

## 아닐링법에 의한 지구물리자료의 역산

김희준\*

### Inversion of Geophysical Data via Simulated Annealing

Hee Joon Kim\*

**ABSTRACT** : There is a deep and useful connection between thermodynamics (the behavior of systems with many degrees of freedom in thermal equilibrium at a finite temperature) and combinational or continuous optimization (finding the minimum of a given multiparameter function). At the heart of the method of simulated annealing is an analogy with the way that liquids freeze and crystallize, or metals cool and anneal. This paper provides a detailed description of simulated annealing. Although computationally intensive, when it is carefully implemented, simulated annealing is found to give superior results to more traditional methods of nonlinear optimization.

### 서 언

최근 비선형 최적화문제의 해법으로서 아닐링기법 (simulated annealing, SA)이 주목을 받고 있다. 이것은 자연계에 존재하는 현상에서 힌트를 얻은 최적화 알고리즘으로서 현재 그 이론적 배경이나 각종 문제에 대한 적용성 등이 광범위하게 연구되고 있다. SA가 주목을 받기 시작한 것은 그 유명한 순회판매원 문제 (travelling salesman problem,  $N$ 개의 도시를 순회하여 출발점으로 다시 되돌아 가는 최단경로를 구함)를 실질적으로 해결한 이후이다 (Press *et al.*, 1992). 그리고 복잡한 집적회로의 설계 (실리콘 기판상에 몇 십만개의 회로요소를 배치하여 배선간의 간섭을 최소로 하는 문제)에도 사용되어 성공을 거두었다.

이들 응용은 모두 조합최소화 (combinational minimization)의 예이다. 이는 목적함수를 최소화할 때 함수가 정의되는 공간이  $N$ 개의 연속변수로 된 통상의  $N$ 차원 공간이 아니라 도시를 순회하는 길의 집합이라든지 실리콘기판에 회로요소를 매기는 방법의 집합과 같이 이산적 (discrete)이다. 이러한 배치공간의 요소수는 멱함수적으로 커지기 때문에 모든 가능성을 조사하는 것은 불가능하다. 게다가 집합이 이산적이기 때문에 좋아보이는 방향 (목적함수 값이 줄어드는 방향으로 내려간다는 개념이 적용되지 않는다. 이러한 배치공간에서는 방향이라는 개념이 그 뜻을 갖지 않는지도 모

른다.

연속변수에 대한 통상의 연속최소화 (continuous minimization) 문제에도 SA는 적용 가능하다. 이 경우는 어떤 초기치에서부터 목적함수가 줄어드는 방향으로 내려가면 극소치 (local minimum)에 빠져서 최소치 (global minimum)에 도달하지 못하는 문제가 나타나기 때문에 실은 조합최소화의 경우보다 복잡하다. Fig. 1은 탄성과탐사 정보정 (residual statics) 문제에 대한 목적함수의 한 예를 보여준 것이다 (Scales *et al.*, 1992). 단, 여기서는 목적함수를 최소화하는 것이 아니라 최대화해야 한다. 그림을 보면 뚜렷한 한개의 최대치외에 수많은 극대치가 있으며, 고개를 올라가는 것만으로는 최대치에 도달할 수 있는 초기치의 범위가 매우 좁다는 것 ( $x, y$  공히  $-10 \sim 10$ 의 범위)을 알 수 있다.

SA는 비선형 최소자승법에서 일반적으로 요구되는 목적함수의 경사방향 정보를 필요로하지 않을 뿐더러 초기모델에는 의존하지 않는다는 장점을 가진다. 현재 자연과학이나 공학은 물론이고 지구과학의 분야에서도 많은 연구가 진행되고 있으며 앞으로 큰 성과가 기대되는 방법이라 하겠다. 지구물리탐사 분야에서도 탄성과 반사법의 자료처리나 전기탐사 자료해석에 대한 적용예가 최근 폭발적으로 늘어나고 있는 추세이다. 그런데 놀랍게도 그 알고리즘화는 그다지 어렵지 않다.

