

معکوس سازی پارامترهای مدل کول-کول با استفاده از الگوریتم شبیه سازی بازپخت برای داده های قطبش القایی طیفی (SIP)

حسینعلی قاری^۱، احمد قربانی^{۱*} و عبدالحمید انصاری^۱

^۱ دانشکده مهندسی معدن و متالورژی، دانشگاه یزد، یزد، ایران

(تاریخ دریافت: ۱۳۹۱/۲/۱۲، تاریخ پذیرش: ۱۳۹۲/۴/۳)

چکیده

قطبش القایی طیفی (SIP) شاخه ای از روش های ژئوفیزیکی است که به طور گسترده در پی جویی های معدنی و زیست محیطی مورد استفاده قرار می گیرد. برای تفسیر و وارون سازی داده های قطبش القایی طیفی با مدل کول-کول، چهار پارامتر m ، τ و c بازاریبی می شود. تحقیقات زیادی در زمینه بازاریبی پارامترهای کول-کول از داده های قطبش القایی طیفی صورت گرفته است که اکثراً براساس روش های کمترین مربعات خطا استوار است. در پژوهش حاضر از توسعه استنباط بیزی (Bayesian) برای برآورد پارامترهای دو کول-کول استفاده شده است. در این استنباط دو روش مرسوم برای نمونه برداری از تابع توزیع پسین وجود دارد: ۱. روش شبیه سازی بازپخت (Simulated Annealing (SA)) ۲. روش نمونه برداری گیبس (Gibbs Sampling (GS)). در مقاله حاضر، ابتدا نمونه برداری با استفاده از روش شبیه سازی بازپخت صورت گرفته است. این الگوریتم در محیط نرم افزار متلب برنامه نویسی شده و با رایانه ای به بسامد 2.53GHz و حافظه زنده 4Gb اجرا شده است. سپس الگوریتم نمونه برداری گیبس، که چن و همکاران آن را گسترش داده اند، بازسازی شده است. همچنین، نتایج وارون سازی حاصل از دو الگوریتم برای داده های قطبش القایی طیفی مصنوعی و واقعی به دست آمده در آزمایشگاه، با هم مقایسه شده است.

نتایج نشان می دهد که هر دو روش یک رهیافت کلی برای وارون سازی پارامترهای مدل کول-کول از داده های قطبش القایی طیفی تامین می کنند، در یافتن کمینه واقعی موفق بوده اند، درگیر کمینه های محلی نمی شوند و برآوردهای به دست آمده از آنها مستقل از مقادیر اولیه پارامترها است. برای داده های مصنوعی با نوفه تصادفی ۱۰٪ و زمان ۵۰ ثانیه، نتایج شبیه سازی بازپخت نسبت به نمونه برداری گیبس به داده های واقعی نزدیک تر است، در حالی که روش نمونه برداری گیبس برای رسیدن به چنین تقریبی به ۶ دقیقه زمان نیاز دارد. برای داده های آزمایشگاهی نیز روش شبیه سازی بازپخت نسبت به روش نمونه برداری گیبس در زمان کمتر، برازش مناسب تری بر داده ها به دست می دهد. در نتیجه برای مسئله ای با پارامترهای بیشتر، زمان صرف شده در روش نمونه برداری گیبس به مراتب افزایش می یابد، در صورتی که روش شبیه سازی بازپخت، این زمان را به حداقل می رساند.

واژه های کلیدی: قطبش القایی طیفی، مدل کول-کول، معکوس سازی، روش بیزی، شبیه سازی بازپخت، نمونه برداری

Inversion of spectral induced polarization data for Cole-Cole parameters using simulated annealing algorithm

¹Hosseinali Ghari¹, Ahmad Ghorbani^{1*} and Abdol hamid Ansari

¹Department of Mining and Metallurgical Eng., Yazd University, Yazd, Iran

(Received: 1 May 2012, accepted: 24 June 2013)

Summary

Spectral induced polarization (SIP) method is an exploration geophysical method. The induced polarization (IP) method has been used extensively in mine prospecting and increasingly in environmental investigations because IP measurements are very sensitive to the low frequency capacitive properties of rocks and soils.

Many different models have been proposed for the description of the dispersive behaviour of the IP. However, the most widely used model is the Cole-Cole model. This model describes the resistivity dispersion observed in field data from areas with metallic mineral content. It is also used to estimate various subsurface properties of nonmetallic soil and rocks in IP frequency domain investigations (SIP). A multiple Cole-Cole model is typically a more general and proper model than a single Cole-Cole model for describing IP data with various dispersion ranges caused either by multiple-length scales in sediments or by coupling effects in the IP measurements.

The Cole-Cole model parameters are widely used to interpret both time- and frequency-domain induced polarization data. Among many studies in which the Cole-Cole parameters are estimated from SIP measurements on soils and rocks, a majority of them use least squares (deterministic) methods. In this work, we have developed a Bayesian method with simulated annealing sampling algorithm to invert single and double Cole-Cole parameters from SIP data. We have also reproduced the Gibbs sampling algorithm developed by Chen et al in 2008.

The Bayesian approach consists of propagating the information provided by measurements throughout the model and combining this information with a priori knowledge of the data. A major limitation towards a more widespread implementation of Bayesian approaches is that obtaining the posterior distribution often requires the integration of high-dimensional functions. This can be computationally very difficult, but several approaches have been proposed which fall short of direct integration functions. Here, we focused on Markov Chain Monte Carlo (MCMC) methods, which attempt to simulate direct draws from some complex distribution of interest. The simulated annealing and Gibbs sampling are particular MCMC methods widely applicable to a broad class of Bayesian problems and have sparked a major increase in the application of Bayesian analysis. This interest is likely to continue in the future. In the Gibbs sampling method, the acceptance probability is 1; that is, Gibbs sampler candidates are always accepted. On the other hand, the acceptance probability is between 0 and 1 for the simulated annealing method. The MCMC-based inversion method provides extensive global information on unknown parameters such as the marginal probability distribution functions from which we can obtain better estimates and tighter uncertainty bounds of the parameters compared to deterministic methods.

We compared performance of the the simulated annealing method with the Gibbs sampling algorithm method through an inversion of synthetic and real data. Both methods provide a global approach to invert SIP data for the Cole-Cole parameters in which the obtained estimates are independent of the initial values. In addition, this approach has the ability to avoid getting trapped in a local optimum.

For synthetic data with 10% random noise and 50 second run-time, the results of the simulated annealing are more similar to the results of the Gibbs sampling method. The latter needs 6 minutes of time. Also, in the case of the real data obtained in laboratory, the simulated annealing method has provided a more suitable fit in comparison with the Gibbs sampling method. As a result, for a problem with more parameters, the required time is increased in the Gibbs sampling method, while the simulated annealing method reduces the required time.

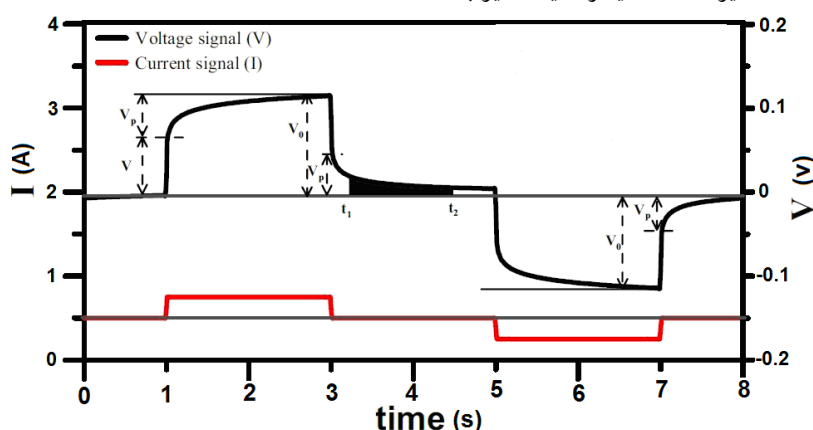
Keywords: Spectral induced polarization, Cole-Cole model, inversion, Bayesian, simulated annealing, sampling.

