김일성종합대학학보 주체108(2019)년
지구환경과학 및 지질학 제65권 제3호

2차원자연전위이상의 역문제풀이에서 량자소둔법의 영향인자특성평가

박 경 훈

모의소둔법은 통계물리학에 기초한 비선형계발식대역최량화방법이다. 모의소둔법의 주요우점은 모형공간에서 대역탐색을 우연적으로 진행하고 사전제약조건들을 임의로 쉽게 첨부할수 있는것이다.[1] 량자소둔법은 모의소둔법의 원리에 기초하여 량자이행의 굴효과를 리용한 최량화방법이다.

론문에서는 량자소둔법의 원리[2]를 소개하고 2차원자연전위이상의 역문제풀이에 미치는 량자소둔법의 영향인자특성을 모형계산을 통하여 분석평가하였다.

1. 방법의 원리

모의소둔법은 금속의 가열 및 랭각현상을 최량화문제에 도입한것인데 가열 및 랭각에 의하여 금속은 두 상태 즉 액체상태와 고체상태사이에서 이행하게 된다.

고체상태의 금속은 고온용융상태까지 가열되면 액체로 되는데 이때 금속안의 모든 원자들은 상대적으로 자유롭게 운동한다. 만일 용융액체가 천천히 랭각되면 원자들의 운동은 점차 떠지게 되며 최저온도에 이르면 결정체를 형성한다.

통계물리학의 법칙에 의하면 분자 또는 원자는 온도 T에서 어떤 상태 r에 놓이며 이때 그것의 에네르기 $E(r)$는 다음의 볼츠만확률분포를 만족시킨다.

$$\rho_r[E(r)] = \frac{1}{Z(T)}\exp\left[-\frac{E(r)}{kT}\right] \tag{1}$$

여기서 $E(r)$는 상태 r의 에네르기, $k>0$은 볼츠만상수이다. $Z(T)$는 확률분포의 표준화인자 또는 분배함수로서 매 상태의 합을 표시한다.

$$Z(T) = \sum_{s\in D}\exp\left[-\frac{E(s)}{kT}\right] \tag{2}$$

식 (1)은 확률이 동일한 상태에서 물체의 온도가 증가하면 에네르기가 커지고 분자의 열운동진폭이 커지며 온도가 감소하면 에네르기가 작아지고 분자의 열운동진폭이 작아진다는것을 말해준다. 모의소둔과정에서 매 분자가 어떤 상태를 취하는가는 그 확률밀도에 따라 결정된다.

만일 온도 T가 매우 천천히 감소하면 분자의 에네르기는 점차적으로 작아지며 소둔이 끝나면 금속은 최저에네르기상태에 놓인다. 반대로 온도가 빨리 감소하면 금속은 비교적 높은 에네르기를 가지는 하나의 무정형상태에 도달한다. 이것은 지구물리역문제풀이견지에서 보면 국부극소점에 빠지는것을 의미하는데 이것이 바로 모의소둔법의 결함이다. 이로부터 모의소둔법에 의한 최량화과정에서 온도는 중요한 파라메터로 된다.

량자소둔법에서는 주요하게 량자이행의 굴효과를 리용하여 최량화과정을 완성한다.

외부작용이 없을 때 계의 총에네르기는 위치에네르기 $U(r,\ t)$ 와 운동에네르기 K 의 합으로 표시된다.

$$H(t)=U(r,\ t)+K$$

외부힘이 계에 작용하면 계는 본래의 고유한 상태를 보존하지 못하고 이행하기 시작한다. 이행과정에 립자는 파동성을 가지므로 일정한 조건에서 자기의 에네르기보다 높은 포텐샬장벽을 직접 뚫고나간다. 이 현상이 바로 굴효과이다. 량자소둔법에서 외부힘의 작용을 나타내는 $H'(t)$ 는 편리상 가로방향마당 $\Gamma(t)$ 로 표시할수 있다.

$$H'(t)=\Gamma(t)\sum_i \sigma_i^x$$

여기서 $\Gamma(t)$ 는 모의소둔법에서 온도 T 와 비슷한 작용을 한다. σ_i^x 는 i 번째 립자의 x 축에서의 스핀이다.

