同伦交替迭代法在双指数拟合中的应用

陈 华,邓少贵,范宜仁
CHEN Hua,DENG Shao-gui,FAN Yi-ren

中国石油大学(华东),山东 东营 257061
University of Petroleum China,Dongying,Shandong 257061,China
E-mail:delaunay@163.com

CHEN Hua,DENG Shao-gui,FAN Yi-ren.Application of homotopy alternative iteration method in double exponential fitting.Computer Engineering and Applications,2007,43(25):204-205.

Abstract: Alternative iteration methods is improved dependence of initial value by introducing homotopy method,it becomes a large-scale convergence method,so algorithm's generality and stability is improved,it can be applied to the practical engineering effectively.
Key words: homotopy method;alternative iteration method;double exponential fitting

摘 要:通过引进同伦法,改善了交替迭代法对初值的依赖性,使得大范围收敛成为可能,从而提高了算法的通用性和稳定性,可有效地应用于工程实际。
关键词:同伦法;交替迭代法;双指数拟合
文章编号:1002-8331(2007)25-0204-02 **文献标识码**:A **中图分类号**:O241.5

1 引言

光滑雷电全波波形[1]、激发极化电位测井中的极化电位[2]和高空核电磁脉冲典型波形[3]等物理过程从图形上看接近双(多)指数形式,通常采用双(多)指数函数拟合得到其模型公式。目前较为有效的双(多)指数数据拟合方法都是建立在最小二乘原理基础上,如高斯牛顿法、共扼梯度法、阻尼最小二乘法等,但这些算法都依赖于初值的选取,难以获得全局最优解,收敛速度也会很慢,甚至发散。陈星[2]等利用遗传算法对激发极化电位测井数据进行多指数拟合,采用一些简单的缩小可能解空间的技巧后,大幅度提高了计算的效率和精度。朱珉仁[4]充分利用观测值,应用循环搜索法确定了参数初始值并成功地验证了Meyer&Roth 给出的观测值。这两个方法都采用了一些处理技巧,使得通用性大打折扣。赵林明[5]采用高斯牛顿法先拟合出双指数函数的非线性系数,然后再拟合线性系数,从而降低了寻优空间维数,使得计算效率大幅度提升,同时也降低了初值选取难度,但仍然存在对初值的依赖。同伦方法是求解非线性问题的一种有效的数值迭代方法,它克服了传统迭代法局部收敛的弱点,对初值的选取没有严格的限制,是一种全局收敛方法[6],近年来求解各类反演问题受到越来越多的关注[7-9]。因此,利用同伦方法可有效改善初值的依赖性问题。

2 交替迭代法

给定数据点列$\{(x_i,y_i)\}$,$i=1,\cdots,n$,拟合双指数函数

$$f(x,b)=b_1e^{-b_2x}+b_3e^{-b_4x} \tag{1}$$

其中b_1和b_3称为线性拟合系数,b_2和b_4称为非线性拟合系数。

交替迭代法的主要思想是先计算出非线性拟合系数b_2和b_4,然后再计算线性拟合系数b_1和b_3。其计算步骤为:

(1)给出非线性拟合系数b_2和b_4的初值,记为b_2^0,b_4^0。

(2)利用线性最小二乘法计算线性拟合系数b_1和b_3,其法方程为

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} X_{1i}^2 & \sum_{i=1}^{n} X_{1i}X_{2i} \\ \sum_{i=1}^{n} X_{2i}X_{1i} & \sum_{i=1}^{n} X_{2i}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} X_{1i}y_i \\ \sum_{i=1}^{n} X_{2i}y_i \end{pmatrix} \tag{2}$$

其中$X_{1i}=e^{-b_2^0x_i}$,$X_{2i}=e^{-b_4^0x_i}$。求解方程(2),计算出线性拟合系数b_1和b_3,记为b_1^0,b_3^0。拟合函数记为$f(x,b^0)$,相应的均方拟合误差记为Δ^0。