۱ مقدمه

هنگامی که جریان الکتریکی به درون نمونه مورد نظر (سنگ یا زمین) تزریق شود، ناحیه مطلوب باردار و با گذشت زمان پتانسیل معین V_0 در آن ایجاد می شود. حال با قطع جریان الکتریکی، ابتدا یک آفت ناگهانی به اندازه V در پتانسیل V_0 ایجاد و ولتاژ $V_p = V_0 - V$ حاصل می شود که به صورت تدریجی شروع به فروپاشی می کند. پایش ولتاژ روی نمونه با الکترودهای قطبش ناپذیر، واهلش مشخصی را با مفهوم زمان واهلش (relaxation time)، که معمولاً بین چند میلی ثانیه تا چند هزار ثانیه است، نمایش می دهد (شلومبرگر، ۱۹۲۰؛ سیگل و همکاران، ۱۹۹۷). این پدیده «قطبش القایی» (IP) نامیده می شود (شکل ۱). در گذشته از قطبش القایی بیشتر برای تعیین موقعیت کانه های معدنی استفاده شده است (مادِن و گُنتول، ۱۹۶۷). از آنجا که اندازه گیری های قطبش القایی نسبت به خواص خازنی بسامد کم سنگ ها و خاک ها حساس هستند و این خواص مرتبط با ویژگی های سطح تماس کانی و الکترولیت در محیط متخلخل اند (اسلیتر و لزمیس، ۲۰۰۲)، به مرور زمان، این اندازه گیری ها در دیگر زمینه ها نیز به

کار رفته است؛ به طوری که امروزه این روش به نحوی گسترده در پی جویی های معدنی، نفتی، پتروفیزیکی، هیدروژئوفیزیکی و زیست محیطی به کار می رود (کِمنا و همکاران، ۲۰۰۰؛ بینلی و همکاران، ۲۰۰۵؛ اسلیتر، ۲۰۰۷؛ قُربانی و همکاران، ۲۰۰۹؛ اُرژکو و همکاران، ۲۰۱۱؛ ریان و همکاران، ۲۰۱۲).

اندازه گیری های قطبش القایی در گذشته به علت مشکلات فنی، اغلب در حوزه زمان صورت گرفته است. پلتون و همکاران (۱۹۷۸) با اندازه گیری و بررسی رخنمون های کانی سازی سولفیدی اثبات کردند که اندازه گیری ها در حوزه بسامد (قطبش القایی طیفی) اطلاعات کامل تری نسبت به برداشت در حوزه زمان به دست می دهند. در این روش جریان الکتریکی متناوب در چندین بسامد متفاوت به درون زمین (یا نمونه سنگ) فرستاده و پاسخ قطبش القایی به صورت منحنی های دامنه و فاز در این طیف از بسامدها ثبت می شود. در حوزه بسامد، رسانایی ظاهری مواد متخلخل به صورت یک عدد مختلط $(\omega) \sigma^*$ نوشته می شود:



شکل ۱. منحنی واپاشی در اندازه گیری های قطبش القایی در حوزه زمان بعد از تزریق تپ (پالس) جریان الکتریکی با قطبش متناوب. بلافاصله پس از قطع جریان، پتانسیل اولیه (V) به طور ناگهانی از پتانسیل کل اندازه گیری شده (V_0) در طول تزریق جریان حذف می شود و ولتاژ اضافی (V_p) حاصل می شود، که با گذشت زمان به تدریج دچار فروپاشی می شود.

وارون‌سازی پارامترهای مدل کول-کول به کار بردند. این الگوریتم بسیار زمان‌بر است و در تکرارهای زیاد همگرا می‌شود، همچنین نیاز به حافظه بسیار زیادی دارد. سپس قُرَبانی و همکاران (۲۰۰۷) یک مدل بیزی را برای وارون‌سازی پارامترهای تک کول-کول با استفاده از داده‌های قطبش القایی در حوزه زمان و بسامد توسعه دادند. آنها با استفاده از یک روش انتگرال‌گیری عددی روی شبکه‌ای منظم، تابع چگالی احتمال پسین حاشیه‌ای هریک از پارامترهای کول-کول را به دست آوردند. سپس با بررسی روی داده‌های مصنوعی و آزمایشگاهی قطبش القایی طیفی اثبات کردند که مدل بیزی می‌تواند برآوردهای خوبی از تابع چگالی احتمال حاشیه‌ای هر پارامتر یا هر جفت پارامتر ناشناخته ایجاد کند و با استفاده از این برآوردها رفتار ذاتی پارامترها را تشخیص دادند و از شکل تغییر یافته این پارامترها در فرایند وارون‌سازی استفاده کردند. اما برای مدل چند کول-کول ابعاد فضای پارامترهای ناشناخته وسیع است، بنابراین استفاده از این روش برای به دست آوردن نمونه‌های زیاد از تابع توزیع پسین مشکل است.

چن و همکاران (۲۰۰۸) با استفاده از استنباط بیزی و نمونه‌برداری گیبس، داده‌های قطبش القایی طیفی را برای پارامترهای مدل دو کول-کول وارون‌سازی کردند. آنها با مقایسه این روش و روش خطی گاوس - نیوتن دریافتند که روش‌های وارون‌سازی غیرخطی مانند بیزی، اطلاعات جهان‌شمولی‌تری از قبیل تابع توزیع حاشیه‌ای برای پارامترهای ناشناخته عرضه می‌کند، بنابراین می‌توان برآوردهای بهتر و قیدهای احتمالاتی محکم‌تری به دست آورد. در نمونه‌برداری گیبس احتمال پذیرش هر نمونه حتی نامناسب، یک است، در نتیجه همه نمونه‌ها را بررسی می‌کند، استفاده از این روش نیز در عمل برای به دست آوردن نمونه‌های زیاد از تابع توزیع پسین برای مدل چند

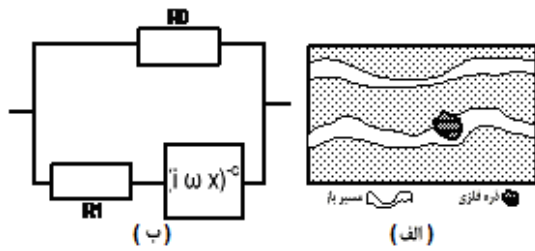
$$\sigma^*(\omega) = \frac{1}{\rho^*(\omega)} = \sigma'(\omega) + j\sigma''(\omega), \quad (1)$$

که $\rho^*(\omega)$ مقاومت ویژه مختلط مواد، ω بسامد زاویه‌ای جریان، $j^2 = -1$ ، σ' و σ'' به ترتیب مولفه‌های حقیقی و مجازی رسانایی هستند.

در میان مدل‌های موجود، مدل کول-کول متداول‌ترین مدل برای برآورد ویژگی‌های زیرسطحی متغیر در تماس کانی‌های فلزی، سنگ‌ها و خاک‌ها با استفاده از داده‌های قطبش القایی طیفی است (پلتون و همکاران، ۱۹۷۸؛ کمن، ۲۰۰۰؛ اسلیتر و لزمس، ۲۰۰۲). پلتون و همکاران (۱۹۷۸) با اعمال مدل کول-کول روی داده‌های قطبش القایی طیفی و بازیابی پارامترهای این مدل، به بررسی خواص کانی‌ها پرداختند. آنها روابطی بین پارامترهای کول-کول و خواص کانی‌سازی در مناطق گوناگون معدنی شامل عیار، اندازه ذرات کانی در سنگ، توزیع اندازه دانه‌ها به دست آوردند.

تاکنون تحقیقات گسترده‌ای در زمینه وارون‌سازی پارامترهای کول-کول در دو حوزه زمان و بسامد صورت گرفته است که اکثر آنها روش‌های وارون‌سازی خطی براساس کمترین مربعات خطا هستند (پلتون و همکاران، ۱۹۸۴؛ جاگار و فل، ۱۹۸۸؛ کمن، ۲۰۰۰؛ سیانگ و همکاران، ۲۰۰۱). این روش‌ها از مشتقات مدل پیشرو استفاده می‌کنند. از جمله محدودیت‌های روش‌های کمترین مربعات خطا، درگیر شدن در کمینه‌های محلی و وابسته بودن به انتخاب مقدار نقطه شروع است و این در صورتی است که پیدا کردن مقادیر شروع مناسب کار دشوار و گاهی غیرممکن است. از طرف دیگر اگر مسئله وارون‌سازی، غیرخطی باشد، جواب نایکتا است و اگر یک توزیع احتمال پسین نرمال از پارامترهای کول-کول نباشد، رهیافت بهینه‌سازی نمی‌تواند مقادیر صحیحی را برآورد کند.

