

用趋势面分析方法提高模拟退火法反演的效率

詹麒,朱培民

(中国地质大学地球物理系,湖北武汉 430074)

摘要: 利用模拟退火反演过程中废弃的随机搜索的模型解信息,建立起目标函数的二阶趋势面,根据趋势面的分析结果预测和指导模拟退火的搜索方向,使模拟退火法快速地收敛到全局最优解.数值试验证明,这种方法比传统模拟退火法的计算效率高出十倍以上.

关键词: 反演;模拟退火;趋势面分析.

中图分类号: P318;P319 文献标识码: A

文章编号: 1000-2383(2001)05-0538-03

作者简介: 詹麒(1962—),男,中国地质大学博士生,西北石油地质局高级工程师,主要从事地震勘探,油气田开发和管理等方面的工作.

自 Kirkpatrick 等^[1]提出模拟退火法以来,它在大规模集成电路的设计、经济学、自动控制、人工智能、地球物理^[2~4]等诸多领域有了广泛的应用.为了提高模拟退火法的计算效率,一些学者作了大量的研究工作,归纳起来,他们主要通过三种途径来提高模拟退火法的计算效率:第一种是通过改变随机搜索的策略^[5]来提高它的计算效率;第二种是针对具体的问题施加合理的约束,并设计合适的目标函数来提高反演的计算效率.第三种是将模拟退火法和非启发式非线性反演方法(如共轭梯度,最速下降法等)或线性反演方法结合起来,利用非启发式反演或线性反演收敛速度快,模拟退火全局寻优的特点来提高算法的计算效率^[6,7].

1 理论和方法

1.1 模拟退火的搜索结果

启发式反演算法,在获得全局最优解之前,需要在模型空间做大量的搜索工作.如:在一个简单的典型的经济学反问题中^[8],反演所用的目标函数有两个极值点,分别是 $A: F(0.864, 1.23) = 16.0817$ 和 $B: F(2.4986, -0.9826) = 20.4823$ ^[9].其中 A 是全局极值点(图 1a).Goffe 等^[9]用自己设计的 SA

算法,求出它的全局最优解共随机搜索了 5 001 次.在反演开始时,初始猜测选在第二个极值点附近,即点(2.35, -0.319)处.

然而,这 5 001 次搜索是否是完全必要的呢?作者用 Goffe 等^[9]设计的程序分别在执行了 50 次,100 次,200 次,500 次,1 000 次后输出了全部的搜索结果.作者发现第 50 次输出的全部搜索结果,就能够反映这个反演问题目标函数的概貌,能够大致地确定出它的全局最小极值的位置(图 1b).搜索次数到 500 次时,可以看出,根据搜索结果绘制的等值线图与实际的目标函数相差无几(图 1c),其中图 1a 和图 1c 上的最小极值点 A 和 A^* 几乎重合在一起(表 1).

基于上述事实,我们认为,如果在 50 次,100 次,200 次,500 次随机搜索的基础上,通过某种预测机制,有效地指导搜索的过程,使模拟退火反演能够快速准确地收敛到全局极值解上.本文选择了趋势预测方法,作为随机搜索过程的指导.试验结果证明,将趋势预测和模拟退火法结合在一起,能够快速和正确地收敛到全局最优解.

1.2 趋势预测指导随机搜索的方法

为了简单起见,选用二阶趋势预测,主要的原因是一个任意维数的二阶趋势面仅有唯一的一个极值点.在二维情况下,用趋势分析加速模拟退火反演的基本方法如下:(1)开始模拟退火反演的过程,给定初始猜测,反复随机搜索模型空间;(2)在搜索到的

