995, 27(5)
- [12] Han B et al. A widely convergent generalized pulse-spectrum technique for the coefficient inverse problem of differential equations. *Applied Mathematics and Computation*, 1997, 81: 97~112
- [13] Liu J Q et al. A method of wide convergence region for solving inverse problems of wave equations. *Journal of Harbin Institute of Technology*, 1995, 2(4)
- [14] 刘舒考等. 同伦神经优化理论及其在地震反演中的应用. 石油地球物理勘探, 1998, 33(6): 758~768
- [15] 刘舒考. 地震数据的同伦神经优化反演理论与方法研究 [博士论文]. 北京: 中国石油天然气总公司石油勘探开发科学研究院, 1998
- [16] Allgower E L and Georg K. Simplicial and continuation methods for approximating fixed points and solutions to systems of equations. *SIAM Rev*, 1980, 22: 28~85
- [17] Morgan A P. *Solving polynomial systems using continuation for scientific and engineering problems*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1987
- [18] 王则柯, 高堂安. 同伦方法引论. 重庆: 重庆出版社, 1990
- [19] Choi S H et al. A robust path tracking algorithm for homotopy continuation. *Computers & Chem Eng*, 1996, 20: 647~655
- [20] Wayburn T L and Seader J D. Homotopy continuation methods for computer-aided process design. *Computers in Chemical Engineering*, 1987, 11(1): 7

(本文编辑:刘勇)

[1] 蒲保明等. 拓扑学. 北京: 高等教育出版社, 1985