کائو و همکاران (۲۰۰۵) الگوریتم ژنتیک را برای



شکل ۲. (الف) سازوکار قطبش القایی الکترونی ایجاد شده در اثر وجود ذره فلزی در محیط متخلخل (با تغییر از پلتون و همکاران، ۱۹۷۸). (ب) مدار RC معادل برای سازوکار قطبش القایی الکترونی (پلتون و همکاران، ۱۹۷۸). $(i\omega X)^C$ امپدانس مختلط فصل مشترک ذره فلزی با الکترولیت، C ثابت بسامدی، R_0 و R_1 به ترتیب مطابق با مقاومت اهمی مسیره های باز و مسدود موجود در فضای متخلخل سنگ هستند.

در این مدار معادل، عبارت $(j\omega X)^C$ امپدانس مختلط فصل مشترک کانی معدنی با الکترولیت را بیان می کند، که در آن C ثابت بسامدی است. R_0 و R_1 به ترتیب مطابق با مقاومت اهمی مسیره های باز و مسدود موجود در فضای متخلخل سنگ هستند. عبارت $(j\omega X)^C$ به صورت سری با R_1 ، مسیره های مسدود شده با کانی های معدنی را توصیف می کند. طبق این مدل مقاومت ویژه یک تخلخل سنگ به صورت رابطه (۲) بیان می شود (کول و کول، ۱۹۴۱؛ پلتون و همکاران، ۱۹۷۸):

$$\rho^*(\omega) = \frac{1}{\sigma^*(\omega)} = \rho_0 \left[1 - m \left(1 - \frac{1}{1 + (j\omega\tau)^c} \right) \right] \quad (2)$$

که ρ_0 ($\sigma_0 = 1/\rho_0$) مقاومت ویژه الکتریکی (رسانایی الکتریکی) مجانب به سمت بسامد صفر و برحسب اهمتر (زیمنس بر متر)، $m = (\rho_0 - \rho_\infty)/\rho_0 = (1 - \sigma_0)/\sigma_\infty$ ، قابلیت بارپذیری و بدون بُعد است که بزرگی قطبش حاصل از افزایش اختلاف فاز بین جریان و ولتاژ را توصیف می کند. σ_∞ و ρ_∞ به ترتیب رسانایی و مقاومت ویژه الکتریکی در بسامدهای زیاد، ω و τ به ترتیب بسامد زاویه ای جریان و $\sqrt{-1}$ هستند. ثابت زمانی τ مدت زمان لازم برای واهلش در حوزه زمان را بیان می کند و همچنین با این پارامتر می توان موقعیت بسامدی فاز بیشینه ($f_{\text{peak}} = 1/2\pi\tau(1-m)^{0.5c}$) را نشان داد که برحسب ثانیه

کول-کول پیچیده بوده و از نظر زمان مقرون به صرفه نیست.

هدف این مقاله توسعه یک رهیافت وارون سازی بهینه برای پارامترهای چند کول-کول از داده های قطبش القایی طیفی است که مانند روش های سنتی کمترین مربعات خطا به مقادیر اولیه حساس نباشد، با بررسی قسمت های مختلف فضای پارامترها درگیر کمینه های محلی نشود و همچنین ضمن بهره گیری از روش های غیرخطی مانند بیزی، پیچیده و زمان بر نباشد و برای نمونه گیری ها و پارامترهای زیاد قابل استفاده باشد.

به همین منظور روش بیزی با الگوریتم نمونه برداری شبیه سازی بازپخت برای وارون سازی پارامترهای مدل دو کول-کول از داده های قطبش القایی طیفی به کار گرفته شده است. این روش در محیط نرم افزار مت کب برنامه نویسی شده و روی داده های مصنوعی و آزمایشگاهی قطبش القایی طیفی اعمال، و نتایج وارون سازی روش شبیه سازی بازپخت با نتایج به دست آمده از روش نمونه برداری گیبس مقایسه شده است.

۲ مدل کول-کول (Cole-Cole)

مدل کول-کول را کول و کول (۱۹۴۱) به شکلی ابتدایی برای پیش بینی رفتار دی الکتریک مختلط پیشنهاد کردند. سپس از آن در حکم یک مدل واهلش ساده به منظور تطبیق بر مجموعه ای از مقاومت ویژه های الکتریکی مختلط آزمایشگاهی استفاده شد (کول و کول، ۱۹۴۱؛ مادن و گنتول، ۱۹۶۷؛ پلتون، ۱۹۷۷). این مدل امروزه به طور گسترده برای توصیف مقاومت ویژه الکتریکی پخش (diffusion) مشاهده شده در داده های صحرائی نواحی مرتبط با کانی فلزی و برآورد رسانایی هیدرولیکی رسوبات استفاده می شود. مدل کول-کول را می توان با یک مدار RC ساده نمایش داد (شکل ۲).

سنگ یا اثرات جفت‌شدگی الکترومغناطیس در اندازه‌گیری‌ها ناشی می‌شود، از حاصل جمع چند رابطه کول-کول استفاده کرد:

$$\rho^*(\omega) = \rho_0 \left[1 - \sum_{n=1}^N m_n \left(1 - \frac{1}{1 + (j\omega\tau_n)^{c_n}} \right) \right], \quad (5)$$

که N تعداد مدل‌های کول-کول است و مقدار معمول آن بسته به تعداد مقیاس‌های واهلش، راهکارهای حذف اثرات جفت‌شدگی و بازیابی پارامترهای کول-کول بین ۱ تا ۳ است. این مدل را می‌توان برای طیفی از بسامدها به صورت مولفه‌های حقیقی (رابطه (۶)) و مجازی (رابطه (۷)) تفکیک کرد (کائو و همکاران، ۲۰۰۵):

$$\operatorname{Re}(\rho^*(\omega_k)) = \rho_0 \left[1 - \sum_{n=1}^N m_n \left(1 - \frac{R_n}{R_n^2 + I_n^2} \right) \right] \quad (6)$$

$$\operatorname{Im}(\rho^*(\omega_k)) = -\rho_0 \sum_{n=1}^N m_n \left(\frac{I_n}{R_n^2 + I_n^2} \right) \quad (7)$$

$$\omega_k = 2\pi f_k, \quad (k=1, 2, 3, \dots, K) \quad (8)$$

$$R_n = (\omega_k \tau_n)^{c_n} \cos\left(\frac{c_n \pi}{2}\right) + 1 \quad (9)$$

$$I_n = (\omega_k \tau_n)^{c_n} \sin\left(\frac{c_n \pi}{2}\right) \quad (10)$$

که K تعداد بسامدهایی است که اندازه‌گیری‌های قطبش القایی در آنها صورت گرفته است و f_k بسامد k ام است. در این پژوهش از مدل چند کول-کول با $n=2$ استفاده شده است،

$$\rho^*(\omega_k) = \rho_0 \left[1 - \sum_{n=1}^2 m_n \left(1 - \frac{1}{1 + (j\omega_k \tau_n)^{c_n}} \right) \right]. \quad (11)$$

۳ نظریه بیزی

با عرضه وارون‌سازی بیزی از سوی ترنٲلا و وکت (۱۹۸۲a,b)، این رویکرد به‌طور گسترده برای وارون‌سازی داده‌های ژئوفیزیکی و هیدروژئوفیزیکی به‌کار گرفته شد. رهیافت پیش‌گفته مناسب‌ترین روش برای اجرای مسائل وارون‌سازی غیرخطی است (ترنٲلا، ۱۹۸۷؛ موزگارد و ترنٲلا، ۱۹۹۵؛ اسکیلز و اسنیدر، ۱۹۹۷).

است. c ثابت بسامدی و بدون بُعد است که میزان وابستگی مقاومت ویژه الکتریکی به بسامد را مشخص می‌کند.

