물리탐사
Vol. 2, No. 2, 1999, p. 112~121

[해설]

지구물리자료의 역산해석에 관한 개관

김희준[1] · 정승환[2]

Review on the Inversion Analysis of Geophysical Data

Hee Joon Kim and Seung-Hwan Chung

Abstract : This article reviews the development of geophysical inverse theory. In a series of articles published in 1967, 1968, and 1970, G. Backus and F. Gilbert discussed a trade-off between model resolution and estimation errors in geophysical inverse problems, and gave a criterion to compromise the reciprocal relation. Although the criterion was not clear in the physical point of view, it had been extensively used in the interpretation of geophysical data in the 1970s. This was the starting point of the fruitful development of inverse theory in geophysics. A reasonable criterion to compromise the reciprocal relation was derived to solve linear inverse problems by D. D. Jackson in 1979, introducing the concept of a priori information about unknown model parameters. This Jackson's approach was extended to solve nonlinear problems on the basis of probabilistic approach to the inverse problems formulated by A. Tarantola and B. Vallete in 1982. At the end of 1980s ABIC (Akaike Bayesian Information Criterion) was introduced for selecting a more reasonable model in geophysics. Now the data inversion is regarded as the process of extracting new information from observed data, combining it with a priori information about model parameters, and constructing a more clear image of model.

서　　론

지구물리탐사 자료의 해석은 기본적으로 관측자료를 기초로 지하구조를 도출하기 위하여 그 물리적 성질을 추정하는 것이다. 이러한 목적을 위하여 종래에는 직관에 의하거나, 구하고자 하는 지하구조모델의 매개변수(parameter) 즉, 물리적 또는 기하학적 성질을 변화시키면서 주어진 함수를 이용, 계산에 의한 이론치와 실제로 얻은 관측치를 비교하여 양자가 가장 잘 부합하는, 다시 말해서 그 차이가 가장 작아지는 parameter 값을 시행착오적으로 구하는 것이 보통이었다. 본질적으로는 순방향문제(forward problem)를 풀어 지하구조모델을 추론하는 것이다. 이에 반하여 관측자료 즉, 결과로부터 이를 야기한 원인인 지하구조모델을 추정하는 방법이 60년대 초반부터 모색되기 시작하였다. 종래의 방법을 순방향문제라고 하는데 비하여 이와 같은 새로운 사고를 역문제(inverse problem)라고 하게 되었다.

지구물리탐사에서 역문제에 대한 본격적인 연구는 Backus와 Gilbert에 의하여 3편의 논문(1967, 1968, 1970)이 발표되면서부터라고 볼 수 있는데, 이 때부터 역문제에 대한 기본적 개념 정립은 물론 방법론의 획기적 발전을 이루게 되었다. 그들은 다음과 같은 세 가지 문제점과 그 해결책을 제시하였다. 첫째, 모델 추정에는 비유일성(non-uniqueness) 문제가 존재함을 보이고 둘째, 모델의 추정오차와 분해능 사이에는 서로 상반된 관계가 있음을 명확히 하였으며 셋째, 역문제의 본질은 모델의 추정오차 감소와 분해능 향상이라는 상반된 요구를 어떻게 조화시키느냐 하는 것이다.

1970년대 후반에는 해의 분산과 분해능에 대한 상반된 요구를 해결하기 위하여 우리가 가지고 있는 지하구조모델에 대한 지식(사전정보, a priori information)을 이용하는 개념이 도입되었다(Jackson, 1979). 이 연구는 본질적으로는 확률적인 관점에서 선형 역문제를 취급한 것이다. 그러나 지구물리학에 있어서 역문제는 대부분은 비선형이고, 이러한 비선형 역문제의 해법은 임의의 초기모델에 대해 문제를 선형화시켜, 선형 역산알고리즘을 반복 적용함으로써 모델을 순차적으로 보정해가는 반복개량법이다. 선형역산에 의한 초기모델의 보정은 관측자료에 포함된 정보에 의하여 이루어지므로, 그 결과를 다음 단계의 초기모델로 사용하는 것은 초기모델이 사전정보에 근거한 가장 그럴듯한 모델이라는 생각과 모순된다. 이러한 비선형 역문제에 대한 합리적 정식화는 베이즈론(Bayesian theory)적 접근방법을 통하여 Tarantola와 Valette(1982a, b)에 의해 시도되었다.

지구물리학에서 역산의 발전 역사는 한마디로 합리적 모델 선택의 기준은 무엇인가라는 문제의 해답을 얻기 위한 것이다 이러한 흐름은 1980년대 후반에 이르러서는, 1970년대 후반에 수리통계학 분야에서 도입된 엔트로피 최대화 원리(entropy

*1999년 4월 7일 접수
1) 부경대학교 탐사공학과(Pukyong National University)
2) 한국자원연구소(Korea Institute of Geology, Mining and Materials)

maximization principle)에 기초를 둔 모델선택의 새로운 기준인 ABIC(Akaike Bayesian Information Criterion)의 적용까지 이르게 되었으며, 그 유용성이 실지로 확인되고 있다. 관측에서는 항상 충분한 자료가 얻어진다는 보장은 없으며, 게다가 보통 얻어지는 자료는 잡음으로 인해 오염되어 있는 것이 보통이다. 이러한 자료로부터 어떻게 최적인 모델을 추정할 것인가 하는 것이 우리가 직면하고 있는 역문제의 주제이다. 여기서는 역산해석의 개념과 방법에 대해 그 도입과정부터 완성단계에 이르기까지의 역사를 Matsu'ura(1991)의 해설을 참고로 하여 되돌아보기로 한다. 본문에 사용된 수식표기는 Matsu'ura를 따라서 기술하였다.

역문제란

역산해석의 개념이나 방법은 1960년대 말부터 본격적으로 연구되기 시작되었다(Backus와 Gilbert, 1967, 1968, 1970). Buckus와 Gilbert는 한정된 관측자료만으로 지구내부 구조에 관한 모델을 추정할 경우, 모델의 추정에는 비유일성(nonuniquness) 문제가 존재함을 밝혔으며, 또한 모델의 추정오차와 분해능(resolution) 사이에는 서로 상반된 관계가 있음을 명확히 하였다. 다시 말해 역문제의 본질은 모델의 추정오차 감소와 분해능 향상이라는 서로 상반된 요구를 어떻게 조화시키느냐 하는 것이다.

예를 들어 지표에서 관측된 중력가속도 자료 $y_i (i = 1, \ldots, n)$로부터 지구내부의 밀도분포 $\rho(r)$를 추정하는 문제를 생각해 보자. 단, r는 지구의 반경으로 정규화된 중력 중심으로부터의 거리를 나타낸다. 밀도모델과 자료와의 관계는 적당한 적분핵(그린함수) $g_i(r)$를 써서 다음과 같은 선형 관측방정식으로 나타낼 수 있다.

$$y_i = \int_0^1 g_i(r)\rho_0(r)dr \perp \tag{1-1}$$

지금 이 관측방정식을 만족하는 하나의 모델을 $\hat{\rho}(r)$라고 하면, 이것에

$$\int_0^1 g_i(r)\rho_0(r)dr = 0 \tag{1-2}$$

을 만족하는 함수 $\rho_0(r)$의 정수배를 합쳐서 얻어지는 모델

$$\rho(r) = \rho(r) + c\rho_0(r) \tag{1-3}$$

은 모두 원래의 관측방정식 (1-1)을 만족한다. 이는 주어진 관측자료를 설명하는 모델은 무수히 많이 존재하는 것(비유일성)을 의미한다.