### 원 리

SA는 열역학 특히 액체가 얼 때의 결정화나 금속이 식을

\*부산수산대학교 응용지질학과 (Department of Applied Geology, National Fisheries University of Pusan, Pusan 608-737, Korea)

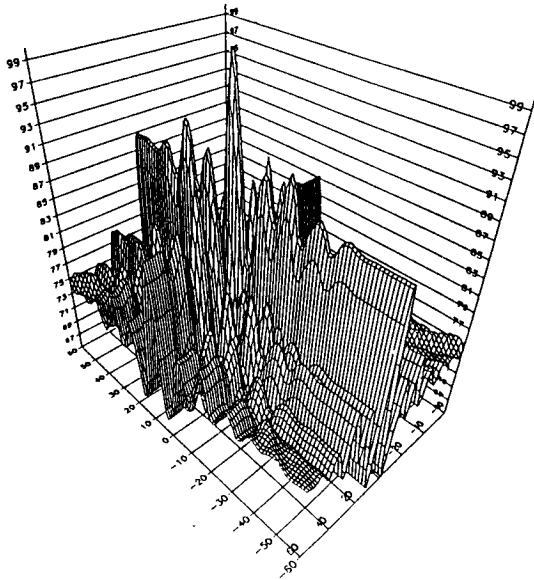


Fig. 1. A slice through a 55-dimensional seismic objective function associated with the problem of static estimation. It was made by fixing all but two unknowns with correct value and allowing with their correct value and allowing the remaining two to vary in a neighborhood of the true model (after Scales *et al.*, 1992).

때의 아닐링 (annealing)을 모방한 것이다. 고온에서는 액체 중의 분자는 서로 자유롭게 운동한다. 액체를 천천히 냉각하면 열적 운동이 상실되고, 원자는 그 크기의 몇 십억배나 되는 길이로 전 방향으로 완전히 정렬하게 되며 결국 순수한 결정이 만들어 진다. 이 결정이 시스템의 최소에너지 상태이다. 시스템을 천천히 냉각하면 자연은 그 최소에너지 상태를 찾을 수 있다는 점이 경이롭다. 반대로 액체상의 금속을 급냉 (quenching)하면 이 상태보다 조금 에너지가 높은 다결정질 또는 비결정질의 상태로 빠져버린다.

따라서 이러한 과정의 본질은 천천히 냉각하여 원자가 운동성을 잃어버릴 때 재배치될 수 있도록 충분한 시간을 주는데 있다. 이것이 아닐링의 기술적 정의이며, 저에너지 상태를 달성하기 위한 필수조건이다. 완벽한 대비는 아니지만 기존의 최소화 알고리즘은 모두 급냉에 해당된다고 할 수 있다. 어느 경우든 빨리 가까운 해로 도달하는데 급급한 나머지 출발점에서 바로 내리막길 방향으로 가능한한 가려고 했다. 이 때문에 앞에서 말한 것 처럼 최소가 아닌 극소로 빠져버리고 마는 것이다.

자연계에서 이루어지는 최소화 알고리즘은 이것과는 전혀 다른 절차에 바탕을 둔다. 이른바 Boltzmann의 확률분포

$$\text{Prob}(E) \sim \exp(-E/kT) \tag{1}$$

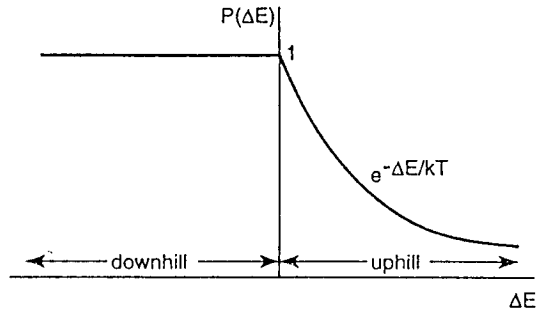


Fig. 2. Metropolis criterion shows the probability of the energy of a system changing by an amount  $\Delta E$ . It can be seen that changes that lead to lower energies ( $\Delta E < 0$ ) are always accepted, but there is also a finite probability of the system moving to higher energy states.