ارتباط رابطه (۲) و شکل ۲ را می‌توان به صورت زیر نوشت:

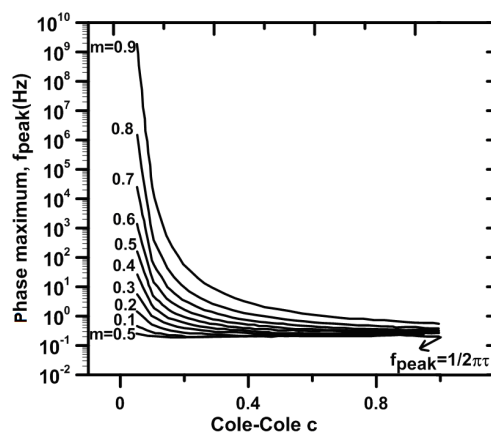
$$m = 1 / \left(1 + \frac{R_1}{R_0} \right), \quad (3)$$

$$\tau = X (R_0 + R_1)^{1/c}, \quad (4)$$

در رابطه کول-کول، برای یک بسامد ثابت، با افزایش بارپذیری m اختلاف فاز افزایش می‌یابد. اگر مقدار c بزرگ باشد، برای بارپذیری‌های متفاوت، یکسان است (شکل ۳).

شکل ۳ نمودار f_{peak} را در مقابل c برای مقادیر متفاوت m نشان می‌دهد. تغییر در مقدار ثابت زمانی باعث تغییر در f_{peak} مطابق رابطه $\tau \approx \frac{1}{2\pi f_{\text{peak}}}$ می‌شود (وتهاالا، ۱۹۹۷).

در سنگ‌هایی که کانی‌سازی صورت گرفته است، عموماً m و τ c به ترتیب به مقدار، ابعاد و توزیع اندازه عوامل بارپذیر بستگی دارد (پلتون و همکاران، ۱۹۷۸؛ کلین و سیل، ۱۹۸۲؛ وتهاالا، ۱۹۹۷؛ لو و ژانگ، ۱۹۹۸).



شکل ۳. وابستگی بسامد در بیشینه اختلاف فاز $f_{\text{peak}} = 1 / 2\pi\tau(1-m)^{0.5c}$ به ثابت بسامدی (c) به‌ازای مقادیر متفاوت m شارزبیلیته در مدل کول-کول (با تغییر از وتهاالا، ۱۹۹۷ a)

کیمنا (۲۰۰۰) برای تحلیل طیف‌های فاز با بیش از یک محدوده پراکندگی، که معمولاً از چندگانگی رفتار

و

$$S(\theta) = \left[\sum_i \frac{(d_i^{pre} - d_i^{obs})^2}{s_i^2} \right], \quad (15)$$

که d_i^{pre} داده های پیش بینی شده از مدل پیشرو $G(\theta)=d^{pre}$ ، d_i^{obs} داده های اندازه گیری شده و s_i^2 واریانس خطاهای اندازه گیری است. با به کار بردن مولفه حقیقی و مجازی مقاومت ویژه الکتریکی مختلط، $S(\theta)$ به صورت رابطه (۱۶) در می آید:

(۱۶)

$$S(\theta) = \frac{1}{s_{Re}^2} \sum_k \left[\text{Re}(\rho_{pre}(\omega_k)) - \text{Re}(\rho_{obs}(\omega_k)) \right]^2 + \frac{1}{s_{Im}^2} \sum_k \left[\text{Im}(\rho_{pre}(\omega_k)) - \text{Im}(\rho_{obs}(\omega_k)) \right]^2, (k=1,2,3,\dots,K),$$

که s_{Re}^2 و s_{Im}^2 واریانس خطاهای اندازه گیری در بخش حقیقی و مجازی مقاومت ویژه الکتریکی مختلط، ρ_{pre} و ρ_{obs} به ترتیب مقاومت ویژه الکتریکی مختلط پیش بینی شده از مدل و مقاومت ویژه مختلط اندازه گیری شده و K تعداد بسامدهایی است که اندازه گیری های قطبش القایی در آنها صورت گرفته است.

۳-۲ اطلاعات پیشین (A priori information)

اطلاعات پیشین، به صورت آگاهی ما از پارامترهای مدل قبل از اندازه گیری ها تعریف می شود. در این پژوهش فرض شده است که هیچ آگاهی قبلی در مورد پارامترها موجود نیست (noninformative prior)، پس پارامترها روی محدوده مورد نظر، توزیع یکنواخت پیدا می کنند. با توجه به اینکه پارامترها مستقل از یکدیگر فرض شده اند، بنابراین تابع چگالی احتمال پیشین به صورت رابطه (۱۷) داده می شود:

$$f(\theta) = f(\rho_0, m_1, m_2, \tau_1, \tau_2, c_1, c_2) = f(\rho_0) f(m_1) f(m_2) f(\tau_1) f(\tau_2) f(c_1) f(c_2), \quad (17)$$

با توجه به اینکه تابع توزیع پیشین پارامترها، یکنواخت در نظر گرفته شده است، لذا پارامترها باید به صورتی انتخاب

برای استفاده ساده تر از روش بیزی فرضیاتی مطرح شده است (فُربانی و همکاران، ۲۰۰۷). این فرضیات عبارتند از: (۱) داده های اندازه گیری شده و پارامترهای ناشناخته مدل، که هر کدام مستقل فرض شده اند. رابطه میان داده ها و پارامترهای مدل به صورت زیر نوشته شده است:

$$d = G(\theta), \quad (12)$$

که بردار داده ها، $\theta = [\rho_0, m_1, m_2, \tau_1, \tau_2, c_1, c_2]$ بردار پارامترهای ناشناخته مدل دو کول-کول و G تابعی است که مدل پیشرو را توصیف می کند. (۲) رابطه کول-کول به منزله قانون فیزیکی فرض شده است، بنابراین توزیع احتمال آن تابع دیراک است. (۳) اندازه گیری ها دارای توزیع نرمال فرض شده اند. این فرض مادامی صحیح است که نوفه موثر بر داده ها تصادفی باشد و از اعمال اصل برهم نهی نتیجه شود (تَرَنُتلا و وِلت، ۱۹۸۲a,b).

در استنباط بیزی، یک تابع چگالی احتمال پسین مرتبط با داده های دارای توزیع نرمال، از ترکیب تابع چگالی احتمال پیشین پارامترهای مدل و مدل پیشرو ایجاد و به صورت رابطه (۱۳) داده می شود (تَرَنُتلا و وِلت، ۱۹۸۲a,b):

$$f_p(\theta) \propto L(\theta) \times f_a(\theta), \quad (13)$$

که $f_p(\theta)$ تابع چگالی احتمال پسین، $f_a(\theta)$ تابع چگالی احتمال پیشین و $L(\theta)$ تابع درست نمایی است.

۳-۱ تابع درست نمایی (likelihood function)

تابع درست نمایی اختلاف بین داده های اندازه گیری شده و داده های پیش بینی شده از مدل است. در اینجا توزیع داده ها تقریباً نرمال فرض شده اند، پس توزیع خطاهای اندازه گیری نیز نرمال است. حال تابع درست نمایی به صورت رابطه (۱۴) است (موزگارد و تَرَنُتلا، ۱۹۹۵):

$$L(\theta) = \exp\left(-\frac{1}{2} S(\theta)\right) \quad (14)$$

۴ شبیه‌سازی بازپخت

شبیه‌سازی بازپخت یک روش جست‌وجوی فراابتکاری شناخته شده در زمینه الگوریتم‌های هوش مصنوعی است که اولین بار کرک پاتریک و همکارانش (۱۹۸۳) آن را معرفی کردند و تا امروز در حکم یک روش بهینه‌سازی و نمونه‌برداری، مورد توجه پژوهشگران قرار داشته است. نکته حائز اهمیت این روش، فراهم ساختن راهکاری است که بتوان از نقاط بهینه محلی گریخت و با پذیرش جواب‌های بدتر با یک احتمال مشخص، به نقطه بهینه کلی دست یافت.

مهم‌ترین خصوصیات الگوریتم شبیه‌سازی بازپخت عبارت است از: اشغال حافظه بسیار کم (برخلاف الگوریتم ژنتیک که مصرف زیادی دارد)، پیاده‌سازی و زمان اجرای کم نسبت به الگوریتم‌های موجود (مانند نمونه‌برداری گیس) (جیمِن و جیمِن، ۱۹۸۴؛ دولفو، ۱۹۹۶)، توانایی گذر از بهینه محلی به علت وجود روند تصادفی.