이때 계의 총에네르기는 다음과 같이 표시할수 있다.

$$H(t)=H_0+H'(t)=H_0+\Gamma(t)\sum_i \sigma_i^x \tag{3}$$

여기서 H_0 은 주어진 위치에네르기, $\Gamma(t)\sum_i \sigma_i^x$ 는 량자이행을 일으키는데 필요한 운동에네르기이다.

만일 $U=H_0$, $K=\Gamma(t)\sum_i \sigma_i^x$ 이라고 하면 식 (3)은 다음과 같이 표시할수 있다.

$$H(t)=U+K \tag{4}$$

볼츠만상수 $k=1$ 이고 온도가 T일 때 계의 분배함수는 다음과 같다.

$$Z=Tr(e^{-H/T})=Tr(e^{-H/bT})^b=Tr(e^{-(K+U)/bT})^b \tag{5}$$

여기서 b 는 어떤 상태에서 계의 립자수, Tr 는 계에서 에네르기합을 의미한다. 따라서 i 번째 상태에 놓일 계의 확률은 다음과 같다.

$$P_i=(e^{-H_i/bT})^b/Z \tag{6}$$

모의소둔법과 비슷하게 량자소둔법의 기본원리는 역문제풀이하려는 모형파라메터를 량자계에서의 립자로, 목적함수를 계의 위치에네르기부분으로 한다는것이다.

량자소둔과정을 지구물리역문제풀이에 리용하기 위하여 $\boldsymbol{m}^{(0)}$ 을 초기모형파라메터, $d_j(j=1,\ 2,\ \cdots,\ M)$ 를 관측자료로 취하였다. 이때 l 차 반복단계에서 해당한 목적함수는 다음과 같이 표시된다.

$$E(\boldsymbol{m}^{(l)})=\sum_{j=1}^{M}[d_{j,\ \text{측정}}-d_{j,\ \text{리론}}(\boldsymbol{m}^{(l)})]^2 \tag{7}$$

이렇게 반복과정을 거쳐 수정된 모형파라메터 $\boldsymbol{m}^{(l+1)}$ 을 얻으면 그것에 대응한 목적함수는 $E(\mathbf{m}^{(l+1)})$ 이고 $\Delta E=E(\mathbf{m}^{(l+1)})-E(\mathbf{m}^{(l)})$ 이다.

역문제풀이를 쉽게 하기 위하여 $\sum_i \sigma_i^x$ 를 하나의 상수 C로 취하면 계의 총에네르기는 다음과 같다.

$$H(t) = \Delta E + C\,\Gamma(t) \tag{8}$$

량자소둔과정에서는 매 반복탐색에서 식 (6)에 의하여 계산한 확률이 비교적 큰 상태에 대응한 모형파라메터를 보존한다. 그러나 실지계산에서는 분배함수 Z를 확정하기 어렵기때문에 다음 식을 리용하여 확률을 계산한다.

$$P(H) = (e^{-H/bT})^b \tag{9}$$

량자소둔법의 핵심은 식 (8)의 두번째 항이다. 이 항은 량자이행확률을 조절하여 확률이 비교적 큰 모형파라메터를 보존하게 함으로써 량자굴효과를 나타내게 한다.

량자소둔역문제풀이의 알고리듬은 다음과 같다.

① 초기모형파라메터 $\boldsymbol{m}^{(0)}$, 초기가로방향마당 Γ_0과 그것의 하강걸음 β를 주고 $\Gamma(t) = \Gamma_0 \beta^t$을 구성한다. 매 반복단계에서 모형파라메터의 탐색반경 $r_i (i = 1,\ 2, \cdots,\ b)$와 허용값을 설정한다.

② l차 반복단계에서 얻어진 모형파라메터 $\boldsymbol{m}^{(l)} = \{m_1^{(l)},\ m_2^{(l)}, \cdots,\ m_b^{(l)}\}$로부터 목적함수 $E(\boldsymbol{m}^{(l)})$를 계산한다.