무수히 많이 존재하는 해 중에서 최적인 것을 선택하기 위해서는 특별한 기준이 필요하다. 지금 임의의 선형 역연산자(linear inverse operator) $h_i(r_0)$를 자료에 적용시켜 어느 특정 깊이 $r = r_0$에서의 밀도 $\hat{\rho}(r_0)$를 추정하였다고 하면

$$\hat{\rho}(r_0) = \sum_{i=1}^{n} h_i(r_0)y_i \tag{1-4}$$

를 얻는다. 이 식에 (1-1)식의 y_i를 대입하면

$$\hat{\rho}(r_0) = \int_0^1 R(r,r_0)\rho(r)dr \tag{1-5}$$

이 된다. 여기서

$$R(r,r_0) = \sum_{i=1}^{n} h_i(r_0)g_i(r) \tag{1-6}$$

이다. (1-5)식은 깊이 $r = r_0$에서의 밀도의 추정치 $\hat{\rho}(r_0)$가 실제의 밀도분포 $\rho(r)$에 가중함수 $R(r, r_0)$를 곱하여 평균화(가중평균)함으로써 얻어짐을 나타낸다. $\hat{\rho}(r_0)$가 참값 $\rho(r_0)$의 좋은 추정치가 되기 위해서는 $R(r, r_0)$가 $r = r_0$ 부근에서 큰 값을 가지며, 다른 곳에서는 거의 0에 가까운 분포를 가져야 한다. 만일 가중함수가 $r = r_0$에서 피크를 가진 델타함수 $\delta(r - r_0)$라면 추정치는 참값과 일치한다. 따라서 가중함수와 델타함수와의 유사도를 최적모델 선택의 기준으로 삼을 수 있다.

가중함수 $R(r, r_0)$와 델타함수 $\delta(r - r_0)$와의 차이를

$$d(r_0) = \int_0^1 [R(r,r_0) - \delta(r - r_0)]^2 dr \tag{1-7}$$

과 같이 정의하자. 이는 분해능의 반대개념이다. $R(r, r_0)$의 분포는 $h_i(r_0)$의 선택에 의존하므로 우리의 문제는

$$d(r_0) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{i=1}^{n} h_i(r_0)B_{ij}h_j(r_0) - 2\sum_{i=1}^{n} h_i(r_0)g_i + \int_0^1 \delta^2(r - r_0)dr \tag{1-8}$$

을 최소화하는 $h_i(r_0)$를 구하는 문제로 귀착된다. 여기서

$$B_{ij} = \int_0^1 g_i(r)g_i(r)dr \tag{1-9}$$

이다. 이 문제의 해는 $d(r_0)$의 $h_i(r_0)$에 관한 미분을 0으로 놓으면 쉽게 구할 수 있다.

지금까지는 자료에 오차가 없는 것으로 간주하여 왔지만 실제 자료는 여러 가지 원인으로 인한 잡음 ε_i으로 오염되어 있다. 따라서 관측방정식 (1-1)은

$$y_i = \int_0^1 g_i(r)\rho(r)dz + \varepsilon_i \tag{1-10}$$

라고 고쳐 쓰는 것이 더 현실적이다. 지금 ε_i가 서로 독립이고, 전체 평균이 0, 분산이 σ^2인 정규분포를 따른다면 (1-4)식으로 정의되는 추정치 $\hat{\rho}(r_0)$의 분산은 오차의 전파법칙에 의해

$$v(r_0) = \sigma^2 \sum_{i=1}^{n} h_i(r_0)h_i(r_0) \tag{1-11}$$

와 같이 나타낼 수 있다. $\hat{\rho}(r_0)$가 좋은 추정치가 되기 위해서는 모델의 분해능(해상도)의 반대개념인 $d(r_0)$ 뿐만 아니라 해의 분산(불확실성)의 척도인 $v(r_0)$도 작아야 한다. 그러나 모델의 해상도와 불확실성 사이에는 일반적으로 서로 상반된 관계가 존재한다. 즉 해상도를 높이려고 하면 불확실성이 커지고, 불확실성을 억제하려고 하면 해상도가 떨어진다. 따라서 $d(r_0)$와

$v(r_0)$ 양쪽을 동시에 작게 하는 것은 원리적으로 불가능하며, 이는 한정된 자료에서는 한정된 정보밖에 얻어낼 수 없음을 의미한다. 지구물리학의 역문제의 본질은 이와 같은 추정치의 불확실성과 해상도에 대한 서로 상반된 요구를 조화시키는 합리적인 기준을 찾아내는 데에 있다. Fig. 1은 해의 분산도와 모델의 분해능과의 관계를 나타낸 것으로 이를 trade-off 곡선이라 한다. 이에 대해 Backus와 Gilbert가 제시한 해답은 최적모델의 선택기준으로서 (1-9)식의 $d(r_0)$ 대신 $d(r_0)$와 $v(r_0)$의 가중평균

$$S(r_0) = \alpha^2 d(r_0) + (1-\alpha^2)v(r_0) \tag{1-12}$$

를 사용한다는 것이다. 그러나 이러한 시도는 두 가지 면에서 근본적인 한계를 가지고 있다. 하나는 $d(r_0)$과 $v(r_0)$는 서로 차원이 다르며 이들의 가중평균이 갖는 물리적 의미가 불분명하다는 것이고, 다른 하나는 변수 α의 최적치를 어떻게 결정하는가 하는 것이다. 이러한 한계에도 불구하고, Backus와 Gilbert의 방법은 그 당시로서는 획기적인 방법으로 1970~1980년대에 많은 연구자에 의해 지구내부 구조를 추정하는 문제에 널리 사용되었다.

이산모델

Backus와 Gilbert의 방법을 실제문제에 적용하기 위해서는 먼저 연속분포모델를 이산화할 필요가 있다. 이를 위해 연속분포모델 $\rho(r)$를 m개의 적당한 기저함수(basis function) $\phi_j(r)(j = 1, ..., m)$의 선형결합으로 표현하자. 즉

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^{m} X_j\,\phi_0(r) + \phi_0(r) \tag{2-1}$$

여기서 $\phi_0(r)$는 다음과 같은 특성을 가진다.

$$\int_0^1 \phi_j(r)\phi_0(r)dr = 0 \tag{2-2}$$

(2-1)식을 (1-10)식에 대입하면 이산화된 선형 관측방정식

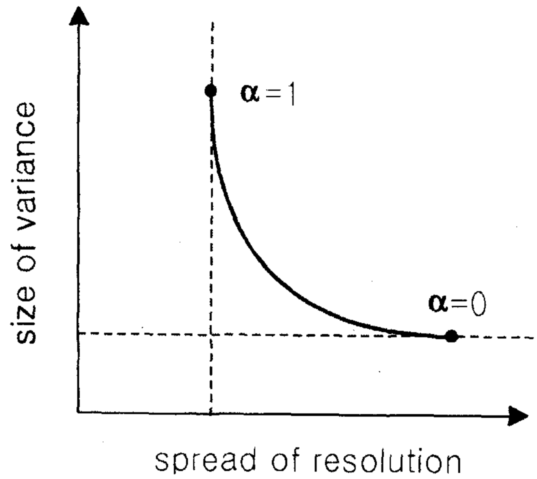

Fig. 1. Trade-off curve of resolution and variance.

$$y_i = \sum_{j=1}^{m} A_{ij}x_j + e_i \tag{2-3}$$

를 얻는다. 여기서

$$A_{ij} = \int_0^1 g_i(r)\phi_j(r)dr \tag{2-4}$$

$$e_i = \varepsilon_i + \int_0^1 g_i(r)\phi_j(r)dr \tag{2-5}$$

이다. 이 때 중요한 것은 오차 e_i는 본래의 관측오차 ε_i와 이산화에 따른 모델오차(이산모델과 연속분포모델과의 차이)와의 합으로 정의된다는 점이다. 만일 기저함수의 이산화수 m을 충분히 많이 잡으면 모델오차를 관측오차에 비해 충분히 작게 할 수 있으며, 연속분포모델과 이산모델은 실질적으로 같아진다.