가 나타내는 것처럼 온도  $T$ 에서 열평형에 있는 시스템의 에너지는 다수의 에너지상태  $E$ 에 확률적으로 분포한다. 여기서  $k$ 는 자연계에서 온도와 에너지를 관련시키는 Boltzmann정수이다. 아무리 저온이라도 시스템은 에너지가 보다 높은 상태에 이르는 확률이 조금이지만 있다. 따라서 시스템이 에너지 극소로부터 뛰어나와 에너지가 조금 높은 상태를 거쳐 보다 좋은 극소로 도달할 가능성이 있다. 바꾸어 말하면 시스템은 고개를 내려갈 뿐만 아니라 때로는 고개를 올라 가지만 온도가 낮을수록 고개를 올라갈 가능성은 적어진다.

이와 같은 원리는 Metropolis *et al.* (1953)에 의해 처음으로 수치계산에 도입되었다. 이 알고리즘에서는 열역학을 가정한 시스템이 차례로 여러가지 상태를 만난다. 원래의 에너지를  $E_1$ , 새로이 맞이할 상태의 에너지를  $E_2$ 라고 하면, 시스템은 확률

$$P(\Delta E) = \begin{cases} 1, & \text{if } \Delta E \leq 0, \\ \exp(-\Delta E/kT), & \text{if } \Delta E > 0, \end{cases} \tag{2}$$

로 새로운 상태로 이동한다 (Fig. 2). 여기서  $\Delta E = E_2 - E_1$ 이다. 이와 같이 보통은 고개를 내려가고 때로는 고개를 올라간다는 이 일반적인 방법은 메트로폴리스의 알고리즘이라고 불린다.

### 예 제

여기서는 Groisman and Parker (1993)의 예제로 SA의 작동원리에 대하여 설명한다. 다음의 함수를 최소화하는 문제를 생각하자.

$$f(x,y) = x^2 + 2y^2 - 0.3\cos(3\pi x) - 0.4\cos(4\pi y) + 0.7 \tag{3}$$

이것은 연속최소화의 한 예이다. Fig. 3을 보면 알 수 있듯이  $f(x,y)$ 는 (0,0)에서의 최소치외에 주변에 많은 극소치를 가진다.

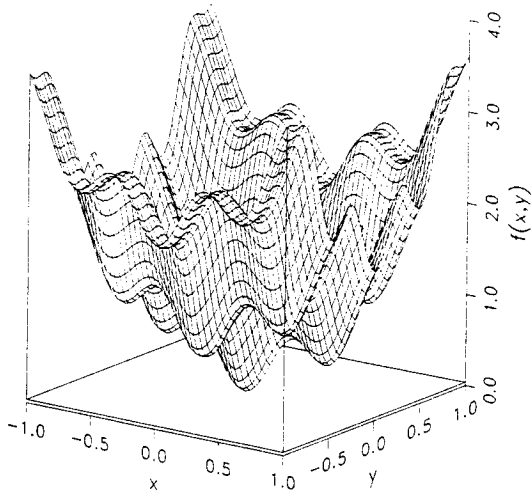


Fig. 3. Simulated annealing test function exhibiting many local minima and one good global one.

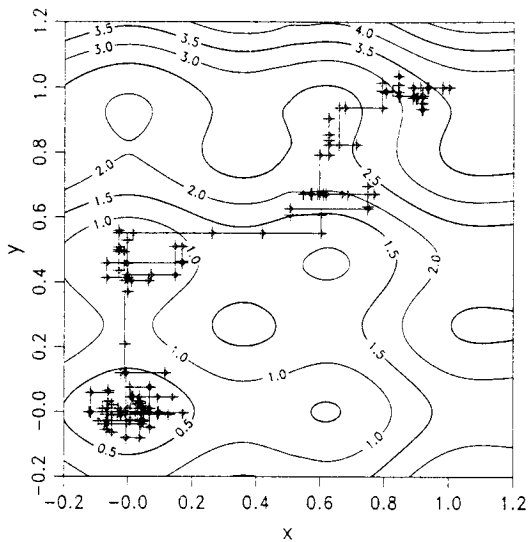


Fig. 4. Simulated annealing test result showing all the values the algorithm attempted starting at (1,1) before locating the global minimum at (0,0). The diamonds indicate the coordinates the algorithm followed toward the global minimum.

