

激电衰减曲线的拟合问题

黄玲* 辜彬

(成都地质学院)

激电衰减特性在地下水勘探中的重要意义,愈来愈受到水文物探工作者的重视。目前国内生产的微机激电仪(DWD-1)和微机电测仪(DWS-1)都可以实测激电衰减曲线。为进一步利用其衰减特征,如求取半衰时、相对半衰时和衰减梯度等,就需要获取衰减曲线的解析方程式。这涉及到多指数衰减曲线的拟合以及相应的一系列比较复杂的问题。

本文拟就以下5个方面的问题进行讨论:1. 拟合关系的建立;2. LM算法要点;3. 近似解的确定;4. 权因子的确定;5. 项数 n 的选取。

一、拟合关系的建立

J·伯廷和J·洛布认为,激电衰减特性可以由指数求和来表示:

$$F(t) = \sum_{j=1}^n C_j e^{-t/\tau_j} \quad (n \rightarrow \infty) \quad (1)$$

实测中得到的是离散值

$$F_i = \sum_{j=1}^n C_j \exp(-\lambda_j t_i) \quad \lambda_j = \frac{1}{\tau_j} \quad (i = 1, 2, \dots, m) \quad (2)$$

由于实际测量存在误差,实际所测的值为:

$$V_i = F_i + \xi_i \quad (i = 1, 2, \dots, m) \quad (3)$$

式中 ξ_i 为测量的随机误差。通常 ξ_i 呈均匀分布,正态分布或近似呈正态分布,并服从数学期望为零的条件,即 $E\xi_i = 0$ 。本文所要解决的问题是,由已知实测值 V_i ,即(3),求取未知参数 C_j 和

λ_j ($\lambda_j = \frac{1}{\tau_j}$, $j = 1, 2, \dots, n$)。

设若 $m \geq n$ 令

$$S_i(C, \lambda) = \rho_i (V_i - \sum_{j=1}^n C_j \exp(-\lambda_j t_i)) \quad (i = 1, 2, \dots, m) \quad (4)$$

其中 $C = (C_1, C_2, \dots, C_n)$, $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$, 正常数 ρ_i 为权因子。

按通常对曲线拟合的处理,形成如下非线性最优化问题:

$$\min_{C, \lambda} \sum_{i=1}^m S_i^2(C, \lambda) = \min_{C, \lambda} \varphi$$

即

$$\varphi = \sum_{i=1}^m \rho_i^2 (V_i - \sum_{j=1}^n C_j \exp(-\lambda_j t_i))^2 \quad (5)$$

此问题可用下述 Levenberg-Marquardt 算法 (LM 算法) 解决。

二、LM 算法要点

设 $\theta_{2(j-1)+1} = C_j$, $\theta_{2j} = \lambda_j$ ($j = 1, 2, \dots, n$) $\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{2n})$ $F = (F_1, F_2, \dots, F_m)$ $V = (V_1, V_2, \dots, V_m)$; 将 F 在 $\theta^{(0)}$ 处 Taylor 展开, 并取线性项, 有

$$F = F^{(0)} + \sum_{j=1}^{2n} \frac{\partial F}{\partial \theta_j} \bigg|_{\theta=\theta^{(0)}} \delta_j \quad (6)$$

其中 $\delta_j = \theta_j - \theta_j^{(0)}$ 。用矩阵表示 (6) 有

$$F = F^{(0)} + Z\delta \quad (7)$$

其中 Z 是 $m \times 2n$ Jacobian 阵,

$$\text{即} \quad Z_{ij} = \frac{\partial F_i}{\partial \theta_j} \quad (8)$$

$$\text{设} \quad E = \rho(V - F)$$

$$\text{则} \quad \rho V - (\rho F^{(0)} + Z\delta) = E$$

$$\text{或} \quad Q = Z\delta + E \quad (9)$$

其中 $Q = \rho(V - F^{(0)})$ 或 $E = Q - Z\delta$

$$\text{根据 (5) 有} \quad \varphi = E^T E = (Q - Z\delta)^T (Q - Z\delta) \quad (10)$$