다음으로 이산화할 때 새로 도입된 모델변수 x_j의 물리적 의미에 대해 생각해 보자. 지금

$$S_{ij} = \int_0^1 g_i(r)\phi_j(r)dr \tag{2-6}$$

로 정의되는 행렬 S의 역행렬을 T라고 하면, 모델변수 x_j와 원래의 연속분포모델 $\rho(r)$ 사이에는

$$x_j = \sum_{k=1}^{m} T_{jk}\int_0^1 g_i(r)\phi_j(r)dr \tag{2-7}$$

의 관계가 있다. 예를 들면 $\phi_j(r)$을 어느 특정구간 $r_{j-1} \le r \le r_j$에서 1, 그 밖에서는 0인 함수를 선택하면, x_j로서

$$x_j = \frac{1}{r_j - r_{j-1}}\int_{r_{j-1}}^{r_j} \rho(r)dr \tag{2-8}$$

를 얻는다. 이는 구간 $r_{j-1} \le r \le r_j$에서 x_j는 연속분포모델 $\rho(r)$의 평균임을 나타낸다.

이와 같은 box-car형의 기저함수에 의한 이산화를 통한 블록형 역산은 현재 가장 많이 사용되고 있다. 참고로 3차원 지구중력모델의 이산화에서는 구 대칭구조에서의 편차를 구면조화함수의 중합으로 표현하는 것이 합리적이다. 이 밖에 이러한 문제에서 자주 사용되는 기저함수로서는 삼각함수, 스프라인함수, chebyshev 다항식 등이 있다. 연속분포모델의 이산화에서는 문제의 특성에 따른 적절한 기저함수 선택이 무엇보다도 중요하다.

특이치분해

역문제에 관한 관측방정식은 하나의 선형시스템으로 볼 수 있다. 이 선형시스템을 풀 때 해의 존재여부를 결정할 1차 독립성에 관한 척도는 계수행렬의 특이치에 의해 주어진다. 여기서는 행렬의 특이치분해(singular value decomposition)를 통해 선형시스템의 일반적 해석을 시도해 보자.

자료에 오차가 없으면 이산화된 관측방정식은 벡터형식으로

$$y = Ax \tag{3-1}$$

와 같이 쓸 수 있다. 여기서 y는 n차원 벡터, x는 m차원 벡터,

그리고 A는 $n\times m$차원 행렬이다. 앞에서와 같이 자료 y에 적당한 역연산행렬 H를 적용시켜 모델 x를 추정해 보자. 즉

$$\hat{x} = Hy \tag{3-2}$$

이다. 이 때 모델의 추정치 $\hat{x}$와 참값 x 사이에는

$$\hat{x} = Rx;\ \ R = HA \tag{3-3}$$

의 관계가, 또 자료의 예측치 $\hat{y} = A\hat{x}$과 자료 y 사이에는

$$\hat{y} = Sy;\ \ R = AH \tag{3-4}$$

의 관계가 성립한다. 윗식에서 알 수 있듯이 R은 자료에 의한 모델의 해상도를 나타내는 분해능행렬(resolution matrix)이며, 연속분포모델의 경우 가중함수 $R(r, r_0)$에 해당한다. 또 S는 모델에 의해 자료가 어느 정도 설명되었는가를 나타내는 정보행렬(information matrix)이다. 만일 $R = I$ (단위행렬, identity matrix)라면 모델은 완전히 추정됨을 의미하고, 또 $S = I$라면 자료가 완전히 설명됨을 의미한다. 따라서 R이나 S가 얼마만큼 단위행렬에 가까운지 여부는 선형시스템의 해의 특성을 살필 때 좋은 지표가 된다.

행렬 A에 관한 고유치문제는 다음과 같은 고유치방정식에 의해 정의된다.

$$\left.\begin{aligned} Av &= \lambda u \\ A^t u &= \lambda v \end{aligned}\right\} \tag{3-5}$$

여기서 윗첨자 t는 행렬의 전치(transpose)를 나타낸다. 이들 고유치방정식은 고유치가 0이 아닐 때는 서로 결합되어 있지만 고유치가 0일 때는 독립인 두 개의 고유치방정식

$$Av = 0 \tag{3-6}$$

$$A^t u = 0 \tag{3-7}$$

으로 분리된다. 지금 (3-5)식에서 양의 고유치를 $\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_p > 0 (p \leq n, m)$라고 하고, 이에 대응하는 고유벡터를 $u_1, \cdots, u_p$ 및 $v_1, \cdots, v_p$로 나타내기로 하자. 또 0의 고유치에 대해서는 (3-6) 및 (3-7)식에서 구해지는 고유벡터를 $v_{p+1}, \cdots, v_m$ 및 $u_{p+1}, \cdots, u_n$로 나타낸다. 이들 고유벡터는 모두 서로 직교이며, 그 길이는 1로 정규화되어 있다고 가정한다. 행렬 A는 이들 고유치벡터로부터 만들어지는 직교행렬(orthogonal matrix)

$$U = [U_p|U_0] = [u_1, \cdots, u_p|u_{p+1}, \cdots, u_n] \tag{3-8}$$

$$V = [V_p|V_0] = [v_1, \cdots, v_p|v_{p+1}, \cdots, v_m] \tag{3-9}$$

을 사용하면 일반적으로 다음과 같이 분해된다.

$$A = U\Lambda V_t = U_p \Lambda_p V_p^t \tag{3-10}$$

여기서 Λ_p 및 Λ는 각각 다음과 같이 정의되는 $p\times p$ 및 $n\times m$ 차원의 대각행렬(diagonal matrix)이다.

$$\Lambda p = [\lambda_i\, \delta_{ij}] \tag{3-11}$$

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \Lambda_0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{3-12}$$

또한 (3-8)식과 (3-9)식에서 정의되는 부분행렬 (U_p, U_0)와 (V_p, V_0)는 U와 V가 직교행렬이므로 각각 다음과 같은 반직교성(semi-orthogonality)을 가진다.

$$U_p^t U_p = I,\quad U_0^t U_0 = I,\quad U_p U_p^t + U_0 U_0^t = I \tag{3-13}$$

$$V_p^t V_p = \mathrm{I},\quad V_0^t V_0 = I,\quad V_p V_p^t + V_0 V_0^t = I \tag{3-14}$$

지금 직교행렬 U와 V를 사용해서 자료 y, 모델변수 x와 계수행렬 A를 각각 $U^t y$, $V^t x$ 및 $U^t AV = \Lambda$라고 바꾸면 선형방정식 (3-1)은

$$U^t y = \Lambda V^t x \tag{3-15}$$

라고 쓸 수 있다. 그리고 이를 고유치가 0인 부분과 0이 아닌 부분으로 분리하면

$$\left.\begin{aligned} U_0^t\, y &= 0 \\ U_p^t\, y &= \Lambda_p V_p{}^t x \end{aligned}\right\} \tag{3-16}$$