(3)以b_2^0,b_4^0为初值,应用高斯牛顿法,得到新的非线性拟合系数b_2和b_4的值,记为b_2^1,b_4^1,有$b_2^1=b_2^0+\delta_0$,$b_4^1=b_4^0+\delta_4$,其中δ_2,δ_4由下式确定

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} X_{3i}^2 & \sum_{i=1}^{n} X_{3i}X_{4i} \\ \sum_{i=1}^{n} X_{4i}X_{3i} & \sum_{i=1}^{n} X_{4i}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta_2 \\ \delta_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} X_{3i}[y_i-f(x_i,b^0)] \\ \sum_{i=1}^{n} X_{4i}[y_i-f(x_i,b^0)] \end{pmatrix} \tag{3}$$

基金项目:中国石油天然气集团公司石油科技中青年创新基金项目(No.06E1020);中国石油大学优秀博士学位论文培育基金(No.B2007-03)。
作者简介:陈华(1972-),男,讲师,博士生,主要研究方向为工业应用数学;邓少贵(1970-),副教授,博士,主要研究方向为应用地球物理;范宜仁(1962-),男,博士,教授,主要研究方向为应用地球物理。

其中 $X_{3i}=b_1^0 x_i e^{-b_2^0 x_i}$，$X_{4i}=b_3^0 x_i e^{-b_4^0 x_i}$。

取 $X_{1i}=e^{-b_2^1 x_i}$，$X_{2i}=e^{-b_4^1 x_i}$，由方程（2）求出线性拟合系数 b_1^1, b_3^1，拟合函数记为 $f(x,b^1)$，相应的均方拟合误差记为 Δ^1。

（4）重复步骤（2）和（3），使非线性函数拟合计算和线性函数拟合计算过程交替进行，直到均方拟合误差 Δ 变化满足给定的范围为止。

3　同伦交替迭代法

给定数据点列 $\{(x_i, y_i)\}, i=1,\cdots,n$，若已计算出线性拟合系数 b_1 和 b_3，拟合非线性拟合系数 b_2 和 b_4。令 $b=[b_1, b_2, b_3, b_4]$，使 $I=\sum_{i=1}^{n}[f(x_i,b)-y_i]^2$ 最小，则 $\begin{cases}\dfrac{\partial I}{\partial b_2}=0\\ \dfrac{\partial I}{\partial b_4}=0\end{cases}$。

令 $F_1=\dfrac{\partial I}{\partial b_2}$，$F_2=\dfrac{\partial I}{\partial b_4}$，$\boldsymbol{F}=[F_1\ \ F_2]^{\mathrm{T}}$，得非线性方程组 $F(b)=0$，$b\in R^2$。考虑到算法过程的通用性，把该非线性方程组一般化为

$$F(x)=0, x\in R^n \tag{4}$$

在式（4）中引入参数 t，其中 $t\in[0,1]$，构造同伦映射 $H: D\times[0,1]\subset R^n\times R^1\rightarrow R^n$ 代替映射 F，使得

$$H(x,0)=F_0(x), H(x,1)=F(x), \forall x\in D \tag{5}$$

其中 $H(x,0)=0$ 的解 x^0 是已知的，$H(x,1)=1$ 是要求解的问题。如果方程

$$H(x,t)=0, t\in[0,1] \tag{6}$$

有解 $x=x(t), x:[0,1]\rightarrow R^n$，且连续依赖于 t，则 $t=1$ 时，$x(1)=x^*$ 即为方程（4）的解。这样把求解方程（4）的问题转化为求同伦方程（6）的解，故称之为同伦算法。根据（5）可构造出同伦函数 $H(x,t), x\in D, t\in[0,1]$ 的具体形式，常用的同伦函数有

$$H(x,t)=tF(x)+(1-t)A(x-x^0), x\in D, t\in[0,1] \tag{7}$$

$$H(x,t)=F(x)-(1-t)F(x^0), x\in D, t\in[0,1] \tag{8}$$

其中 $A\in R^{n\times n}$ 非奇异，x^0 已知。例如在文献[7]中采用同伦（7），在文献[8][9]中采用同伦（8）。求同伦方程（6）的数值计算方法有数值延拓法和参数微分法，考虑到参数微分法设计简单的特点，下面采用参数微分法求同伦方程（6）。