فرایند فیزیکی بازپخت ابتدا شامل حالت اولیه‌ای از دستگاه ترمودینامیکی موردنظر با سطح انرژی E_0 و دمای T_0 است. سپس دستگاه دگرگون، و اختلاف سطح انرژی حالت جدید با حالت اولیه، dE ، محاسبه می‌شود. اگر تغییری در سطح انرژی منفی باشد، حالت ثانویه دستگاه با احتمال $P=1$ پذیرفته می‌شود. در غیر این صورت، حالت جدید دستگاه با احتمال داده شده با فاکتور بولتسمان $P=\exp(-dE/T)$ مورد پذیرش قرار می‌گیرد (مِتروپولیس و همکاران، ۱۹۵۳). این فرایند تا زمانی تکرار می‌شود که نمونه‌برداری آماری مطلوبی برای دمای دستگاه جاری حاصل شود. سپس دما کاهش می‌یابد و دوباره فرایند تکراری پیش‌گفته اجرا می‌شود تا اینکه به حالت انجماد $(T=0)$ برسد. دولفو (۱۹۹۶) را $T_i = \Gamma / \log(i+1)$ به منزله دمای دستگاه در هر مرحله، برای Γ که به اندازه کافی بزرگ باشد، در نظر گرفت. اگر این دما به صورت کنترل

شوند که شرط فوق را برآورده کنند. لذا با تغییر متغیر مناسب پارامترها می‌توان به این هدف رسید (قربانی و همکاران، ۲۰۰۷). پارامترهای جدید با تغییر متغیر مناسب در رابطه (۱۸) آورده شده است (قربانی و همکاران، ۲۰۰۷):

$$\begin{cases} m \rightarrow m' \equiv \log\left(\frac{m}{1-m}\right) \\ \rho_0 \rightarrow \rho'_0 \equiv \log(\rho_0) \\ \tau \rightarrow \tau' \equiv \log(\tau) \end{cases} \quad (18)$$

و c بدون تغییر مانده است. بنابراین با توجه به تغییر متغیرهای صورت گرفته در رابطه (۱۸) بردار θ^* ، $\theta^* = \left[\log \rho_0, \log \frac{m_1}{1-m_1}, \log \frac{m_2}{1-m_2}, \log \tau_1, \log \tau_2, c_1, c_2 \right]^T$ بردار جدید پارامترهای ناشناخته مدل دو کول-کول (رابطه (۱۱)) است. در پژوهش حاضر به منظور اجرای محاسبات، از بردار θ^* استفاده شده است.

۳-۳ نمونه‌گیری از تابع توزیع پسین (a posteriori distribution)

در این مقاله برآورد پارامترهای ناشناخته با نمونه‌برداری‌های متعدد از تابع چگالی احتمال پسین به روش‌های نمونه‌گیری مونت کارلوی زنجیره مارکوف (MCMC) به دست آمده است (گیوک، ۱۹۹۲؛ موزگارد و ترنتلا، ۱۹۹۵). این روش‌ها سعی در شبیه‌سازی نمونه‌برداری مستقیم از تابع‌های توزیع پیچیده دارند و به این دلیل MCMC نامیده می‌شوند که نمونه بعدی را از نمونه قبلی به‌طور تصادفی انتخاب می‌کنند و این خود یک زنجیره مارکوف را به وجود می‌آورد. در واقع انتقال احتمالات بین نمونه‌ها فقط تابعی از آخرین نمونه است. نمونه‌برداری گیس و شبیه‌سازی بازپخت از کاربردی‌ترین روش‌های مونت کارلوی زنجیره مارکوف هستند.

نمونه از تابع چگالی احتمال پسین استفاده شده است. در اینجا برای درک بهتر روش نمونه برداری، صورت دیگری از استنباط بیزی را برای رابطه دو کول-کول می توان نوشت (چن و همکاران، ۲۰۰۸):

$$f(\theta^*|\rho^*) \propto f(\rho^*|\theta^*) \times f(\theta^*), \quad (20)$$

که $f(\theta^*|\rho^*)$ تابع چگالی احتمال پسین، $f(\theta^*)$ تابع چگالی احتمال پیشین و $f(\rho^*|\theta^*)$ تابع درست نمایی است. در اینجا برای ساده تر کردن فضای پارامترها می توان بردار پارامترها، θ^* ، را به صورت $\theta^* = [\rho_0, \mathbf{m}, \boldsymbol{\tau}, \mathbf{c}]$ نشان داد که $\mathbf{m} = [\log(m_1/(1-m_1)), \log(m_2/(1-m_2))]$ و $\boldsymbol{\tau} = [\log\tau_1, \log\tau_2]$ است.

مراحل اصلی الگوریتم نمونه برداری گیبس برای متغیر تصادفی θ^* با تابع چگالی احتمال $f(\theta^*|\rho^*)$ رابطه (۲۰) به صورت زیر است (چن و همکاران، ۲۰۰۸):

۱. مقادیر اولیه برای ρ_0 ، \mathbf{m} ، $\boldsymbol{\tau}$ و \mathbf{c} به صورت $\rho_0(0)$ ، $\mathbf{m}(0)$ ، $\boldsymbol{\tau}(0)$ و $\mathbf{c}(0)$ تعیین می شود، سپس $t=1$ قرار داده می شود.

۲. ترسیم نمونه جدید $\rho_0^{(t)}$ از توزیع شرطی:

$$f(\rho_0|\mathbf{m}^{(t-1)}, \boldsymbol{\tau}^{(t-1)}, \mathbf{c}^{(t-1)})$$

۳. ترسیم نمونه جدید $\mathbf{m}^{(t)}$ از توزیع شرطی:

$$f(\mathbf{m}|\rho_0^{(t)}, \boldsymbol{\tau}^{(t-1)}, \mathbf{c}^{(t-1)})$$

۴. ترسیم نمونه جدید $\boldsymbol{\tau}^{(t)}$ از توزیع شرطی:

$$f(\boldsymbol{\tau}|\rho_0^{(t)}, \mathbf{m}^{(t)}, \mathbf{c}^{(t-1)})$$

۵. ترسیم نمونه جدید $\mathbf{c}^{(t)}$ از توزیع شرطی:

$$f(\mathbf{c}|\rho_0^{(t)}, \mathbf{m}^{(t)}, \boldsymbol{\tau}^{(t)})$$

۶. حال $t = t + 1$ قرار داده می شود. اگر $t > Z$ (که Z بیشینه تعداد تکرار است) این چرخه پایان می یابد، در غیر این صورت به مرحله ۲ برگشت داده می شود.

از معایب عمده این روش، زمان بر بودن آن است، چرا که بر خلاف روش شبیه سازی بازپخت، همه همسایگی ها را با احتمال $P_{\text{acceptance}} = 1$ می پذیرد (نیل ۱۹۹۳). ولی این عیب در روش شبیه سازی بازپخت با گذاشتن شرط کاهش سطح انرژی رفع شده است.

شده و به آهستگی سرد شود، در هر تکرار i ، دستگاه به تعادل می رسد و انرژی آن کمینه می شود. کاهش سطح انرژی و دما در مسئله بازپخت، به ترتیب هم ارز کاهش مقدار تابع هدف و پارامتر مورد بررسی در مسائل کمینه سازی است.

در مقاله حاضر $S(\theta^*)$ (رابطه (۱۵)) در حکم مقدار تابع هدف در هر همسایگی از پارامترهای جواب مطرح می شود. همسایگی جدید با استفاده از تابع احتمالی داده شده در رابطه (۱۹) پذیرفته می شود (میتروپولیس و همکاران، ۱۹۵۳):

(۱۹)

$$P_{\text{acceptance}} = \begin{cases} 1 & \text{if } S_i(\theta_{\text{new}}^*) \leq S_i(\theta_{\text{old}}^*) \\ \exp\left(-\frac{\Delta S_i}{T_i}\right) & \text{if } S_i(\theta_{\text{new}}^*) > S_i(\theta_{\text{old}}^*) \end{cases}$$

θ_{new}^* و θ_{old}^* به ترتیب بردار پارامترها پذیرفته شده جاری و بردار پارامترها پیشنهادی جدید و i تعداد تکرار است. در این پژوهش Γ و i در رابطه $T_i = \Gamma / \log(i+1)$ ، مقادیر $\Gamma = 10^{-5}$ و $i = 500000$ را می گیرند.

۱-۴ پایش همگرایی

سه زنجیره با مقادیر شروع متفاوت اجرا شد که در هر زنجیره τ تکرار اتفاق افتاد. در اینجا از معیار «امتیاز کاهش مقیاس» (scale reduction score) استفاده شد (ژلمن و روبین، ۱۹۹۲). با این رویکرد، اگر امتیاز کاهش مقیاس کمتر از ۱.۲ باشد، زنجیره مارکوف همگرا شده است، در غیر این صورت به اجراهای بیشتری نیاز است (چن و همکاران، ۲۰۰۸).