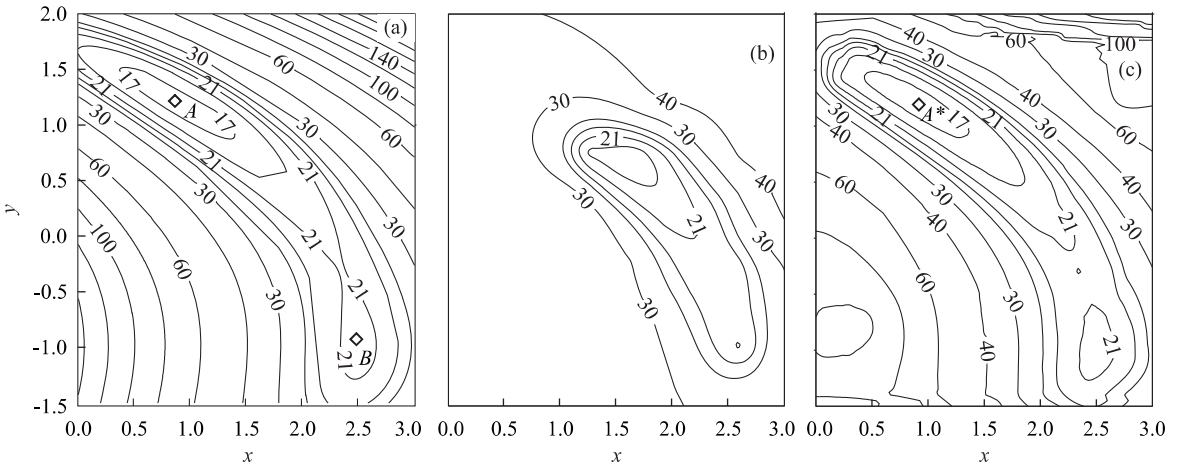


图 1 目标函数曲面

Fig. 1 Objective function surfaces

a. 经典的经济学反问题; b. 用 SA 法 50 次搜索结果; c. 用 SA 法 500 次搜索结果

表 1 趋势面分析结果及组合反演结果

Table 1 Results of trend surface analysis and hybrid inversion

搜索次数	(x_{\min}, y_{\min})	$(x_{\text{opt}}, y_{\text{opt}})$	f_{opt}
50	(2.276, -0.167)	(0.864, 1.235)	16.0817
100	(2.308, -0.413)	(2.498, -0.982)	20.4820
150	(2.141, 0.066)	(0.864, 1.235)	16.0817
200	(-0.166, 2.071)	(0.864, 1.235)	16.0817
250	(0.722, 1.359)	(0.864, 1.235)	16.0817
300	(0.876, 1.225)	(0.864, 1.235)	16.0817
350	(0.880, 1.219)	(0.864, 1.235)	16.0817
400	(0.878, 1.221)	(0.864, 1.235)	16.0817
450	0.878, 1.222)	(0.864, 1.235)	16.0817
500	(0.878, 1.223)	(0.864, 1.235)	16.0817

f_{opt} 表示全局最优解对应的目标函数值.

模型点超过 6 个时,在适当的时机,将已记录的前 m 个最小目标函数值及其对应的模型点,用最小二乘法构造二阶趋势面;(3)将趋势面的极值点作为共轭梯度法(CG, conjugate gradient)的初始猜测,用共轭梯度法求出反演问题的最优解;(4)反复(2)和(3),当反演的最优解稳定后,结束反演过程.

1.3 趋势面的构造与预测

二维二阶趋势面的构造方法如下:

设在模型空间有一组随机搜索得到的 m 个数据点 $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_m, y_m)$, 它们对应的目标函数值分别为 f_1, f_2, \dots, f_m . 我们用这组数据构造如下式所示的二阶趋势面:

$$F(x, y) = a_0 + a_1x + a_2y + a_3x^2 + a_4xy + a_5y^2. \tag{1}$$

式中, $a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, a_5$ 表示二阶趋势面的系数

项. 当 $m \geq 6$ 时,我们就可用最小二乘法求出上述的 6 个系数.

二阶趋势面的极值点在 (x_{\min}, y_{\min}) 处,具体地

$$x_{\min} = \frac{2a_1a_5 - a_2a_4}{a_4^2 - 4a_3a_5}, \tag{2}$$

$$y_{\min} = \frac{2a_2a_3 - a_1a_4}{a_4^2 - 4a_3a_5}.$$

注意:在实际反演的过程中,搜索到的点是大量的,不必全部将这些点用于重建趋势面. 实验表明只须少量的点,就能确定全局极值解的范围. 本文只选用了不断更新记录的最优解的前 25 个点值.