를 얻는다. 여기서 주목해야 할 것은 모델변수 x의 V_0 공간으로의 사상부분인 $V_0^t x$는 어디에도 나타나지 않으므로 임의의 값을 가질 수 있다는 점이다. (3-16)식을 풀면

$$U_0^t y = 0 \tag{3-17}$$

라는 조건하에서 일반해

$$\hat{x} = V_p \Lambda_p^{-1} U^t y + V_0 b \tag{3-18}$$

를 얻는다. 여기서 $b = V_0^t x$는 $(m-p)$차원의 임의의 벡터를 나타낸다. U_0 공간이 없을 경우$(p = n)$에는 (3-17)식은 임의의 자료 y에 대해 자동적으로 만족되므로 자료를 완전히 설명하는 모델이 존재하게 된다. 그러나 일반적인 경우$(p < n)$에는 자료 y의 U_0 공간으로의 사상 $U_0^t y$는 모델변수 x와는 상관이 없다(어떤 x도 $U_0^t y$를 결정하지 못한다). 즉 자료를 완전히 설명하는 모델은 존재하지 않는다. 이 경우 (3-18)식으로 주어지는 $\hat{x}$는 자료 y를 최대한으로 설명하는 선형방정식 (3-1)의 해 (최소자승해)가 된다. 실지로 자료 y와 모델 $\hat{x}$에 의한 예측치 $A\hat{x}$의 차이의 자승합(sum of squares)을 계산해 보면

$$\|y - A\hat{x}\| = \| U_0^t y \|^2 \tag{3-19}$$

이 되는데, 우변은 모델변수 x와 상관이 없으므로, $\hat{x}$는 최소자승해가 되어 있음을 알 수 있다. (3-18)식에서 주어지는 일반해 $\hat{x}$는 $(m-p)$차원의 임의의 벡터 b의 V_0 공간으로의 사상을 포함하고 있다. V_0 공간이 없을 경우$(p = m)$ 해는 유일하다. 그러나 일반적인 경우 (p < m)에는 모델 x의 V0공간으로의 사상부분인 b는 자료로부터 결정할 수 없으므로 해의 유일성은 성립되

지 않는다. 즉 선형방정식 (3-1)의 최소자승해는 무수히 많이 존재하게 된다. 그래서 우리는 무수히 많은 최소자승해 중 특별히 벡터의 길이가 최소가 되는 해

$$\hat{x} = V_p \Lambda_p^{-1} U_p^t y \quad (3\text{-}20)$$

를 최적모델로 채용하기로 한다. 이는 모든 값이 0에 가까울수록 좋은 모델이라는 기준으로 선택을 한 셈이다.

(3-20)식의 해를 주는 역연산행렬

$$H = V_p \Lambda_p^{-1} U_p^t \quad (3\text{-}21)$$

는 행렬 A의 일반화역행렬(generalized inverse matrix)이라고 불린다. 참고로 (3-3)식과 (3-4)식에서 정의된 모델의 해상도를 나타내는 행렬 R과 자료의 선명도를 나타내는 S는 각각

$$R = V_p V_p^t, \quad S = U_p U_p^t \quad (3\text{-}22)$$

로 표현된다.

일반화역행렬에 의한 선형방정식의 해는 여러 가지 상황에 대한 특수해를 모두 포함하고 있다. 예를 들면 행렬 ^{A}의 계수(rank)가 자료 및 모델변수의 수와 같을 경우($p = n = m$), 일반화역행렬 H는 역행렬 $A - 1$와 일치한다. 즉

$$H = V\Lambda^{-1} U^t = A^{-1} \quad (3\text{-}23)$$

이다. 이 때 해 $\hat{x} = A^{-1}y$는 유일하며($R = I$), 자료 y를 완전히 설명한다($S = I$). 자료수가 계수보다 많을 경우($p = m < n$)의 일반화역행렬은

$$H = V\Lambda_m^{-1} U_m^t = (A^t A)^{-1} A^t \quad (3\text{-}24)$$

가 되어 잘 알려진 최소자승해를 준다. 이 최소자승해는 유일하지만($R = I$), 자료의 설명은 불완전하다($S = U_m U_m^t$). 반대로 모델변수의 수가 계수보다 많을 경우($p = n < m$)에는

$$H = Vn\Lambda_m^{-1} U^t = A^t (A A^t)^{-1} \quad (3\text{-}25)$$

가 되고, 이 해는 자료를 완전히 설명하지만($S = I$), 모델의 해상도는 불완전하다($R = V_n V_n^t$). Backus와 Gilbert가 다룬 문제는 세번째의 경우에 해당된다. 우리가 지구물리학에서 보는 현실적인 역문제는 위의 어느 것도 아니며 계수행렬 A의 계수가 자료 및 모델변수의 수보다 작은 경우($p < n$, m)가 대부분이다.

잡음 문제

관측자료가 잡음에 의해 오염되어 있는 실제적인 경우를 생각해 보자. 관측자료 y가 오차 e를 포함할 경우의 이산 관측방정식을 (3-1)식과 같은 벡터형식으로 쓰면

$$y = Ax + e \quad (4\text{-}1)$$

로 표현된다. 해석을 쉽게 하기 위해서 모든 오차는 통계적으로 서로 독립이며, 평균값이 0, 분산이 σ_e^2의 정규분포를 따르는 것으로 가정하자. 이 때 행렬 A의 일반화역행렬을 자료 y에 적용시켜 얻어지는 해

$$x = V_p \Lambda_p^{-1} U_p^t y \quad (4\text{-}2)$$

의 추정오차 공분산행렬 C는 오차의 전파법칙에 의해

$$C = \sigma_e^2 V_p \Lambda_p^{-2} V_p^t \quad (4\text{-}3)$$

과 같이 평가된다. 이것을 행렬요소로 나타내면 각 모델변수 추정오차의 분산으로서

$$\sigma_i^2 = \sigma_e^2 \sum_{j=1}^{p} (V_{ij} / \lambda_j^2)^2 \quad (4\text{-}4)$$

을 얻는다.

(4-4)식이 의미하는 바는 대단히 중요하다. 즉 행렬 A가 0은 아니지만 0에 가까운 고유치를 가지면 자료에 포함된 오차가 증폭되어 해의 추정오차가 매우 커지게 됨을 의미한다. 이 경우 (4-2)식의 일반화역행렬에 의한 해는 수학적으로는 존재하지만 물리적으로는 의미를 잃게 된다. 이러한 문제를 피하기 위해서는 다음과 같은 실제적인 방법이 많이 사용된다. 즉 행렬 A의 고유치 중에서 큰 순으로 q ($q \le p$)개의 고유치를 선택하고 이에 대응하는 고유벡터를 써서 역연산행렬

$$H = V_q \Lambda_q^{-1} U_q^t \quad (4\text{-}5)$$

를 정의할 때, 이 역연산행렬에 의한 해의 추정오차의 분산

$$\sigma_i^2 = \sigma_e^2 \sum_{j=1}^{q} (V_{ij} / \lambda_j)^2 \quad (4\text{-}6)$$

이 각 모델변수에 대한 최대 허용분산치를 넘지 않도록 모델의 유효변수의 수 q를 결정하는 것이다. 이 방법에서는 실질적으로 0으로 볼 수 있는 고유치의 숫자가 많아지므로 자연히 모델의 해상도와 자료의 설명도가 함께 떨어지게 된다. 여기서 (4-5)식의 역연산행렬을 자료 y에 적용시켜 얻어지는 해는 최소자승해가 아니라는 점은 주의해야 한다.