۵ نمونه برداری گیبس

در این مرحله، روش نمونه برداری گیبس، که چن و همکاران (۲۰۰۸) آن را توسعه داده اند، به منظور برآزش مدل دو کول-کول برای داده های قطبش القایی طیفی بازسازی می شود. در واقع از این رویکرد برای ترسیم

۶ وارون‌سازی داده‌های مصنوعی

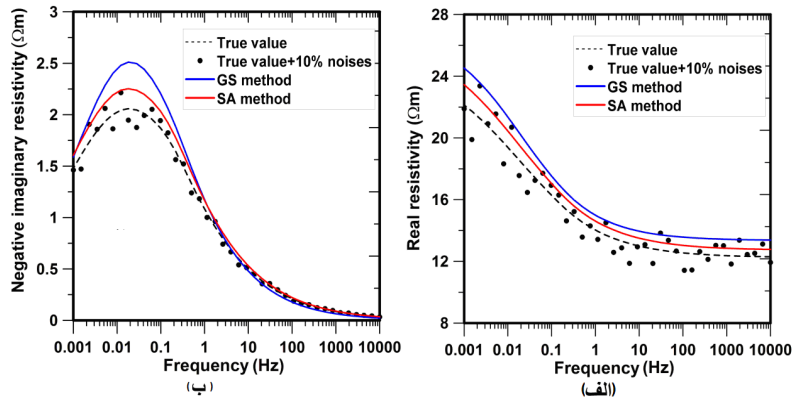
در این مرحله بازیابی پارامترهای کول-کول با استفاده از روش بیزی و نمونه‌برداری شبیه‌سازی بازپخت برای داده‌های قطبش القایی طیفی مصنوعی مورد ارزیابی قرار گرفته است. پارامترهای مدل کول-کول مصنوعی مشابه مدلی است که کائو و همکاران (۲۰۰۵) و چن و همکاران (۲۰۰۸) استفاده کرده‌اند (جدول ۱). دامنه پارامترهای ρ_0 ، m ، τ و c مدل کول-کول در اینجا به ترتیب (۱ تا ۱۰۰۰) اهم‌متر، $(10^{-5}$ تا ۱)، $(10^{-5}$ تا 10^5) ثانیه و $(10^{-1}$ تا ۱) است. برای تولید داده‌های قطبش القایی طیفی مصنوعی از محدوده بسامدی به کار رفته چن و همکاران (۲۰۰۸) استفاده شده است. این محدوده، بسامدی بین ۱ میلی‌هرتز تا ۱۰ کیلوهرتز به دست می‌دهد، که دامنه بسامدی رایج برای برداشت داده‌های قطبش القایی طیفی است. سپس با استفاده از رابطه کول-کول، فاز و دامنه داده‌های مقاومت ویژه الکتریکی مختلط تولید می‌شود. برای تطابق بهتر با واقعیت، داده‌ها با ۱۰٪ نوفه با توزیع نرمال همراه شدند. حال این داده‌ها با استفاده از دو روش شبیه‌سازی بازپخت و نمونه‌برداری گیبس وارون‌سازی شده‌اند. جدول ۱ پارامترهای بازیابی شده از این داده‌ها را با استفاده از اجرای برنامه‌های پیش‌گفته نشان می‌دهد. لازم به ذکر

است که این وارون‌سازی‌ها به‌ازای سه دسته مقادیر اولیه متفاوت شبیه آنچه چن و همکاران (۲۰۰۸) استفاده کردند، اجرا شده است، که به‌ازای همه مقادیر، جواب‌های تقریباً یکسانی شبیه آنچه در جدول ۱ دیده می‌شود، به‌دست آمده است. پس، از میانگین آنها در فرایند وارون‌سازی استفاده شده است.

سپس با جای‌گذاری پارامترهای بازیابی شده در رابطه دو کول-کول، مقاومت ویژه‌های مختلط حقیقی و مجازی مربوط به این پارامترها در بسامدهای پیش‌گفته به‌دست آمد. در شکل ۴-الف و شکل ۴-ب به ترتیب مقادیر مثبت مقاومت ویژه الکتریکی حقیقی و مقادیر منفی مقاومت ویژه الکتریکی مجازی نسبت به مقادیر بسامد برای هر دو روش ترسیم شده است. شکل ۵ نمودار نایکویست، مقادیر منفی مقاومت ویژه مجازی نسبت به مقادیر مثبت مقاومت ویژه حقیقی، را نشان می‌دهد. همان‌طور که در شکل‌های ۴ و ۵ قابل مشاهده است، نمودارهای به‌دست آمده از روش شبیه‌سازی بازپخت، نسبت به روش نمونه‌برداری گیبس، به نمودار داده‌های صحیح نزدیک‌ترند و شبیه‌سازی در زمان ۵۰ ثانیه صورت گرفته است، در صورتی که روش گیبس با چنین دقتی به ۶ دقیقه زمان نیاز دارد.

جدول ۱. پارامترهای کول-کول بازیابی شده از فرایند وارون‌سازی داده‌های قطبش القایی طیفی با نوفه ۱۰٪ به روش شبیه‌سازی بازپخت و نمونه‌برداری گیبس در زمان ۵۰ ثانیه.

τ_2	c_2	m_2	ρ_0	τ_1	c_1	m_1	پارامترهای مدل
۱	۰.۹۸	۰.۰۱	۲۵.۰۰	۱۰.۰۰	۰.۴	۰.۵	پارامترهای حاصل از مدل مصنوعی (بدون نوفه)
۰.۰۰۰۱	۰.۱	۰.۱	۵	۰.۰۰۰۱	۰.۱	۰.۱	دسته اول مقادیر اولیه
۰.۱	۰.۴	۰.۴	۵۰	۰.۱	۰.۴	۰.۴	دسته دوم مقادیر اولیه
۱۰	۰.۶	۰.۶	۵۰۰	۱۰	۰.۶	۰.۶	دسته سوم مقادیر اولیه
۰.۹۹۹۹	۰.۹۷۹۹۹	۰.۰۰۹۷	۲۶.۵۰۳	۹.۹۹۷	۰.۴۰۵	۰.۵۱۰	پارامترهای بازیابی شده از مدل مصنوعی با ۱۰٪ نوفه توسط روش شبیه‌سازی بازپخت
۰.۸۷	۰.۹۹۹	۰.۰۰۶	۲۷.۰۴	۸.۵	۰.۴۵۰۳	۰.۵۳	پارامترهای بازیابی شده از مدل مصنوعی با ۱۰٪ نوفه توسط روش نمونه‌برداری گیبس



شکل ۴. الف) نمودار طیف مقاومت ویژه الکتریکی حقیقی. ب) نمودار طیف مقاومت ویژه الکتریکی مجازی برای داده های قطبش القایی طیفی مصنوعی بدون نوفه (خط چین)، با ۱۰٪ نوفه (دایره)، به دست آمده از وارون سازی با الگوریتم نمونه برداری شبیه سازی بازپخت (خط سرخ) و الگوریتم نمونه برداری گیبس (خط آبی).

صفحه سرامیکی متخلخل در یک انتهای ستون استفاده شود، که اجازه می دهد نمونه تحت فشار، حداکثر یک کیلو بار از حالت اشباع خارج شود. یک آرایه چهار الکترودی متشکل از دو الکتروود جریان (صفحات متخلخل برنزی با منافذ دارای قطر ۱۵ میکرومتر) و دو الکتروود پتانسیل (حلقه های نقره ای ثابت در شیارها، به فاصله ۱۰ سانتی متر) است (کیمنا و همکاران، ۲۰۰۵).