③ [0, 1]사이에서 균등분포하는 우연수 $\xi_i (i = 1,\ 2,\ \cdots,\ b)$를 발생시키면 $(l+1)$차 반복단계에서 모형파라메터 $\boldsymbol{m}^{(l+1)}$은 다음과 같다.

$$\begin{cases} (m_1)^{l+1} = (m_1)^l + (2\xi_1 - 1)r_1 \\ (m_2)^{l+1} = (m_2)^l + (2\xi_2 - 1)r_2 \\ \qquad\vdots \\ (m_b)^{l+1} = (m_b)^l + (2\xi_b - 1)r_b \end{cases} \tag{10}$$

④ $\boldsymbol{m}^{(l+1)}$에 대응한 목적함수 $E(\boldsymbol{m}^{(l+1)})$와 $\Delta E = E(\boldsymbol{m}^{(l+1)}) - E(\boldsymbol{m}^{(l)})$을 계산하고 식 (8)로부터 계의 총에네르기를 구한다.

만일 $\Delta E < 0$이면 $\boldsymbol{m}^{(l+1)}$을 $\boldsymbol{m}^{(l)}$로 바꾸고 그렇지 않으면 식 (9)로 계산한 확률에 따라 $\boldsymbol{m}^{(l+1)}$을 $\boldsymbol{m}^{(l)}$과 바꿀수 있겠는가를 확정한다.

⑤ 매 반복단계에서 $\Gamma(t)$는 변하지 않게 한다. 중지조건을 만족시키면 계산을 끝내고 만족시키지 못하면 ②에로 이행한다.

우의 알고리듬에서 $\Gamma_0,\ \beta,\ r_i$는 실험을 통하여 확정할수 있고 $\Gamma(t)$는 역문제풀이에 따라 각이한 방식으로 바꿀수 있다.

2. 영향인자들의 특성평가

량자소둔법에 의한 지구물리역문제풀이에 영향을 주는 인자들($\Gamma_0,\ \beta,\ r_i,\ \Gamma(t)$)을 분석평가하기 위한 모형계산실험에 주향연장이 무한하고 심부연장이 유한한 두꺼운 맥상형분극체를 리용하였다. 관측점수 nx는 51점, 관측점사이거리는 1m로 정하였다. 분극체상부중심의 수평 및 수직자리표는 각각 $x_0 = (nx/2)\text{m}$, $z_0 = 5\text{m}$이고 경사각은 $\alpha = 60°$, 심부연장길이는 $l = 20m$, 분극체의 절반너비는 $b = 2m$, 분극체의 분극기전력은 100mV이다. 모형의 매 파라메터들의 변화구간은 진모형값의 ±80%의 구간으로 정하였다.

1) 파라메터탐색반경 r의 영향

모형파라메터의 탐색반경을 선정하는 문제는 대단히 중요하다. 왜냐하면 탐색반경이 산법의 수렴성 즉 수렴속도 및 수렴정확도와 직접적으로 관련되기때문이다.

탐색반경은 탐색과정(반복과정)에 점차 작아져야 한다. 탐색반경의 변화방식에는 련속변화방식과 불련속변화방식이 있다. 매 반복단계에서 탐색반경을 변화시키는 련속변화방식에서는 탐색반경을 다음과 같이 표시할수 있다.

$$r_i = [p_{\max}(i) - p_{\min}(i)]/(k \cdot l),\ (k \ge 1)$$

여기서 $p_{\max}$, $p_{\min}$은 각각 파라메터변화구간의 최대값과 최소값, l은 반복회수이다.

련속변화방식에서 추정파라메터평균상대오차는 표 1과 같다.

표 1. 련속변화방식에서 추정파라메터평균상대오차(%)

k	l									
	100	300	500	1 000	2 000	3 000	4 000	6 000	8 000	10 000
1	1.23	0.085	0.11	0.011	0.006	0.022	0.01	0.004	0.005 6	0.002 1
3	4.39	0.3	0.02	0.011	0.012	0.003	0.003	0.0006	0.000 7	0.000 3
5	7.54	3.97	0.82	0.006	0.006	0.001	0.000 8	0.000 6	0.000 6	0.000 4
7	14.58	10.27	8.5	6.75	5.48	4.95	4.0	2.33	1.15	0.25
10	18.64	16.94	15.94	15.24	13.9	13.13	12.44	11.39	10.58	9.95

표 1에서 보는바와 같이 k가 작을수록 조기수렴현상이 강하고 수렴이 안정하지 못하며 k가 클수록 수렴속도가 느리고 계산시간이 오래다. 제일 적합한 k의 값은 5이다.

