蒙特卡洛非线性反演方法及应用

姚　姚　编著

冶金工业出版社

国家自然科学基金资助项目成果

蒙特卡洛非线性反演方法及应用

姚 姚 编著

北 京
冶 金 工 业 出 版 社

内 容 提 要

本书较系统地介绍了各种蒙特卡洛非线性反演方法，如传统蒙特卡洛法、模拟退火法、遗传算法等的基本理论和各种实用方法，以及在实际应用时需要解决的一些具体问题，同时介绍了它们的应用范围和实际应用效果，给出了它们的发展动态。

该书内容充实、先进，涉及面广，理论与实用并重。反映了学科之间交叉对科学技术发展的影响，可作为从事反演理论、方法研究的技术人员，如地球物理、图像处理、信号数字处理、计算机设计等专业的技术人员和有关大专院校师生参考。

图书在版编目（CIP）数据

蒙特卡洛非线性反演方法及应用/姚姚编著. —北京：冶金工业出版社，1997.9

ISBN 7-5024-2097-5

Ⅰ.蒙…　Ⅱ.姚…　Ⅲ.蒙特卡洛法　Ⅳ.O242.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字（97）第 14671 号

出版人　卿启云（北京沙滩嵩祝院北巷 39 号，邮编 100009）
责任编辑　姚参林　　责任校对　王贺兰
北京昌平长城印刷厂印刷；冶金工业出版社发行；各地新华书店经销
1997 年 10 月第 1 版，1997 年 10 月第 1 次印刷
850mm×1168mm　1/32；5.75 印张；154 千字；176 页；1-800 册
11.50 元

前　言

反演是研究由实测数据推断物理系统模型参数的理论和方法，广泛应用于自然科学的各个领域。每一位分析过数据的应用科学工作者都自觉或不自觉地实践过反演。一个物理系统若能用一组数值（或连续函数）完全描述，则这组数值（或函数）就称为模型参数。模型参数可能不能直接测量，需要利用一些可观测的数据对其进行推断，从而了解该物理系统的性质，就要利用反演。"反演"是相对"正演"而言的。正演是对给定的任意模型参数值用把模型参数和观测数据联系起来的、反映物理规律的数学公式预测可观测数据值的过程；反演则是根据给定的可观测数据值推断模型参数值的过程。

反演问题存在于自然科学的许多分支中。例如层析成像、图像处理、信号数字处理、曲线拟合和曲面拟合、震源定位、因子分析、地球物理数据分析、计算机设计等。因此，它的发展受到广大自然科学工作者的注意。随着电子计算机的发展，反演理论，特别是反演方法也得到了飞跃的发展。具有各种背景和目的的科学家们都在致力于这一具有强大生命力的课题的研究，取得了丰硕成果。但是，由于反演问题的复杂性，它的发展是相当困难的。

多数反演问题有一个共同的特点，即求解反演问题比求解相应的正演问题要复杂得多。以最简单的直线拟合为例，假设已知在一定深度范围内某岩石的密度随深度增加而变大，满足规律 $\rho=az+b$，其中 a、b 为常数。若已知 $a=0.01$，$b=3.2$，求任一深度 z 处的密度 ρ 是正演问题，比较简单，仅一次乘法和一次加法而已。若 a、b 的值未知，欲通过实测的不同深度处岩样的密度值 ρ_1、ρ_2、…、ρ_N 求 a、b 的值则是一个反演问题。显然，这是一个用直线拟合一组观测数据的问题，比相应的正演问题复杂得多。

反演中欲求解的模型参数可以是离散的，也可以是连续的。前

者为离散反演问题，后者为连续反演问题。因为实际工作中需要用计算机处理反演问题，计算机只能处理有限个离散的数，故离散反演是反演方法研究的主要对象。某些实际问题本身是离散问题，自然相关的反演为离散反演。对于本身是连续问题的那些问题，为了能用离散反演方法处理，需要进行离散化，即用一组有限的离散参数来逼近连续函数。当然，离散化是一种近似，总难以达到利用连续函数进行研究的精度；况且离散化在某种程度上总有一定随意性，这会给反演带来一定的不精确性。连续反演的研究主要涉及反演的理论问题；而离散反演的研究也常给反演理论提供有价值的见解。本书主要讨论反演方法，故主要涉及离散反演。