ابتدا این داده ها با استفاده از روش نمونه برداری شبیه سازی بازپخت برای مدل دو کول-کول وارون سازی گردید (جدول ۲). در این جا دامنه پارامترهای مدل کول-کول ρ_0 ، m ، τ و c به ترتیب (۱ تا ۱۰۰۰) اهم متر، 10^{-5} تا 10^{-1} ، 10^{-1} تا 10^1 ثانیه و (۰ تا ۱) است. همچنین مقادیر پارامترهای اولیه از میانگین سه دسته پارامتر اولیه در وارون سازی داده های مصنوعی استفاده شد. شکل ۶ نمودار نایکوئیست را نشان می دهد. همان طور که نقاط

۷ وارون سازی داده های قطبش القایی طیفی به دست آمده از نمونه ماسه سیلیسی

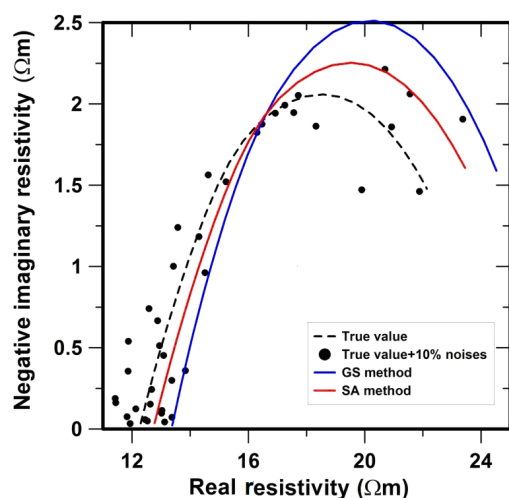
در اینجا از مجموعه داده های اندازه گیری آزمایشگاهی قطبش القایی طیفی روی نمونه های رسوبی غیر تحکیم یافته برای مقایسه عملکرد روش های شبیه سازی بازپخت و نمونه برداری گیبس برای برآورد پارامترهای کول-کول استفاده شده است. این داده ها (خط چین در شکل ۶) روی یک نمونه از سیلیس و ماسه، با اندازه دانه های ۱۲۵ تا ۲۵۰ میکرومتر و اشباع از محلول پتاسیم کلرید 0.0003 مولار، اندازه گیری شده است.

در این آزمایش طیف پاسخ امپدانس در محدوده بسامد ۱ میلی هرتز تا ۴۲ کیلو هرتز با یک دستگاه اندازه گیری با دقت 0.01 میلی رادیان در اندازه گیری اختلاف فاز حاصل شده است. یک نگهدارنده نمونه استوانه ای به طول ۳۰ سانتی متر و قطر داخلی ۶ سانتی متر به کار گرفته شده است (شکل ۷). ممکن است از یک

جدول ۲. پارامترهای کول-کول بازیابی شده از فرایند وارون سازی داده های قطبش القایی طیفی به دست آمده از اندازه گیری های آزمایشگاهی روی ماسه سیلیسی

به روش نمونه برداری گیبس و شبیه سازی بازپخت.

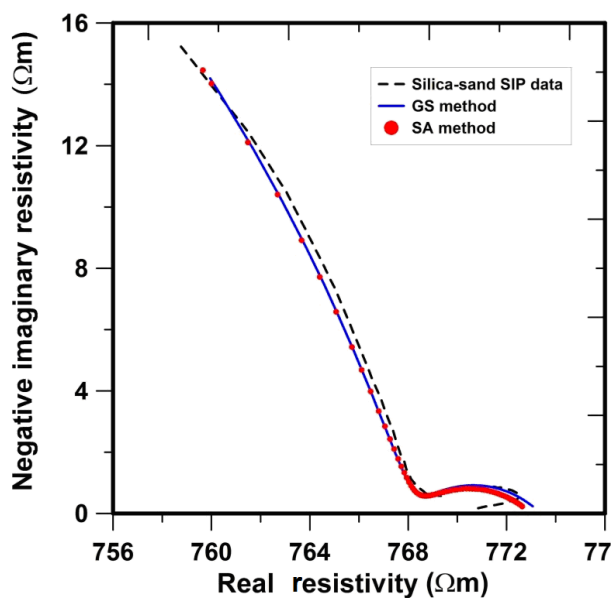
τ_1	c_2	m_2	ρ_0	τ_1	c_1	m_1	پارامترهای مدل
3.3×10^{-8}	۰.۷۳۲	۰.۶۷۴	۷۷۳.۲	۰.۱۰۶	۰.۴۲۵	۰.۰۰۶۷	پارامترهای بازیابی شده به روش شبیه سازی بازپخت
3.451×10^{-8}	۰.۷۳۶	۰.۶۷۱	۷۷۳.۳۳	۰.۱۰۷	۰.۴۲۳	۰.۰۰۶۹	پارامترهای بازیابی شده به روش نمونه برداری گیبس



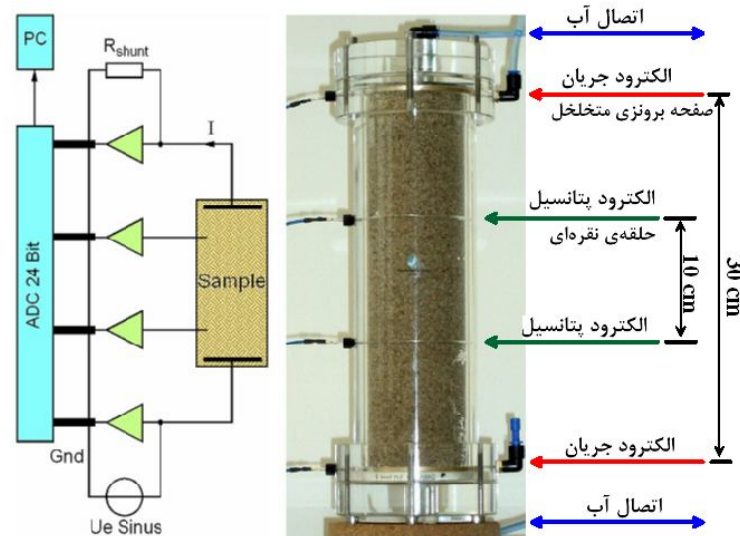
شکل ۵. نمودار نایکوئیست (مقاومت ویژه مجازی برحسب مقاومت ویژه حقیقی) برای داده‌های قطبش القایی طیفی مصنوعی بدون نوفه (خط چین)، با ۱۰٪ نوفه (دایره)، به دست آمده از وارون‌سازی با الگوریتم نمونه‌برداری شبیه‌سازی بازپخت (خط سرخ) و به دست آمده از وارون‌سازی با الگوریتم نمونه‌برداری گیبس (خط آبی).

مناسب به نظر می‌رسند، اما این پارامترها در زمان ۱۱ دقیقه حاصل شده‌اند، در صورتی که در روش شبیه‌سازی بازپخت به ۲ دقیقه زمان نیاز است.

سرخ در شکل ۶ مشخص می‌سازند، به نظر می‌رسد که پارامترهای کول-کول برآورد شده برای داده‌های قطبش القایی طیفی با نمونه‌برداری شبیه‌سازی بازپخت برازش مناسبی دارند. پارامترهای کول-کول به دست آمده از نمونه‌برداری گیبس نیز طبق منحنی آبی‌رنگ شکل ۶،



شکل ۶. نمودار نایکوئیست (مقاومت ویژه مجازی برحسب مقاومت ویژه حقیقی) برای داده‌های قطبش القایی طیفی واقعی (خط چین)، به دست آمده از وارون‌سازی با الگوریتم نمونه‌برداری شبیه‌سازی بازپخت (دایره سرخ) و به دست آمده از وارون‌سازی با الگوریتم نمونه‌برداری گیبس (خط آبی).



شکل ۷. طرحواره ای از دستگاه اندازه گیری با دقت ۰/۰۱ میلی رادیان، اندازه گیری اختلاف فاز و نگهدارنده نمونه (کما و همکاران، ۲۰۰۵).

۸ نتیجه گیری

از مقادیر اولیه مستقل اند و در فریندهای محلی درگیر نمی شوند. مزیت نمونه برداری با استفاده از الگوریتم شبیه سازی بازپخت نسبت به روش گیس این است که الگوریتم شبیه سازی بازپخت در زمان کم، ۵۰ ثانیه برای داده های مصنوعی با نوفه ۱۰٪ و ۲ دقیقه برای داده های آزمایشگاهی، جواب های دقیقی به دست می دهد. اما نمونه برداری گیس همه همسایگی ها را با احتمال $P_{acceptance}=1$ می پذیرد، لذا برای رسیدن به چنین دقتی به زمان بیشتری، یعنی ۶ دقیقه برای داده های مصنوعی با نوفه ۱۰٪ و ۱۱ دقیقه برای داده های آزمایشگاهی، نیاز است.