행렬 A의 0에 가까운 고유치를 잘라내는 방법은 1970년대 널리 사용되었다. 그러나 이는 해의 분산을 억제하는 실질적인 방법에는 틀림없지만 Backus와 Gilbert가 제기한 해의 분산과 분해능에 대한 상반되는 요구를 어떻게 조화시키는가 하는 본질적인 문제에 대한 해답을 주는 것은 아니다.

사전정보

해의 분산과 분해능에 대한 상반되는 요구를 어떻게 조화시키고 어떤 기준으로 모델을 선택하는 것이 합리적일까? Backus와 Gilbert가 제기한 이러한 본질적 문제는 사전정보(a priori information)라는 개념을 도입함으로써 해결되었다(Jackson,

1979). 이 연구는 본질적으로는 확률론적인 관점에서 역문제를 취급한 것이다. 역해석에 대한 개념적 설명을 Fig. 2에 도시하였다.

먼저 앞절과 마찬가지로 자료가 오차를 포함하는 경우의 관측방정식

$$y^0 = Ax + e \tag{5-1}$$

부터 시작하자. 여기서는 앞으로 자료가 실지로 관측되었다는 것을 강조하기 위해서 y 대신 y^0라고 표현하였다. 지금 모델변수 x의 적당한 초기치를 x^0라고 하면 (5-1)식으로부터 보정항 $x - x^0$에 관한 관측방정식

$$y^0 - Ax^0 = A(x - x^0) + e \tag{5-2}$$

를 얻을 수 있다. 좌변에 적당한 역연산행렬 H를 적용시켜 얻어지는 x의 추정치 $\hat{x}$는 형식적으로

$$\hat{x} = Hy^0 + (I - HA)\,x^0 \tag{5-3}$$

라고 쓸 수 있다. 이 식은 매우 중요한 의미를 띠고 있다. 즉 지구물리학의 역문제에서는 모델을 결정하는데 필요한 자료가 부족한 경우가 대부분인데, 이러한 경우 분해능행렬 $R = HA$가 단위행렬이 되지 않으면 추정치 $\hat{x}$는 관측자료 y^0 뿐만 아니라 우리가 선택한 초기모델 x^0에도 의존하게 됨을 의미한다.

그런데 우리는 보통 모델변수에 대한 지식을 어느 정도는 가지고 있다. 이 사전지식을 관측방정식 (5-1)과 같은 형태로 표현해 보자. 즉

$$x^0 = x + d \tag{5-4}$$

여기서 x^0는 사전지식을 통해 추정할 수 있는 가장 그럴듯한 모델변수이며, d는 x^0와 참값 x와의 차이를 나타낸다. 또한 우리는 d 자체는 모르지만 그 통계적 특성은 알고 있는 것으로 하자.

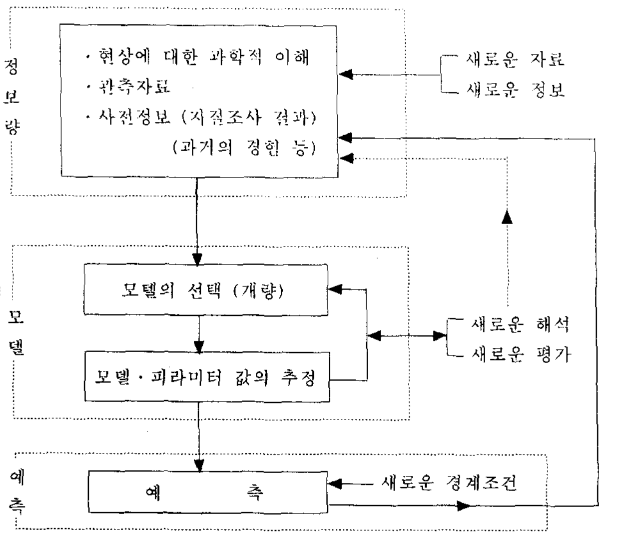

Fig. 2. Conceptual diagram for the inversion analysis of geophysical data.

(5-1)식의 y^0와 (5-4)식의 x^0를 (5-3)식에 대입하면 추정치 $\hat{x}$과 참값 x의 차이는

$$\hat{x} - x = He + (I - HA)d \tag{5-5}$$

라고 쓸 수 있다. 지금 오차 e와 d가 각각 평균이 0이며, 공분산행렬이 각각 E와 D의 정규분포를 따른다면 추정치 $\hat{x}$의 참값 x에 대한 공분산행렬 C는 오차의 전파법칙에 따라서

$$C = HEH^t + (I - HA)D(I - HA)^t \tag{5-6}$$

와 같이 표현된다. 우변 제 1항은 관측자료에 포함된 잡음으로 생기는 추정오차의 공분산이며, 제 2항은 분해능이 불완전하기 때문에 생기는 공분산이다. 다시 말해 사전정보라는 개념을 도입하므로써 지금까지 다른 척도로 평가된 해의 분산과 모델의 분해능을 같은 척도로 평가하는 것이 가능해진 것이다. 이것으로 Backus 및 Gilbert가 제기한 역산해석의 근본문제는 단순히 (5-6)식으로 정의되는 총분산(total variance)을 최소화하는 역연산행렬 H를 구하는 문제로 귀착된다.

(5-6)식의 총분산을 최소화하는 H는

$$H = (A^t E^{-1} A + D^{-1})^{-1} A^t E^{-1} \tag{5-7}$$

또는

$$H = DA^t (E + ADA^t)^{-1} \tag{5-8}$$

과 같이 구해지고, 또 공분산행렬 C는

$$C = (A^t E^{-1} A + D^{-1})^{-1} \tag{5-9}$$

또는

$$C = D - DA^t (E + ADA^t)^{-1} AD \tag{5-10}$$

와 같이 주어진다. (5-7)식과 (5-8)식, 그리고 (5-9)식과 (5-10)식은 수학적으로 동일하며, 전자는 $n > m$의 경우에, 후자는 $n < m$의 경우에 적용된다. 여기서는 $n > m$의 경우에 대해서만 설명하도록 하겠다.

역연산행렬 H인 (5-7)식을 (5-3)식에 대입하면

$$\hat{x} = (A^t E^{-1} A + D^{-1})^{-1} (A^t E^{-1} y^0 + D^{-1} x^0) \tag{5-11}$$

가 얻어지며, 이는 총분산을 최소화한다는 의미에서 최소분산해라고 불린다. Jackson(1979)에 의해 유도된 이 해는 다음의 조건식

$$trace\,(C) < trace\,(D) \tag{5-12}$$

를 항상 만족한다. 즉 모델의 불확실성(분산)은 역산해석을 통해 반드시 감소한다. 일반적으로 역산해석이 관측자료에 포함된 유효정보를 추출하여 이미 가지고 있는 정보에 추가함으로써 모델의 영상을 보다 선명하게 하는 과정이라고 생각하면, (5-12)식은 반드시 만족되어야 할 조건이다. 참고로 앞에서 언급한 일반화역행렬에 의한 해는 이 조건을 반드시 만족하지는

않는다.