要求使 φ 取得极小点, 应满足条件

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \delta} = 0 \quad (11)$$

$$\text{可导出下列方程} \quad Z^T Z \delta = Z^T Q \quad (12)$$

$$\delta = (Z^T Z)^{-1} Z^T Q \quad (13)$$

$$\text{根据 (13) 可求出 } \delta, \text{ 从而可得} \quad \theta = \theta^{(0)} + \delta \quad (14)$$

但因 (12) 是由非线性函数 F 线性化导出的。(13) 求出的 θ 并不是真正的极小点。一般将其作为新的初值, 解 (12), 反复迭代下去, 直到求得满意的 θ 为止。

当 $Z^T Z$ 不存在逆矩阵时, 即 $Z^T Z$ 为奇异阵时, 无法解出 δ 。为此采用约束求解办法, 将 (12) 改变为

$$(Z^T Z + \beta I) \delta = Z^T Q \quad (15)$$

其中 β 称为阻尼因子, I 为单位矩阵。

$$\delta = (Z^T Z + \beta I)^{-1} Z^T Q \quad (16)$$

比较 (13) 和 (16), 通过将阻尼因子 β 加到 $Z^T Z$ 阵的对角线上, 避免了 $Z^T Z$ 的逆不存在的情况。多次用 (16) 迭代求解 δ , 可得最终的 θ , 亦即得到要求的 C 和 λ 。

三、近似解的确定

采用 LM 算法对问题 (5) 进行计算时, 迭代的初值点是任意选取的, 一般以零点作为初始点。这样计算时, 迭代次数往往很多, 尤其是使用微机进行运算时, 时间耗费太多, 不便于野外实际应用。为了缩短计算时间, 考虑以原问题的近似解作为迭代的初始点。这是应用 LM 算法涉及的一个重要问题。

下面给出 (2) 在 $n \geq 2, m = 2n$ 时求解 $(C_1, C_2, \dots, C_n)$ 和 $(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ 的过程。在有随机误差

的情形,利用这些公式可得到原问题的近似解。

假设 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ 互不相等,且已得到

$$F_i = \sum_{j=1}^n C_j \exp(-\lambda_j(t + i\Delta t)) \quad (i = 0, 1, 2, \dots, 2n-1) \quad (17)$$

式中 t 为初始采样时间, Δt 为采样间距。

现设 F_i 为已给的准确值,我们希望能直接解出 C_i 及 $\lambda_i (i=1, 2, \dots, n)$, 令

$$d_j = C_j \exp(-\lambda_j t) \quad (j = 1, 2, \dots, n) \quad (18)$$

$$x_j = e^{\lambda_j \Delta t} \quad (19)$$

可将(17)改写为
$$\sum_{j=1}^n d_j x_j^i = F_i \quad (i = 0, 1, 2, \dots, 2n-1) \quad (20)$$

由(17)的表述,它是一个实际的物理过程,其系数 C_j 和 λ_j 是一定存在的。

由(20)中前 $(n+1)$ 个式子,并将其看成一组向量,由于 F_i 是常向量,与向量组 $x_1^1, x_2^1, \dots, x_n^1$ 线性相关,因而有不全为零的系数 $d_j (j=1, \dots, n)$ 存在,也就是线性方程组

$$\sum_{j=1}^n d_j x_j^i - F_i = 0 \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n+1) \quad (21)$$

是有解的,根据其相容性即可得:

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 & F_0 \\ x_1^1 & x_2^1 & \dots & x_n^1 & F_1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_1^n & x_2^n & \dots & x_n^n & F_n \end{vmatrix} = 0 \quad (22)$$

将上式左端最后一列以 $(1, x, x^2, \dots, x^n)$ 代之,就是熟知的 $n+1$ 阶 Vandermonde 行列式 $V(x_1, x_2, \dots, x_n, x)$, 将(22)左端关于最后一列展开,便成为

$$\sum_{j=0}^n b_j F_j = 0 \quad (23)$$

其中 b_j 为相应的 n 阶代数余子式,通过与 $V(x_1, x_2, \dots, x_n, x)$ 中 x^j 系数的对比,可知

$$b_j = (-1)^{n-j} \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_{n-j} \leq n} x_{i_1} x_{i_2} \dots x_{i_{n-j}} \cdot V(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (24)$$