최소자승법과 같은 보통의 최적화기법으로는 국부적인 골에 잡혀 최소지점인 (0,0)에 도달하지 못하는 경우가 많을 것이다.

SA의 성능을 알아보기 위하여 (1,1)에서 부터 출발하기로 한다. Fig. 4는 SA 탐색경로의 한 예를 보여준 것이다. 네모는 탐색과정에서 선택된 스텝을 나타낸다. 또 점직선은 고개를 올라가는 방향으로 탐색을 시도한후 결국은 포기한 경로를 나타낸다. 몇 몇 지점에서 SA는 고개를 올라가고 있음을 알 수 있다. 이것이 (0.6,0.5)이나 (0.6,0.0) 지점의 골을 탈출할 수

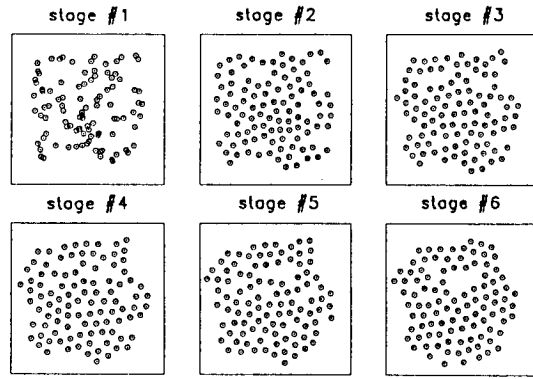


Fig. 5. Particle locations during the first six stages of the simulated annealing process in the 100 particle two-dimensional system. These stages are common to both the slow and rapid cooling processes. The initial configuration is random. Temperature parameters range from  $T^* = 35$  to  $T^* = 10$  (see Fig. 7, after Silverman and Adler, 1992).

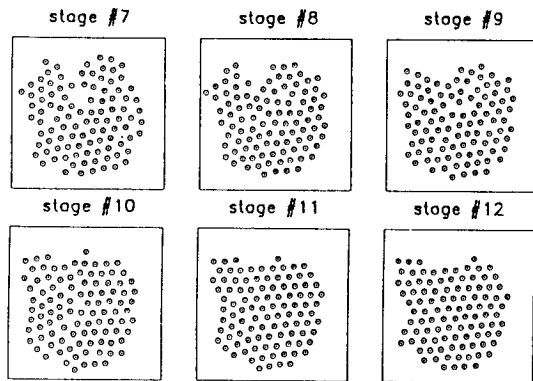


Fig. 6. Particle locations during the later six stages of the slow cooling simulated annealing process. The last step is a defect-free triangular lattice which is a global minimum of energy density. The temperatures and number of Monte Carlo steps per particle at each stage are given in Fig. 7 (after Silverman and Adler, 1992).

있었던 원인이다.

문헌에서 SA는 Monte Carlo technique, Boltzmann machine 또는 biased random walk라고 불린다. 이는 SA가 최적치를 향한 탐색을 랜덤하게 실시하고 (Monte Carlo technique), 그 변화의 채택여부를 Boltzmann 확률분포에 의존하는 것에 기인한다. Fig. 4는 이러한 경위를 명확하게 보여주고 있다. 어떤 지점에서 다음 지점으로 자리를 옮길 때의 이동방향은 완전히 랜덤하게 선택되지만, 채택된 경로는 대체로 낮은 값쪽으로 가도록 편향되어 있으며 (biased random walk), 이것이 최소치로 수렴되는 이유이다. 그 편향정도는 확률 (2)에 의해 결정된다.