2 试算及结果

在模拟退火随机搜索的过程中,每隔 50 次取出记录的前 25 个最小目标函数值及其对应的模型点,进行趋势预测分析,并求出趋势面的极值点,作为 CG 法的初始猜测,求出反问题的全局最优解. 结果(表 1)表明:(1)在搜索达到 150 次以上时,用趋势分析的结果指导求出的反问题解是全局最优解. 其中仅在搜索次数为 100 次时收敛到了局部极值;(2)在搜索达到 500 次以上时,趋势面的极值点 (x_{\min}, y_{\min}) 逐渐接近全局最优解 $(x_{\text{opt}}, y_{\text{opt}})$. 我们相信在搜索到 500 次以后,用趋势分析预测指导反演可以得到相同的正确的全局最优解. 因此,以此计算反演的效率至少比传统的模拟退火反演法快 10 倍,说明趋势分析预测指导非线性反演是可行的,能正确和快速地收敛到全局最优解.

3 结论

(1)趋势面分析方法能够指导模拟退火反演随机搜索的过程,能够从全局把握反演搜索的方向,促使反演能够正确地收敛到全局极值处;(2)趋势面分析方法的算法实现能够加速非线性地球物理反演的过程.文中,趋势预测虽然仅用于传统的模拟退火法的数值试验中,但笔者相信,经过适当改造也可以用于其他的改进型模拟退火方法中,例如 VFSR 等,当然也可以用在其他的启发式非线性反演中.

本文研究所用的模拟退火反演算法程序来源于美国圣路易斯华盛顿大学(Washington University in St. Louis)的 Bill Goffe 教授,作者在此谨表谢意.

参考文献:

- [1] Kirkpatrick S, Gelatt C D, Vecchi M. Optimization by simulated annealing [J]. *Science*, 1983, 220: 671—680.
- [2] Kaikkonen P, Sharma S P. 2-D nonlinear joint inversion of VLF and VLF-R data using simulated annealing [J]. *Journal of Applied Geophysics*, 1998, 39(3): 155—176.

- [3] Sharma S P, Kaikkonen P. Two-dimensional non-linear inversion of VLF-R data using simulated annealing [J]. *Geophysical Journal International*, 1998, 133(3): 649—668.
- [4] Prasad S N. Simulated annealing 2-D nonlinear inversion of geomagnetic deep sounding data near Ujjain-Guna, India. *Pure and Applied Geophysics*, 1999, 154(2): 343—363.
- [5] 姚姚. 地球物理非线性反演模拟退火法的改进[J]. *地球物理学报*, 1995, 38(5): 643—650.
- [6] Liu P, Hartzell S, Stephenson W. Nonlinear multi-parameter inversion using a hybrid global search algorithm: application in reflection seismology [J]. *Geophys J Int*, 1995, 122: 991—1000.
- [7] Chunduru R K, Sen M K, Stoffa P L. Hybrid optimization methods for geophysical inversion [J]. *Geophysics*, 1997, 62: 1196—1207.
- [8] Judge G G. *The theory and practice of econometrics*. 2nd ed. New York: John Wiley and Sons, 1985. 956—957.
- [9] Goffe B, Ferrier G, Rogers J. Global optimization of statistical functions with simulated annealing [J]. *Journal of Econometrics*, 1994, 60(1/2): 65—100.

AN APPROACH TO IMPROVING EFFICIENCY OF SIMULATED ANNEALING USING TREND SURFACE ANALYSIS

Zhan Qi, Zhu Peimin

(*Department of Geophysics, China University of Geosciences, Wuhan 430074, China*)

Abstract: An approach to solving global optimization and inversion problems is developed. It builds 2-order trend surface analysis of abandoned search information in heuristic nonlinear inversion — simulated annealing. The fundamental of this approach is that SA changes process of random search according to prediction of trend surface analysis with some solutions of search in model space so that it ensures inversion to converge to the global optimum fast and exactly. The numerical test of a typical economics inversion problem has proved that this approach can improve the efficiency of simulated annealing remarkably.

Key words: inversion; simulated annealing; trend surface analysis.