其中 $j=0, 1, \dots, n$, 特别地 $b_n = V(x_1, x_2, \dots, x_n)$

记 $a_j = b_{n-j}/V(x_1, x_2, \dots, x_n)$, $(j=1, 2, \dots, n)$ 由(24)得

$$a_j = (-1)^j \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_j \leq n} x_{i_1} x_{i_2} \dots x_{i_j} \quad (j = 1, 2, \dots, n) \quad (25)$$

这样,由(23)可导出

$$\sum_{j=1}^n F_{n-j} a_j = -F_n \quad (26)$$

类似地,考察(20)在 $i=k, k+1, \dots, k+n$ 时的 $(n+1)$ 个式子,可得:

$$\sum_{j=1}^n F_{n+k-j} \cdot a_j = -F_{n+k} \quad (k = 0, 1, \dots, n-1) \quad (27)$$

综合上述,可得下列求解 $C=(C_1, C_2, \dots, C_n)$ 与 $\lambda=(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ 的步骤:

(i) 由于 $t, \Delta t$ 及 $F_0, F_1, \dots, F_{2n-1}$ 为已知,从线性方程组(26)求解可得 $a_j (j=1, 2, \dots, n)$ 。

(ii) 根据(25)式, $x_1, x_2, \dots, x_n$ 可从求解下列 n 次代数方程而得到

$$x^n + \sum_{j=1}^n a_j x^{n-j} = 0 \quad (28)$$

(iii) 根据(19)由 x_j 确定 $\lambda_j (j=1, 2, \dots, n)$

(iv)从线性方程组(20)可求得 $d_j (j=1, 2, \dots, n)$, 然后, 由(18)求得 $C_j (j=1, 2, \dots, n)$

当 $F_i (i=0, 1, 2, \dots, 2n-1)$ 准确值代之以近似值 $V_i (i=0, 1, 2, \dots, 2n-1)$ 时, 也可由上述过程, 得到 C 与 λ 的近似解。实际应用中, 从仪器所读取的采样值, 其采样间隔是不同的。可由线性插值的办法获得多组等间距采样值。根据 t 和 Δt 的不同选择, 还可得到 n 组近似解, 再作平均, 结果将会更好。

四、权的选择

当随机误差服从正态分布时, 设 $n=2$, 给定参数精确值 $c_1, c_2, \lambda_1, \lambda_2$ 及 Δt ,

$$\text{令 } F_i = C_1 e^{-\lambda_1 \Delta t} + C_2 e^{-\lambda_2 \Delta t} \quad (i = 1, 2, \dots, 50) \quad (29)$$

通过计算机产生随机数组 $\{V_i\}$, 使满足

$$V_i = F_i + \xi_i, \quad \xi_i \in N(0, \alpha F_i) \quad (i = 1, 2, \dots, 50) \quad (30)$$

其中 α 为正值常量。根据 α 取诸不同值时所产生的多组模拟数组 $\{V_i\}$, 分别在 3 种不同的权因子 $\rho_i = 1, V_i^{-1/2}, V_i^{-1}$ 时, 求解模型(5), 以上节所述方法给出近似解开始进行迭代, 直至得到精度很高的解才停止。计算结果见表 1。

表 1 权参数选择计算结果

α	参数类别 精确值 权	c_1	c_2	λ_1	λ_2
		50	30	0.1	0.6
0.01	$\rho_i = 1$	50.8693	31.4039	0.1010	0.6251
	$\rho_i = V_i^{-1/2}$	50.3771	30.7832	0.1003	0.6083
	$\rho_i = V_i^{-1}$	50.0569	30.6775	0.1000	0.5974
0.03	$\rho_i = 1$	51.2769	28.7751	0.1014	0.6863
	$\rho_i = V_i^{-1/2}$	50.8330	28.7924	0.1011	0.6481
	$\rho_i = V_i^{-1}$	50.4206	28.8122	0.1001	0.5941
0.05	$\rho_i = 1$	51.6129	27.9431	0.1017	0.6387
	$\rho_i = V_i^{-1/2}$	51.2412	28.1533	0.1014	0.6204
	$\rho_i = V_i^{-1}$	50.7245	28.2837	0.1009	0.5913