(5-11)식에 의해 정의되는 최소분산해는 여러 가지 선형방정식해의 특수한 경우를 모두 포함하고 있다. 예를 들면 모델변수의 사전추정치 x^0가 0인 경우, 해는

$$\hat{x} = (A^t E^{-1} A + D^{-1})^{-1} A^t E^{-1} y^0 \tag{5-13}$$

가 된다. 이는 Franklin(1970)이 확률론적 개념에 기초하여 유도한 최적 선형연산자에 의한 해와 일치한다. 또 관측자료 및 사전모델의 공분산행렬이 각각 $E = \sigma_e^2 I$와 $D = \sigma_d^2 I$라고 나타낼 수 있는 경우에는 잘 알려진 감쇠최소자승해(damped least-squares solution)와 동일한 형태

$$\hat{x} = (A^t A + \mu I)^{-1} A^t y^0 \tag{5-14}$$

를 얻을 수 있다. 여기서 감쇠계수 μ는 단순히 해를 안정화시키기 위해서 결정되는 것이 아니라 관측자료와 사전모델에 포함된 오차의 분산간의 비율 σ_e^2/σ_d^2로 결정되어야 한다. 또한 (5-14)식은 Levenberg(1944)나 Marquardt(1963)가 제안한 비선형 최소자승문제를 안정적으로 풀기 위한 알고리즘과 형식적으로는 같지만 그 의미하는 바는 다르다. 모델변수에 대한 사전정보가 전혀 없을 경우 감쇠계수 μ는 한없이 0에 가까워진다. 그 때의 해는 만일 존재한다면

$$\hat{x} = (A^t A)^{-1} A^t y^0 \tag{5-15}$$

또는

$$\hat{x} = A^t (A^t A)^{-1} A^t y^0 \tag{5-16}$$

라고 쓸 수 있다.

비선형문제

앞서 말한 바와 같이 선형 역문제에는 Jackson(1979)에 의해 합리적인 정식화가 이루어져 이론체계가 완성되었다. 그러나 지구물리학에 있어서 역문제의 대부분은 비선형이다. 비선형 역문제의 해법은 보통 다음과 같은 반복개량법(iterative refinement method)이다. 임의의 초기모델에 대해 문제를 선형화시켜, 선형역산 알고리즘을 반복 적용함으로써 모델을 순차적으로 보정해 가며 해를 구한다. 그러나 앞절에서 말한 바와 같이 초기모델은 문제를 선형화하기 위한 단순한 수단이 아니라 우리가 가진 사전정보에 근거한 가장 그럴 듯한 모델이라고 하면, 이 선형역산의 반복 적용이라는 방법은 앞뒤가 맞지 않다. 왜냐하면 선형역산에 의한 초기모델의 보정은 관측자료에 포함된 정보에 의해 이루어지므로 그 결과를 다음 단계의 초기모델로 사용하는 것은 초기모델이 사전정보에 근거한 가장 그럴듯한 모델이라는 생각과 모순된다.

비선형 역문제에 대한 합리적인 정식화는 Tarantola와 Valette (1982a, b)에 의해 실현되었다. 이는 Jackson(1979)에 의한 선형 역문제의 정식화를 확률론적인 관점에서 비선형의 경우에 확장한 것이다. 여기서는 비선형 역문제에 대한 베이즈론(Bayesian theory)적 접근 방법에 대해 설명하겠다.

먼저 벡터형태로 쓰여진 비선형 관측방정식

$$y^0 = f(x) + \mathrm{e} \tag{6-1}$$

를 생각한다. 여기서 $f(x)$는 모델변수 x의 비선형함수이다. 지금 오차 e가 평균이 0, 공분산행렬이 E인 정규분포를 따른다면 관측량 y의 확률밀도분포는 x를 변수로 하여

$$p(y|x) = c \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}(y-f(x))^t E^{-1}(y-f(x))\right] \tag{6-2}$$

라고 표현된다. 이 식은 주어진 모델 x에 대한 관측치 y가 발생되는 확률을 나타내지만, 실제 관측을 통해 y의 측정치로서 y^0가 얻어졌을 때의 모델변수 x가 실현될 정도, 즉 공산 $l(x\,|\,y^0)$라고 해석할 수도 있다. 즉

$$p(y|x) \equiv p(y^0|x) = c \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}(y-f(x))^t E^{-1}(y-f(x))\right] \tag{6-3}$$

이다. 한편 모델변수 x에 관한 사전정보

$$x^0 = x + d$$

는 오차 d가 평균이 0, 공분산행렬이 D인 정규분포를 따른다면 확률밀도분포의 형태로

$$p(y|x) = c \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}(x^0-x)^t D^{-1}(x^0-x)\right] \tag{6-4}$$

라고 표현된다. 이 $p(x)$는 모델변수 x의 사전 확률밀도분포라고 불린다.

일반적으로 사건(event) y^0가 발생되는 확률 $p(y^0)$와 사건 y^0가 발생되었다는 조건하에서 사건 x가 발생되는 확률 $p(x\,|\,y^0)$과의 곱은 사건 x가 발생되는 확률 $p(x)$와 사건 x가 발생되었다는 조건하에서 사건 y^0가 발생되는 확률 $p(y^0\,|\,x)$와의 곱과 같다. 즉

$$p(x\,|\,y^0)\, p(y^0) = p(y^0\,|\,x)\, p(x) \tag{6-5}$$

이다. 이 식을 고쳐쓰면 잘 알려진 베이즈규칙(Bayes' rule)

$$p(x\,|\,y^0) = c \cdot p(y^0\,|\,x)\, p(x) \tag{6-6}$$

을 얻는다. 여기서 c는 $p(x\,|\,y^0)$를 정규화하기 위한 x에 독립적인 계수이다. 베이즈규칙이 의미하는 바는 관측자료 y^0가 주어졌을 때 x의 사후(a posteriori) 확률밀도분포 $p(x\,|\,y^0)$는 공산 $p(y^0\,|\,x)$와 사전 확률밀도분포 $p(x)$의 곱에 비례한다는 것이다.

(6-6)식에 (6-3)식과 (6-5)식을 대입하면 모델변수 x의 사후 확률밀도분포로서

$$p(x|y^0) = c \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}s(x)\right] \tag{6-7}$$

를 얻는다. 여기서

$$s(x) = (y^0 - f(x))^t E^{-1} (y^0 - f(x)) + (x^0 - x)^t D^{-1} (x^0 - x) \quad (6\text{-}8)$$

이다. 사후 확률밀도분포 $p(x \mid y^0)$는 베이즈규칙을 적용하여 관측자료에 포함된 정보와 우리가 가진 사전정보를 결합한 것이며 모델변수에 관한 모든 정보를 포함하고 있다. 따라서 확률론적인 입장에서 보면 사후 확률밀도분포 그 자체가 역문제에 대한 해답이라고 볼 수 있다. 그러나 모델변수의 수가 많으면 확률밀도분포 그 자체에 의한 해의 표현은 실질적이지 않다. 따라서 비선형성이 그다지 크지 않다는 조건하에서 $p(x \mid y^0)$의 최대치를 주는 x의 추정치 $\hat{x}$과 $\hat{x}$ 주변에서 x의 공분산행렬을 나타내는 행렬 C를 사용하여 사후 확률밀도분포를 근사적으로 기술해 보자. 만일 문제가 선형이라면 $p(x \mid y^0)$의 분포는 이 두 가지를 사용해서 완전히 표현된다.