불련속변화방식은 r를 계단식으로 변화시키는 방식으로서 전체 반복회수를 n개의 구간으로 나누고 매 구간에서는 r를 고정시킨다. 불련속변화방식에서 자료형에 따르는 추정파라메터평균상대오차는 표 2와 같다.

표 2. 불련속변화방식에서 자료형에 따르는
추정파라메터평균상대오차(반복회수 5 000회)

입력자료형	U	$\partial U/\partial x$	$\partial U/\partial z$	$\partial^2 U/\partial z^2$
평균상대오차/%	0.191 8	1.0×10^{-5}	5.5×10^{-5}	1.05×10^{-5}

표 2에서 보는바와 같이 자연전위이상의 수평1계도함수를 입력자료로 리용할 때 파라메터의 추정정확도가 제일 높다.

2) 가로방향마당의 영향

가로방향마당은 초기가로방향마당값 Γ_0과 감쇠률 β에 의해 결정된다. 련속변화방식의 경우 Γ_0과 β의 변화에 따르는 역문제풀이결과를 보았다.(표 3, 4)

표 3. Γ_0의 변화에 따르는 평균상대오차(반복회수 5 000회)

Γ_0	1	10	100	1 000
평균상대오차/%	9.026×10^{-4}	9.026×10^{-4}	9.026×10^{-4}	9.026×10^{-4}

표 4. β의 변화에 따르는 평균상대오차(반복회수 5 000회)

β	0.9	0.95	0.99	0.995	0.999
평균상대오차/%	9.026×10^{-4}	9.026×10^{-4}	9.026×10^{-4}	9.026×10^{-4}	9.026×10^{-4}

표 3, 4에서 보는바와 같이 평균상대오차는 Γ_0과 β의 변화에 따라 달라지지 않는다. 이것은 이 방법의 역문제풀이결과가 Γ_0과 β의 변화에 무관계하다는것을 보여준다.

결국 량자소둔법의 역문제풀이에 영향을 주는 인자는 자료형과 파라메터탐색반경뿐이다.

량자소둔법과 모의소둔법에 의한 자연전위이상역문제풀이결과를 비교하였다.(표 5)

표 5. 량자소둔법과 모의소둔법에 의한 자연전위이상 역문제풀이결과(반복회수 5 000회)

방법	모의소둔법		량자소둔	
	U	$\partial U/\partial x$	U	$\partial U/\partial x$
평균상대오차/%	1.5146	9.115×10^{-4}	0.1918	1.0×10^{-5}

표 5에서 모의소둔법에 의한 결과들은 초기온도 10°, 소둔온도감소방식이 쌍곡선감소형인 경우이다. 표 5를 통하여 량자소둔법이 모의소둔법에 비하여 약 10배정도 정확도가 높다는것을 알수 있다. 야외조건을 재현하기 위하여 우리는 리론마당자료에 우연장애성분을 첨가한 자료를 관측자료로 가정하고 량자소둔법의 항장애특성실험을 진행하였다.(표 6)

표 6. 량자소둔법의 장애특성(자료형이 $\partial U/\partial x$인 경우)

장애크기/%	1	3	5	10	20
평균상대오차/%	0.481	1.356	2.187	4.03	6.799

표 6에서 보는바와 같이 량자소둔법의 단위장애크기에 해당한 평균상대오차는 약 0.4%로서 비교적 작다. 따라서 이 방법은 야외탐사자료해석에 매우 적합하다고 볼수 있다.

맺 는 말

탐색반경의 변화방식을 해당한 관측자료의 특성에 근거하여 합리적으로 선정하는것이 해석정확도에 큰 영향을 준다. 량자소둔법은 항장애특성이 상대적으로 좋으므로 야외관측자료해석에 적합하다.

참 고 문 헌

[1] 潘文勇; 物探与化探, 34, 4, 528, 2010.
[2] 魏 超 等; 地球物理学报 49, 2 ,577, 2006.

주체108(2019)년 4월 5일 원고접수

Characteristic Evaluation of Influencing Factors of Quantum Annealing Method in the Inversion of 2D Self-Potential Anomalies

Pak Kyong Hun

We analyzed and evaluated the characteristic of influencing factors of quantum annealing method in the inversion of 2D self-potential anomalies.

Key words: quantum annealing, self-potential, influencing factor