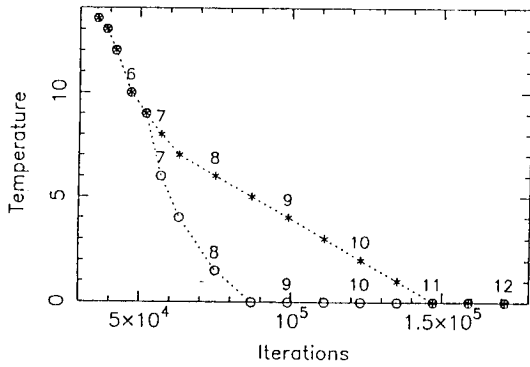


Fig. 7. The temperature as a function of the number of Monte Carlo steps per particle for the later stages of both cooling schedules. The asterisks indicate the slowly cooled system and open circles the rapidly cooled system. The numbers above the symbols correspond to the stages shown in Figs. 6 and 8 (after Silverman and Adler, 1992).

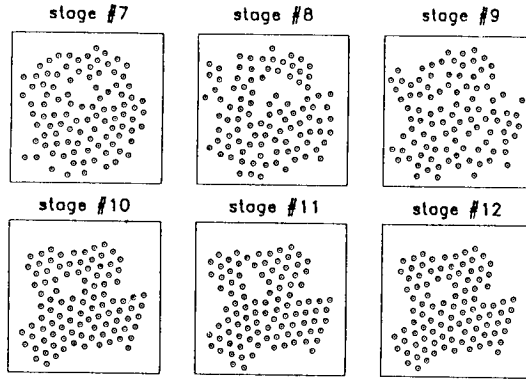


Fig. 8. Particle locations during the later six stages of the rapid cooling simulated annealing process. The last step is a defective triangular lattice that is one of the many local minima in energy. The temperatures and number of iterations at each stage are given in Fig. 7 (after Silverman and Adler, 1992).

### 냉각 스케줄

SA에서 온도는 탐색과정을 제어하는 매우 중요한 파라메터이다. 방정식 (2)를 보면 알 수 있듯이 제어변수 온도  $T$ 는 개악방향의 채택확률  $P(\Delta E)$ 를  $\Delta E/T$ 의 형태로 조절한다. 바꾸어 말하면 일정한 확률에서는 에너지의 변화량  $\Delta E$ 는  $T$ 에 비례한다. 이는  $T$ 가 크면 그만큼 깊은 골을 탈출할 수 있다는 것, 즉 에너지차가 큰 선택은  $T$ 가 클 때 이루어지는 것을 뜻한다. 그리고 이러한 큰 선택은  $T$ 가 내려가면 고정되어 차레로 보다 작은 개량으로 옮겨가게 된다.

냉각속도는 SA의 성능을 좌우한다. 냉각속도를 작게하면 좋은 특성 (넓은 탐색범위)이 얻어지지만 시간이 걸리게 되고, 반대로 크게하면 특성은 나빠진다. Silverman and Adler (1992)는 SA교육을 위해 냉각속도에 따른 단결정 성장과정의 차이를 컴퓨터로 모의실험으로 영상화하였다. Fig. 5 및 6는 2차원상의 100개 입자가 단결정을 가상한 격자를 형성해 가는 과정을 보여준 것이다. 이 때 냉각스케줄은 Fig. 7의 별표와 같다. 온도가 내려감에 따라서 결손이 없는 격자가 만들어지는 것을 볼 수 있다. 그러나 냉각속도를 크게하면 (Fig. 7의 동그라미표), Fig. 8에서 보는 것처럼 격자에 결손이 생기는 것 (결손이 있는채 굳어 지는 것)을 알 수 있다. 참고로 이것은 조합최소화의 한 예이다.

온도관리 스케줄로서 Geman and Geman (1984)은

$$T(t) = k/\log(1+t) \tag{4}$$

를 제안하였다. 여기서  $t$ 는 반복회수,  $k$ 는 정수이다. 그들은 잡음 (개악방향으로의 전이확률)이  $T(t)$ 의 Boltzmann분포에

따른다면, 이 스케줄로 아닐링할 경우 반드시 최적해로 수렴되는 것을 증명하였다. 한편, Szu and Hartley (1987)는 다음과 같은 스케줄링을 제안하였다.

$$T(t)=k/(1+t) \tag{5}$$

이는 잡음이 Cauchy분포에 따를 때 최적이다. 그러나 이들 스케줄링은 이론적으로 최적해로 수렴되는 것을 전제로 하여 유도된 것이며, 실제의 온도관리 스케줄로서는 반드시 현실적인 것은 아니다.