同伦方程（6）两端对 t 求导数，得

$$H_x'(x,t)\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}+H_t'(x,t)=0$$

若 $H_x'(x,t)^{-1}$ 存在，可得初值问题

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=-H_x'(x,t)^{-1}H_t'(x,t)\\ x(0)=x^0\end{cases} \tag{9}$$

初值问题（9）在 $t_N=1$ 的数值解 x^N 可作为式（4）解的近似解。若同伦方程取为式（8），则得等价的初值问题为

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=-F'(x)^{-1}F(x^0)\\ x(0)=x^0\end{cases} \tag{10}$$

在实际计算中可用精度较高的数值方法求初值问题（10），例如中点求积公式：

$$\begin{cases}x^1=x^0-\dfrac{1}{N}[F'(x^0)]^{-1}F(x^0)\\ x^{k+\frac{1}{2}}=x^k+\dfrac{1}{2}(x^k-x^{k-1}) \qquad ,k=1,\cdots,N-1\\ x^{k+1}=x^k-\dfrac{1}{N}[F'(x^{k+\frac{1}{2}})]^{-1}F(x^0)\end{cases} \tag{11}$$

由于仅仅是利用式（11）求取高斯牛顿法的初值，N 值不需要太大，否则计算量过大致使计算效率降低，经多次实验 N 值一般在 5~8 之间比较合适。

在交替迭代法的第三步对原有初值 b_2^0, b_4^0 用同伦公式（11）再计算，可获得较为合适的初值，其余步骤同交替迭代法，称之为同伦交替迭代法。

4　应用

利用所测的部分数据，见数据表 1，拟合公式（1）。非线性拟合系数 b_2 和 b_4 选择合适的初值 0.1 和 3，使用交替迭代法，其效果良好，如图 1；如果初值选为 5 和 5，其效果就比较差了，如图 2，说明交替迭代法对初值的依赖性很强。对初值选为 5 和 5 采用同伦公式（11）计算，公式中的 N 为 5，则计算出的新初值为 1.62 和 11.12，再使用交替迭代法的其它步骤计算，其效果非常好，如图 3，几乎同图 1 无异。说明同伦交替迭代法对初值的依赖性已不如交替迭代法那样敏感。

表 1　数据表

x_i	0	0.100 0	0.200 0	0.300 0	0.400 0	0.500 0	0.600 0
y_i	5.895 5	3.563 9	2.517 3	1.979 9	1.899 0	1.393 8	1.135 9
x_i	0.700 0	0.800 0	0.900 0	1.000 0	1.100 0	1.200 0	1.300 0
y_i	1.009 6	1.034 3	0.843 5	0.685 6	0.610 0	0.539 2	0.394 6
x_i	1.400 0	1.500 0	1.600 0	1.700 0	1.800 0	1.900 0	2.000 0
y_i	0.390 3	0.547 4	0.345 9	0.137 0	0.221 1	0.170 4	0.263 6

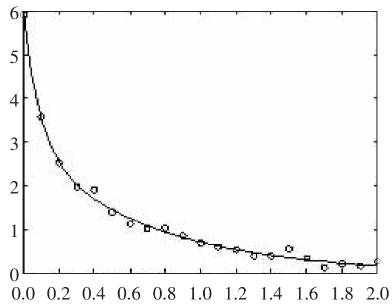

图 1　初值为 0.1 和 3.0 的拟合效果图

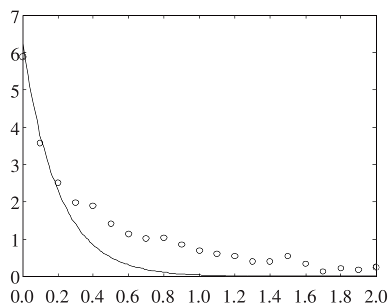

图 2　初值为 5 和 5 的拟合效果图

5　结论

交替迭代法是一种有效解决双指数函数拟合的方法，通过分别求取线性系数和非线性系数，降低了寻优空间维数，但仍

（下转 226 页）