사후 확률밀도분포 $p(x \mid y^0)$를 최대로 하는 x, 즉 (6-8)식의 $s(x)$를 최소로 하는 x는 $s(x)$의 x에 대한 미분을 0으로 놓으면 구해진다. 따라서 해 x가 만족해야 할 조건은

$$A^t E^{-1} (y^0 - f(x)) + D^{-1} (x^0 - x) = 0 \quad (6\text{-}9)$$

이다. 여기서 A는 감도행렬(sensitivity matrix or Jacobian)이라고 불리는 $n \times m$차원 행렬이며, 그 ij 요소는 $x = \hat{x}$에서 함수 f_i의 변수 x_j에 관한 미분계수

$$A_{ij} = (\partial f_i / \partial x_j)_{x=\hat{x}} \quad (6\text{-}10)$$

으로 주어진다. 기본방정식 (6-9)는 x에 관해 비선형이므로 이를 풀기 위해서는 반복개량법을 써야 한다. 자주 사용되는 방법으로는 x의 적당한 초기 값 x_k에 대해 다음과 같은 알고리즘으로 반복 보정하는 것이다. 즉

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k (A_k^t E^{-1} A_k + D^{-1})^{-1} r_k \quad (6\text{-}11)$$

여기서

$$r_k = A_k^t E^{-1} [y^0 - f(x_k)] + D^{-1} (x^0 - x_k) \quad (6\text{-}12)$$

이며, A_k는 $x = x_k$에서의 감도행렬이다. 참고로 일찍이 Tarantola와 Valette(1982b)가 얻은 해는 보정벡터의 길이를 조절하는 인자 α_k를 1로 하고 (6-11)식에 (6-12)식의 r_k를 대입해서 얻은 것과 같다. 이러한 반복과정은 보통 $x = x_0$으로부터 출발하여 $\hat{x} = \hat{x}$로 수렴할 때까지 실시된다. 이 경우 수렴을 판정하는 조건은 매우 간단하며 벡터 r_k의 길이가 충분히 작아지면 수렴하였다고 볼 수 있다. 왜냐하면 $r_k = 0$을 만족하는 x_k는 풀어야 할 기본방정식 (6-9)의 해이기 때문이다.

다음으로 이렇게 해서 얻어진 해 $\hat{x}$ 주변에서의 모델변수 x의 공분산

$$C_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} (x_i - \hat{x}_i)(x_i - \hat{x}_j) p(x|y^0) dx \quad (6\text{-}13)$$

를 선형근사라는 조건하에서 평가해 보자. 먼저 함수 $f(x)$를 $x = \hat{x}$ 주변에서 테일러전개(Tayler expansion)하고, $(x - \hat{x})$의 2차 이상인 고차항을 생략한 것을 (6-8)식에 대입하면

$$s(x) = s(\hat{x}) + (x - \hat{x})(A^t E^{-1} A + D^{-1})(x - \hat{x}) \\ - 2(x - \hat{x})^t \{A^t E^{-1} [y^0 - f(x)] + D^{-1}(x^0 - \hat{x})\} \quad (6\text{-}14)$$

이라는 관계식을 얻는다. 여기서 $\hat{x}$가 기본방정식 (6-9)를 만족하는 해라는 점을 고려하면 우변의 제 3항은 없어지고 결국

$$s(x) = s(\hat{x}) + (x - \hat{x})(A^t E^{-1} A + D^{-1})(x - \hat{x}) \quad (6\text{-}15)$$

이 된다. 따라서 (6-7)식으로 정의되는 사후 확률밀도분포 $p(x \mid y^0)$는 선형근사하에서

$$p(x|y^0) = c \cdot exp\left[-\frac{1}{2}(x - \hat{x})^t C^{-1} (x - \hat{x})\right] \quad (6\text{-}16)$$

과 같이 나타낼 수 있다. 여기서

$$C = (A^t E^{-1} A + D^{-1})^{-1} \quad (6\text{-}17)$$

이다. 이는 모델변수 x가 근사적으로 평균치 $\hat{x}$ 주변에 공분산 행렬이 C인 정규분포를 이루고 있음을 나타내는 것이다. 즉 문제의 비선형성이 약할 경우, 보다 엄밀하게 말하면 사전정보의 불확정성이 D로 결정되는 x^0의 주변에서 함수 $f(x)$의 비선형성이 약할 경우, 비선형 역문제의 해는 사후 확률밀도분포의 최대치를 주는 $\hat{x}$과 $\hat{x}$ 주변에서 x의 공분산행렬 C로 충분히 기술된다.

지금까지 기술한 비선형 역문제의 확률론적인 접근은 당연히 문제가 선형인 경우에도 그대로 적용된다. 예를 들면 (6-11) 및 (6-12)식에서 $f(x) = A_x$, $x_k = x_0$, $x_k + 1 = \hat{x}$, $A_k = A$, $\alpha_k = 1$이라고 놓으면

$$\hat{x} = (A^t E^{-1} A + D^{-1})^{-1} (A^t E^{-1} y^0 + D^{-1} x^0) \quad (6\text{-}18)$$

가 얻어지는데, 이는 Jackson(1979)이 구한 선형문제에 대한 최소분산해 (4-11)식과 같다. 결국 Jackson(1979)에 의한 선형 역문제에 대한 정식화는 확률적인 관점에서 사전정보와 관측자료의 정보를 베이즈규칙에 의해 통합함으로서 비선형의 경우까지 합리적으로 확장되었다고 할 수 있다.

모델 평가를 위한 정보량 기준

지구물리학에서 역산이론 발전의 역사는 한마디로 합리적인 모델 선택의 기준은 무엇인가 라는 문제의 해답을 얻기 위한 것이었다. 보다 정확하게 상세한 예측을 하기 위하여서는 보다 복잡한 모델의 도입이 필요하고, 그 결과 보다 많은 정보량이 필요하게 된다. 수리통계학의 목적은 관측된 자료에 기초하여 불확실한 현상의 특성을 확률에 의하여 표현하여 장래의 관측치의 확률분포를 추정, 예측 그리고 제어에 사용되도록 하는데 있다. 이러한 목적을 달성하기 위해서는 (1) 자료의 특성을 표현하는 확률분포(통계모델)를 여러 가지 분석목적에 따라서 정확하게 구성하는 것, (2) 얻어진 서로 다른 몇 개의 모델의 적합성을 평가, 비교하는 평가기준을 제시하는 것이다. 이러한

흐름은 1980년대 후반의 정보량이론에 기초를 둔 새로운 모델 선택기준의 도입으로 이어지는데 그 배경에는 수리통계학 분야에서의 개념상의 큰 도약이 있었다. 1970년대 후반부터의 Akaike(1977, 1980)에 의한 수리통계학 분야에서의 혁명, 즉 종래의 공산 최대화 원리(likelihood maximization principle) 대신 엔트로피(entropy) 최대화 원리에 기초를 둔 모델 선택의 새로운 기준 AIC 혹은 ABIC(Akaike Bayesian Information Criterion)는 1980년대 후반부터 지구물리학의 여러 분야에서 적용되어 그 유용성이 실지로 확인되었다(Murata, 1990; Uchida, 1993a, 1993b).