联系模型参数和观测数据的物理关系若是线性的，则相应的反演是线性反演；若是非线性的，则是非线性反演。目前，线性反演理论和方法已有一套完整的体系。巴克斯（G. E. Backus）和吉尔伯特（J. F. Gilbert）首先对连续线性反演问题作了系统的研究，引进了一些有意义的概念，如“模型分辨率”等，给出了巴克斯-吉尔伯特（Backus-Gilbert）公式，建立了较为完整的线性反演理论。威金斯（R. A. Wiggens），杰克逊（D. Jackson）和富兰克林（J. N. Franklin）等人对离散线性反演进行了详细的研究，提出了广义线性反演方法，使线性反演更趋成熟，形成了系统的、标准的求解方法，并在实际工作中得到了广泛的应用。但是，在现实的物理世界中，联系模型参数和观测数据的物理关系往往是非线性的。用线性反演方法处理非线性反演问题总显得“力不从心”，因此必须发展非线性反演方法。与线性反演相比，非线性反演无论在理论上还是在处理方法上都要困难得多，故非线性反演理论、方法相对而言至今还处在不太完善的状态。近年来，由于广大科学工作者的不懈努力，一类基于统计理论的非线性反演方法——蒙特卡洛（Monte Carlo）方法得到了迅速发展，并在实际工作中得到了应用，表现出强大的生命力。本书将系统介绍这类非线性反演方法，以飨读者。

对反演问题的探讨历来都存在着两种方法：确定性方法和统计学方法。前者认为观测数据和模型参数都是确定量，用代数方法求解反演问题，获得解的估计值。后者将观测数据和模型参数均作为随机变量处理，用统计方法确定反演解所服从的概率分布。实际上，从本质上而言，两种方法是一致的：一个确定的估计值往往正是其概率分布的期望值。两种方法的差别仅在于强调的侧面不同而已。本书涉及的蒙特卡洛方法是典型的统计学方法。书中自然主要采用概率计算的语言和用概率公式来求解反演问题。

本书是作者在长期从事蒙特卡洛非线性反演方法研究中对该方法的理解和总结，特别是作者完成国家自然科学基金项目“模糊蒙特卡洛地球物理非线性反演”成果的总结。因涉及的内容已不仅是地球物理领域，故书名中无“地球物理”字样。当然，书中字里行间的许多方面与地球物理密切相关，但并不影响其在自然科学的其他领域中的应用。

全书共分四章。第一章简单地讨论一般反演、离散反演、非线性反演等反演的基本理论问题，目的是为阅读理解后面章节的方便及作为一个完整体系的连续性。第二章讨论传统蒙特卡洛反演方法。蒙特卡洛方法早在18世纪已被用来求解某些难以解决的问题（例如计算π值，求数值积分值等）。传统蒙特卡洛反演方法不仅在方法上有其特殊之处，在对解的评价方面也有其特点，因此有必要对其作一定介绍。第三、四章是本书的重点，介绍两种最有前途、最实用的现代蒙特卡洛反演方法——模拟退火法和遗传算法；对这些方法的理论基础、处理方法、各种变种及最新的发展均作详细介绍，特别是对它们在各个领域中的应用以及应用中需解决的若干实际问题进行了有益的探讨，以利于广大读者在实际工作中使用和发展这些方法。附录对有关的一些概率统计基本概念作了简单介绍。

非线性反演问题由于难度较大，故非线性反演方法常借鉴一些新兴学科的前沿理论作为基础，涉及的面较为广泛。例如蒙特卡洛非线性反演中的模拟退火法的基础是统计物理学，遗传算法

的基础是生物工程等。这些基础本身是相关学科的前沿课题，还在不断地发展、完善之中。由于作者的水平有限，书中可能存在不少片面性和错误，欢迎读者提出宝贵意见。本书的目的在于“抛砖引玉”，希望能给读者在这一领域的学习和研究中有一定帮助，能否达到目的还有待实践的检验。