열역학과의 대비를 보다 강화시켜서 비열이나 엔트로피에 해당하는 변수를 정의하여 온도관리에 이용할 수도 있다 (Kirkpatrick *et al.*, 1983), 그러나 실제로 많은 사람이 사용하고 있는 것은

$$T(t)=a^t T(0) \tag{6}$$

와 같은 단순한 형태의 것이다. 여기서 초기온도  $T(0)$  및 온도구배  $a < 1$ 은 문제의 특성에 따라서 적절히 조절해야 한다.

### 적 용 예

SA의 실제 적용예를 지구물리탐사 분야에서 찾아 보기로 한다. 최초의 시도는 아마도 Rothman (1985; 1986)에 의한 탄성파탐사 반사자료의 정보정 (residual statics)에 관한 것이다. 이 문제에 관해서는 Vasudevan *et al.* (1991), Scales *et al.* (1992), DuBose (1993) 그리고 Normark and Mosegaard (1993)도 시도한 바 있다. 탄성파탐사의 다른 분야에 대해서는 Landa *et al.* (1989)의 2차원 속도역산 (velocity inversion), Lavielle (1991)의 2차원 디콘볼루션 (deconvolution), Sen and

Stoffa (1991)과 Scales *et al.* (1992)의 1차원구조를 구하기 위한 파형역산 (waveform inversion), 그리고 Carrion *et al.* (1993), Pullammanappallil and Lauie (1993) 및 Carrion and Bohm (1994)의 2차원단면을 구하기 위한 토모그래피 (tomography) 가 있다.

한편 탄성파탐사 이외로 눈을 돌리면, Schneider and Whitman (1990)은 시추공 경사계 자료의 해석에, Dosso and Oldenburg (1991)은 MT자료의 해석에, Sen *et al.* (1993)과 Kim (1995)은 전기비저항곡선의 해석에, 그리고 Dittmer and Szymanski (1995)는 지자기 및 전기비저항의 2차원문제에 적용하였다.

결 언

SA의 가장 큰 단점은 이의 본질과도 관계되지만 느리다는 것이다. 이를 개선하기 위해서는 탐색과정에서 스텝크기 (step size)를 적절히 바꾸는 방법 (Groisman and Parker, 1993)이나 탐색과정에 simplex법을 결합하는 방법 (Press *et al.*, 1992) 등이 제안되고 있다. 특히 후자는 매우 교묘한 방법으로 알려져 있다.

현재 SA는 수 많은 최적화기법중에서 확고한 자리를 차지하였다고 할 수 있다. 이미 좋은 교과서도 나와 있으며 (van Laarhoven and Aarts, 1987; Aarts and Korst, 1989), 컴퓨터 프로그램도 발표되어 있다 (Press *et al.*, 1992). 특히 Press *et al.* (1992)은 꼭 참조하기를 권하고 싶다. 순회판매원문제에 관한 조합최소화와 탐색과정에 simplex법을 결합한 연속최소화에 대한 해설과 함께 프로그램이 소개되어 있으며, 앞으로 실제문제에 SA를 적용하고자 할 때 크게 도움이 될 것이다.

사 사

본 연구는 한국과학재단 및 전략광물자원 연구센터의 지원을 받았다. 이 글을 쓰는데 있어 많은 조언을 해주신 공영세교수께 감사드리며, 또 열띤 토론과 그림 작성에 협조 해주신 대학원생 박미경, 이동성, 박중용, 박성훈군에게도 감사합니다.