추정된 모델 $\hat{x}$에 의한 확률밀도분포 $p(y^0|\hat{x})$가 참의 모델 x에 의한 분포 $p(y|x)$와 얼마나 가까운지를 표현하는 지표로서 Kullback-Liebler(K-L) 정보량

$$I[p(y^0|\hat{x});\,p(y|x)] = \int p(y|x)\left[\log\frac{p(y|x)}{p(y^0|\hat{x})}\right]dx \tag{7-1}$$

가 사용된다. 이 K-L 정보량은 분포 $p(y^0|\hat{x})$와 분포 $p(y|x)$의 편차에 관한 척도이며, 일종의 엔트로피(단, 부호가 반대)라고 해석할 수 있다. K-L 정보량은 항상 양의 값으로 0에 가까울수록 모델 $\hat{x}$가 모델 x의 좋은 근사임(엔트로피가 큼)을 나타낸다. (7-1)식의 우변은

$$\int p(y|x)\log p(y|x)dx - \int p(y|x)\log p(y^0|\hat{x})dx \tag{7-2}$$

라고 고쳐 쓸 수 있는데, 제 1항은 참의 모델만에 의존하는 양이므로 상수이다. 따라서 제 2항을 크게 하면 K-L 정보량은 작아진다. 이는 모델 $\hat{x}$의 참의 분포 $p(y|x)$에 관한 평균대수공산이라 불리며, 정보량기준 AIC는 이의 최대치인 최대대수공산을 근거로 하고 있다.

Akaike (1980)는 (7-1)식의 확률밀도분포 즉 공산 $p(y^0|\hat{x})$에 베이즈의 공산 (7-3)식을 적용하여

$$\begin{aligned} ABIC = & -2\log(\text{maximum of } l\ (y^0|\hat{x})) \\ & +2(\text{number of hyper-parameters}) \end{aligned} \tag{7-3}$$

라고 정의하였다. 여기서 hyper-parameter란 모델 표현에는 직접 사용되지 않지만 모델변수를 추정하기 위해 사용되는 변수들을 뜻한다. 예를 들면 평활화제약(smoothness constraint)에 사용되는 변수 등이다. 결국 ABIC를 최소로 하는 모델이 참의 모델에 가깝다고 할 수 있다.

끝으로

지금까지는 Backus와 Gilbert에 의해 역산이라는 개념이 지구물리학 분야에 도입된 1960년대 후반부터 Jackson(1979)이나 Tarantola와 Vallette(1982a)에 의해 비선형 문제를 포함한 역산의 합리적인 이론체계가 완성된 1980년대 중반, 그리고 합리적인 모델 선택을 위한 정보량 기준이 도입된 1980년대 후반까지를 살펴보았다. 1980년대 중반에 역산의 이론체계가 어느 정도 완성되었다고 보는 것은 Menke(1984)나 Tarantola (1987)에 의해 역산이론 전체를 설명한 교과서가 나온 것으로도 간접적으로 증명된다. 또한 1985년에는 영국물리학회에서는 "Inverse Problems"라는 학회지를 발간했고, IEEE에서도 같은 해에 "Seismic Inversion"이라는 특집을 기획하였다. 일본에서도 1986년에 수리과학에서 "역문제"라는 특집을 발간한 것을 비롯하여 여러 가지 분야에서 큰 관심을 나타내었다.

지구물리학에서 역산이론 발전의 역사는 한마디로 합리적인 모델 선택의 기준은 무엇인가라는 문제의 해답을 얻기 위한 것이었다. 이러한 흐름은 1980년대 후반의 정보량 이론에 기초를 둔 새로운 모델 선택 기준의 도입으로 이어지는데, 그 배경에는 수리통계학 분야에서의 개념상의 큰 도약이 있었다. 1980년대 후반부터의 Akaike(1977, 1980)에 의한 수리통계학 분야에서의 혁명, 즉 엔트로피 최대화 원리에 기초를 둔 모델 선택의 새로운 기준인 AIC 혹은 ABIC가 그것으로, 이는 1980년대 후반부터 지구물리학의 여러 분야에서 적용되어 그 유용성이 실제로 입증되고 있다. 한편 비선형문제는 대역적인 최소해(global minimum)에 수렴하지 않고 국부적인 최소해(local minimum)에 수렴하는 경우가 종종 생기는 것으로 알려져 있는데, 이에 대해 생명공학적 수치기법인 신경망 네트워크(neural network), 유전적 기법(genetic algorithm) 및 인공지능(artificial intelligence) 기술이 이용되고 있다.

1990년대는 역산이론을 구체적인 문제에 대해 광범위하게 응용하는 시대이나 그 양이 너무나 방대하기 때문에 여기서는 취급하지 않았다. 더욱이 최근 들어 역문제는 물리학 분야를 넘어 응용과학분야로 확대, 발전하고 있다. 즉, 방대한 관측자료를 처리하여 알고 싶은 구조를 복원하는 정보처리 분야의 핵심기술로 발전하고 있는 것이다. 이러한 발전 배경에는 계측기술의 향상에 따라서 방대하고도 정확한 간접관측 자료의 확보, 대규모 역문제의 해를 계산 가능케 하는 고속 대형 컴퓨터의 출현, 그리고 유한요소법을 위시한 수치적 모델링 기술의 발전을 들지 않을 수 없다.

사 사

이 연구의 일부는 한국과학재단의 지원(과제번호 981-0403-009-2)을 받았다. 좋은 조언을 해주신 설순지박사께 감사드립니다.

참고문헌

1. Akaike, H., 1977, On entropy maximization principle: in Krishnaiah, A., Ed.., Application of Statistics, North-Holland, 27-41.
2. Akaike, H., 1980, Likelihood and Bayes procedure: in

Bernardo, J. M., DeGroot, M. H., Lindley, D. V. and Smith, A. F. M., Eds., Bayesian Statistics, University Press, Valencia, 143-166.
3. Backus, G. and Gilbert, F., 1967, Numerical applications of a formalism for geophysical inverse problems: Geophys. J. Roy. astr. Soc., **13**, 247-276.
4. Backus, G. and Gilbert, F., 1968, The resolving power of gross Earth data: Geophys. J. Roy. astr. Soc., **16**, 169-205.
5. Backus, G. and Gilbert, F., 1970, Uniqueness in the inversion of inaccurate gross Earth data: Phil. Trans. Roy. Soc. London, **A266**, 123-192.
6. Fanklin, J. N., 1970, Well-posed stochastic extensions of ill-posed linear problems: J. Math. Anal. Appl., **31**, 682-716.
7. Jackson, D. D., 1979, The use of a priori data to resolve nonuniqueness in linear inversion: Geophys. J. Roy. astr. Soc., **57**, 137-157.
8. Levenberg, K., 1944, A method for the solution of certain nonlinear problems in least squares: Quart. Appl. Math., **2**, 164-168.
9. Marquardt, D. W., 1963, An algorithm for least squares estimation of nonlinear parameters: J. Soc. Indust. Appl. Math., **11**, 431-441.
10. Matsu'ura, M., 1991, Development of inversion theory in geophysics: Jishin, **44**, 53-62. (in Japanese)
11. Menke, W., 1984, Geophysical Data Analysis: Discrete Inverse Theory: Academic Press, London.
12. Murata, Y., 1990, Estimation of Bouguer reduction density using ABIC minimization method: Jishin, **43**, 327-339. (in Japanese)
13. Tarantola, A., 1987, Inverse Problem Theory: Methods for Data Fitting and Model Parameter Estimation: Elsevier, Amsterdam.
14. Tarantola, A. and Valette, B., 1982a, Inverse problems = Quest for information: J. Geophys. Res., **50**, 159-170.
15. Tarantola, A., and Valette, B., 1982b, Generalized non-linear inverse problems solved using the least squares criterion: Rev. Geophys. Space Phys., **20**, 219-232.
16. Uchida, T., 1993a, Smoothness-constrained 2D inversion for DC resistivity data by ABIC minimization method: Butsuri-Tansa, **46**, 105-119 (in Japanese).
17. Uchida, T., 1993b, Smooth 2-D inversion for MT data based on statistical criterion ABIC: J. Geomag. Geoelectr., **45**, 841-858.