منابع

Binley, A., Slater, L. D., Fukes, M., and Cassiani, G., 2005, Relationship between spectral induced polarization and hydraulic properties of saturated and unsaturated sandstone: Water Resources Research, **41**, W12417.
Cao, Z., Chang, Y., and Luo, Y., 2005, Inversion study of spectral induced polarization based on improved genetic algorithm: Progress in Electromagnetics: Research Symposium (PIERS) Online, **1**, 266-270,

در پژوهش حاضر، روش استنباط بیزی با الگوریتم نمونه برداری شبیه سازی بازپخت برای وارون سازی پارامترهای مدل دو کول-کول از داده های قطبش القایی طیفی توسعه داده شد. تابع توزیع پیشین و تابع توزیع درست نمایی به ترتیب تابع توزیع یکنواخت و تابع توزیع نرمال خطاها فرض شد. بنابراین بردار پارامترها با $\beta = \left[\log \rho, \log \frac{m1}{1-m1}, \log \frac{m2}{1-m2}, \log \tau, \log c_1, \log c_2 \right]^T$ یک تغییر متغیر مناسب روی پارامترهای اصلی رابطه کول-کول به دست آمد. برای پارامترهای فاکتور بولتسمان نیز مقادیر $\Gamma=10^{-5}$ و $i=500000$ در نظر گرفته شد.

در این مقاله همچنین الگوریتم نمونه برداری گیس توسعه یافته چن و همکاران (۲۰۰۸) بازسازی شد و عملکرد این دو روش نمونه برداری به روش وارون سازی داده های مصنوعی و آزمایشگاهی مقایسه شد.

از مقایسه نتایج رویکردهای وارون سازی داده های مصنوعی و آزمایشگاهی قطبش القایی طیفی مشخص شد که هر دو روش یک رهیافت کلی را به دست می دهند که

- polarization response to nanoparticles in a saturated sand matrix: *J. Appl. Geophys.*, **77**, 63-71.
- Scales, J. A., and Snieder, R., 1997, To Bayes or not to Bayes: *Geophysics*, **62**, 1045-1046.
- Schlumberger, C., 1920, *Etude sur la Prospection Electrique du Soussol*. Gauthier-Villars, Paris.
- Seigel, H. O., Vanhala, H., and Sheard, S. N., 1997, Some case histories of source discrimination using time-domain spectral IP: *Geophysics*, **62**, 1394-1408.
- Slater, L. D., and Lesmes, D., 2002, IP interpretation in environmental investigations: *Geophysics*, **67**, 77-88.
- Slater, L., 2007, Near surface electrical characterization of hydraulic conductivity: From petrophysical properties to aquifer geometries —A review: *Surveys in Geophysics*, **28**, 169-197.
- Tarantola, A., 1987, *Inverse Problem Theory, Methods for Data Fitting and Model Parameter Estimation*: Elsevier Science Publishing Co.
- Tarantola, A., and Valette, B., 1982a, Generalized nonlinear inverse problems solved using the least square criterion: *Reviews of Geophysics*, **20**(2), 219-232.
- Tarantola, A., and Valette, B., 1982b, Inverse problems - Quest for information: *Journal of Geophysics*, **50**, 159-170.
- Vanhala, H., 1997, *Laboratory and Field Studies of Environmental and Exploration Applications of the Spectral Induced Polarization (SIP) Method*: PhD thesis, Geological survey of Finland.
- Xiang J., Jones N. B., Cheng D., and Schlindwein, F. S., 2001, Direct inversion of the apparent complex-resistivity spectrum: *Geophysics*, **66**, 1399-1404.
- Kemna, A., 2000, *Tomographic Inversion of Complex Resistivity: Theory and Application*: Ph.D. thesis, Ruhr-University Bochum.
- Kemna, A., Binley, A., Ramirez, and Daily, W., 2000, Complex resistivity tomography for environmental applications: *Chemical Engineering Journal*, **77**, 11-18.
- Kemna, A. H. M., Münch, K., Titov, Zimmermann, E., and Vereecken, H., 2005, Relation of SIP relaxation time of sands to salinity, grain size and hydraulic conductivity: 11th European Meeting of Environmental and Engineering Geophysics, EAGE, Extended Abstracts, P05.
- <http://piers.mit.edu/piersonline/piers.php>, doi: 10.2529/piers04120094920.
- Chen, J., Kemna, A., and Hubbard, S., 2008, A comparison between Gauss-Newton and Markov-chain Monte Carlo based methods for inverting spectral induced polarization data for Cole-Cole parameters: *Geophysics*, **73**(6), 247-259.
- Cole, K. S., and Cole, R. H., 1941, Dispersion and adsorption in dielectrics I: Alternating current characteristics: *Journal of Chemical Physics*, **1**, 341-351.
- Duflo, 1996, *Applications of Mathematics I*: Springer-Verlag, Berlin, New York, 34.
- Gelman, A., and Rubin, D., 1992, Inference from iterative simulation using multiple sequences: *Statistical Science*, **7**, 457-472.
- Geman, S., and Geman, D., 1984, Stochastic relaxation, Gibbs distribution, and Bayesian restoration of images: *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.*, **6**, 721-741.
- Geweke, J., 1992, Evaluating the accuracy of sampling-based approaches to the calculation of posterior moments, J. M. Bernardo, J. O. Berger, A. P. David, and A. F. M. Smith, eds., *Bayesian statistics 4*: Oxford University Press, 169-193.
- Ghorbani, A., Camerlynck, C., Florsch, N., Cosenza, P., and Revil, A., 2007, Bayesian inference of the Cole-Cole parameters from time and frequency domain induced polarization: *Geophysical Prospecting*, **55**, 589-605.
- Ghorbani, A., Cosenza, Ph., Revil, A., Zamora, M., Schmutz, M., Florsch, N., Jougnot, D., 2009, Non-invasive monitoring of water content and textural changes in clay-rocks using spectral induced polarization: A laboratory investigation: *Appl. Clay Sci.*, **43**, 493-502.
- Jaggar, S. R., and Fell, P. A., 1988, Forward and inverse Cole-Cole modeling in the analysis of frequency domain electrical impedance data: *Exploration Geophysics*, **19**, 463-470.
- Pelton, W. H., Ward, S. H., Hallof, P. G., Sill, W. R., and Nelson, P. H., 1978, Mineral discrimination and removal of inductive coupling with multifrequency IP: *Geophysics*, **43**, 588-609.
- Pelton, W. H., Smith, B. D., and Sill, W. R., 1984, Interpretation of complex resistivity and dielectric data, Part II: *Geophysical Transactions*, **29**(4), 11-45.
- Ryan, A. J., Glaser, D. R., Werkema J. D. D., and Atekwana, E. A., 2012, Spectral induced

- Mosegaard, K., and Tarantola, A., 1995, Monte Carlo sampling of solutions to inverse problems: *Journal of Geophysical Research*, **100**(B7), 12431-12447.
- Neal, R. M., 1993, An improved acceptance procedure for the hybrid Monte Carlo algorithm: *Journal of Computational Physics*, **111**, 194-203
- Orozco, F. A., Williams, K., Long, P., Hubbard, S., and Kemna, A., 2011, Using spectral induced polarization (SIP) to infer biogeochemical processes associated with bioremediation of a uranium-contaminated aquifer: *Journal of Geophysical Research*, **116**, PP 17.
- Pelton, W. H., 1977, Interpretation of Complex Resistivity and Dielectric Data: PhD thesis, University of Utah.
- Kirkpatrick, S., Gelatt, C. D., and Vecchi, Jr., M. P., 1983, Optimization by simulated annealing: *Science*, **220**, 671-680.
- Klein, J. D., and Sill, W. R., 1982, Electrical properties of artificial clay-bearing sandstone: *Geophysics*, **47**(11), 1593-1605.
- Luo, Y., and Zhang, G., 1998, Theory and Application of Spectral Induced polarization: SEG, Geophysical Monograph Series, no. 8.
- Madden, T. R., and Cantwell, T., 1967, Induced polarization, a review. In: *Mining Geophysics*, Society of Exploration Geophysicists, **2**, 916-931.
- Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Rosenbluth, M. N., Teller, A. H., and Teller, E., 1953, Equations of state calculations by fast computing machines, *Journal of Chemical Physics*, **21**(6), 1087-1092.