참고문헌

Aarts, E.H.L. and Korst, J. (1989) Simulated Annealing and Boltzmann Machines. Wiley, New York.  
 Carrion, P. and Bohm, G. (1994) Seismic reflection tomography via simulated annealing. *Leading Edge*, v. 13, p. 679-682.  
 Carrion, P., Jacovitti, G. and Neri, A. (1993) Gaussian and non-gaussian tomographic modeling via simulated annealing. *J. Sei-*

*smic Expl.*, v. 2, p. 189-204.  
 Dittmer, J.K. and Szymanski, J.E. (1995) The stochastic inversion of magnetic and resistivity data using the simulated annealing algorithm. *Geophys. Prosp.*, v. 43, p. 397-416.  
 Dosso, S.E. and Oldenburg, D.W. (1991) Magnetotelluric appraisal using simulated annealing. *Geophys. J. Int.*, v. 106, p. 379-385.  
 DuBose, J.B., Jr. (1993) Practical steps toward realizing the potential of Monte Carlo automatic statics. *Geophysics*, v. 58, p. 399-407.  
 Geman, S. and Geman, D. (1984) Stochastic relaxation, Gibbs distribution, and Bayesian restoration of images. *IEEE Trans. Patt. Anal. Mach. Intell.*, v. PAMI-6, p. 721-741.  
 Groisman, G. and Parker, J.R. (1993) Computer-assisted photometry using simulated annealing. *Computers in Physics*, v. 7, p. 87-96.  
 Kim, H.J. (1995) Nonlinear inversion of resistivity sounding data using simulated annealing. *Butsuri-Tansa*, 48. (in press, in Japanese)  
 Kirkpatrick, S., Gelatt, C.D., Jr. and Vecchi, M.P. (1983) Optimization by simulated annealing. *Science*, v. 220, p. 671-680.  
 Landa, E., Beydoun, W. and Tarantola, A. (1989) Reference velocity model estimation from prestack waveforms: Coherency optimization by simulated annealing. *Geophysics*, v. 54, p. 984-990.  
 Lavielle, M. (1991) 2-D Bayesian deconvolution. *Geophysics*, v. 56, p. 2008-2018.  
 Metropolis, N., Rosenbluth, A., Rosenbluth, M., Teller, A. and Teller, A. (1953) Equation of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, v. 21, p. 1087-1092.  
 Normark, E. and Mosegaard, K. (1993) Residual statics estimation: Scaling temperature schedules using simulated annealing. *Geophys. Prosp.*, v. 41, p. 565-578.  
 Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T. and Flannery, B.P. (1992) *Numerical Recipes in Fortran*. 2nd (ed.), Cambridge U. P., New York.  
 Pullammanappallil, S.K. and Louie, J.N. (1993) Inversion of seismic reflection traveltimes using a nonlinear optimization scheme. *Geophysics*, v. 58, p. 1607-1620.  
 Rothman, D.H. (1985) Nonlinear inversion, statistical mechanics, and residual statics estimation. *Geophysics*, v. 50, p. 2784-2796.  
 Rothman, D.H. (1986) Automatic estimation of large residual statics corrections. *Geophysics*, v. 51, p. 332-346.  
 Scales, J.A., Smith, M.L. and Fischer T.L. (1992) Global optimization methods for multimodel inverse problems. *J. Comp. Phys.*, v. 103, p. 258-268.  
 Schneider, W.A., Jr. and Whitman, W.W. (1990) Dipmeter analysis by a Monte Carlo technique. *Geophysics*, v. 55, 320-326.  
 Sen, K., Bhattacharya, B.B. and Stoffa, P.L. (1993) Nonlinear inversion of resistivity sounding data. *Geophysics*, v. 58, p. 496-507.  
 Sen, K. and Stoffa, P.L. (1991) Nonlinear one-dimensional seismic waveform inversion using simulated annealing. *Geophysics*, v. 56, p. 1624-1638.  
 Silverman, A. and Adler J. (1992) Animated simulated annealing. *Computers in Physics*, v. 6, p. 277-281.  
 Szu, H. and Hartley (1987) Fast simulated annealing. *Phys. Lett. A*, v. 122, p. 157-162.  
 Van Laarhoven, P.J.M. and Aarts, E.H.L. (1987) *Simulated Annealing: Theory and Practice*. Reidel, Dordrecht.  
 Vasudevan, K., Wilson, W.G. and Laidlaw, W.G. (1991) Simulated annealing statics computation using an order-based energy function. *Geophysics*, v. 56, p. 1831-1839.