由(30)式可知, 所包含的随机误差的均方差与 F_i 成正比。而权因子 ρ_i 与 V_i 成正比时, 所得解最为精确。因此, 从计算试验可以判断, 权因子与数据所包含的随机误差的均方差成反比时, 计算效果最好。对于其他误差分布(包括均匀分布, 三角分布等)亦有类似结果。

五、衰减项数的确定

假设由(2)式所表示的衰减值 $F_i (i=1, 2, \dots, m)$ 已经给出, 如何确定式中互不相等参数 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ 的数目 n , 这就是本节要讨论的问题。

$$\text{记 } Z_k = \begin{bmatrix} F_0 & F_1 & \cdots & F_{k-1} \\ F_1 & F_2 & \cdots & F_k \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ F_{k-1} & F_k & \cdots & F_{2k-2} \end{bmatrix} \quad (31)$$

$$C = \text{diag}(C_1, C_2, \dots, C_n) = D^2$$

其中 $D = \text{diag}(C_1^{1/2}, C_2^{1/2}, \dots, C_n^{1/2})$, 并记 $X_j = e^{-\lambda_j t}$ ($j=1, 2, \dots, n$) 以及

$$\text{记 } x_k = \begin{bmatrix} 1, & 1, & \dots, & 1 \\ x_1, & x_2, & \dots, & x_n \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_1^{k-1}, & x_2^{k-1}, & \dots, & x_n^{k-1} \end{bmatrix} \quad (32)$$

由表达式(2), 易于验证有

$$Z_k = X_k C X_k^T = (X_k D)(X_k D)^T \quad (33)$$

当 $k \leq n$ 时, 由于 $X_j (j=1, 2, \dots, n)$ 互不相等, 可知 X_k 与 $X_k D$ 皆为满秩阵, 从而 Z_k 为正定阵, 便有 $|Z_k| > 0$, 而当 $k > n$ 时, 由(32)知 $\text{rank } X_k \leq n < k$, 故由(33)亦有 $\text{rank } Z_k \leq n < k$, 所以 k 阶行列式 $|Z_k| = 0$ 。

实际应用中, 根据大多数仪器条件, 采样数一般在 7 到 20 范围内, 即 $k < 20$, 因此项数也限定在 $2 \leq n < 20$ 范围。如果采样时间在几十秒的范围内, 用两项指数就足以确定激电衰减规律。

表 2 是由 DWJ-1A 型微机激电仪实测的一组数及其拟合数。拟合结果 $C_1 = 66(\text{mv})$ $C_2 = 24(\text{mv})$, $\tau_1 = 7\text{s}$, $\tau_2 = 55\text{s}$ 。结果表明两项拟合基本满足要求, 如果再要求更高的精度, 可以增加项数, 或相应增加迭代次数。这根据实际应用要求, 同时也考虑实测数据本来就有一定误差。

表 2 实测数据拟合结果

采样时间	0.075	0.15	0.3	0.55	0.9	1.4	2.1	3	4.1	5.5
实测 mv	89.01	88.66	87.30	84.45	81.60	77.45	71.61	65.70	59.01	51.77
拟合 mv	89.20	88.59	87.17	84.70	81.60	77.44	71.90	65.71	59.03	51.76

结 语

本文建立了激电衰减曲线拟合模型, 对计算模型中的权因子、近似解和项数的确定作了讨论, 并用实测数据作了验算。结果表明方法有效, 并能方便地在 IBM-PC 甚至 PC-1500 微机上实现。为找水勘探野外现场处理提供了一个有效工具。

本文是在史保连教授的关心下完成的, 谨表谢忱。

参考文献

- [1] Gill P. E. etc.: 1981, Practical Optimization, Academic Press, New York.
- [2] J·伯廷, J·洛布: 1980, 激发极化的实验和理论, 地质出版社。

CURVE FITTING PROBLEM OF INDUCED POLARIZATION DECAY EXPRESSIONS

Hang Ling Gu Bin

(Chengdu College of Geology)