目　录

1 反演问题的一般论述

有关反演问题的一般论述可在许多文献中见到。为了全书的系统性，为了以后章节讨论问题的方便，本章将简单地对某些内容进行回顾，以使读者对一般反演问题和反演方法有一概括性了解。这种概括性的了解对以后深入理解和研究蒙特卡洛非线性反演方法有很大帮助。

1.1 反演问题的提法

设所研究的物理系统（模型）为 $\boldsymbol{m}$。对天文学家而言，该物理系统可能是星系；对地球物理学家而言，它又可能为地球；对量子物理学家而言，它还可能是量子。应该注意的是，$\boldsymbol{m}$ 仅仅是一个数学抽象，可以用不同的量加以描述。其一，对同一物理系统（模型），可以从不同方面进行描述。例如，可以用地球内部各点密度来描述“地球”这一物理系统；也可以用各点弹性性质来描述它。不同方面自然需要使用不同的物理量。其二，对物理系统的同一方面，也可以用不同的量加以描述。例如，为了描述固体的弹性性质，可以使用每一点 x 处的弹性刚度张量 $C_{ijkl}(x)$，也可以使用各点处的弹性柔度张量 $S_{ijkl}(x)$。有下述关系存在

$$\begin{cases}\sigma_{ij}(x) = C_{ijkl}(x)\varepsilon_{kl}(x) \\ \varepsilon_{ij}(x) = S_{ijkl}(x)\sigma_{kl}(x) \\ C_{ijkl}S_{klmn} = \delta_{im}\delta_{jn}\end{cases} \tag{1-1}$$

式中 $\sigma_{ij}(x)$、$\sigma_{kl}(x)$ 为点 x 处的应力张量；$\varepsilon_{ij}(x)$、$\varepsilon_{kl}(x)$ 为点 x 处的应变张量；δ_{im}、δ_{jn}为克罗内克符号，即二阶单位张量。描述固体的弹性性质时，使用 $C_{ijkl}(x)$ 还是 $S_{ijkl}(x)$ 没有固有的选择。

描述物理系统（模型）的量可能是不可直接测量的。例如地球内部各点的密度无法直接测量；又如固体内部各点的刚度或柔

度都是不可直接测量的。为了获得这些不可直接测量的量的信息，需要利用与这些不可直接测量的量有密切关系的一些可以直接测量的量。例如与地球内部各点密度有关的地面上各处的重力值，与固体刚度或柔度有关的对固体施加一定外力后的形变等都是可以直接测量的量。这种可以直接测量的量就是观测数据 $\boldsymbol{d}$。

物理理论或规律 $\boldsymbol{G}$ 将物理模型与观测数据联系起来，即

$$\boldsymbol{d} = \boldsymbol{G}\boldsymbol{m} \tag{1-2}$$

从数学观点而言，$\boldsymbol{G}$ 是一个已知的映射算子。

由给定的 $\boldsymbol{m}$ 值计算 $\boldsymbol{d}$ 的过程称为正演；而由 $\boldsymbol{d}$ 反推 $\boldsymbol{m}$ 的过程称为反演。$\boldsymbol{G}$ 为线性算子是线性问题（相应的反演为线性反演）；$\boldsymbol{G}$ 为非线性算子则是非线性问题（相应的反演为非线性反演）。

反演问题的求解与正演问题密切相关。这句话包含两层意义。一层意义为，若正演问题遇到困难，没有解决（即物理规律还不清楚），则反演问题无法解决。另一层意义为，在许多反演求解中（特别是在非线性反演求解中）需要进行正演计算。因此，欲求解反演问题，首先必须假设相应的正演问题已经获得解决。

数学上，除了上述用算子方程的形式讨论正、反演问题之外，也可以用积分方程的形式讨论正、反演问题。一个物理系统的模型函数 m（ζ）与观测数据 d（x）通过一积分方程联系起来

$$d(x) = \int G(x,\zeta)m(\zeta)\mathrm{d}\zeta \tag{1-3}$$

式中 G（x，ζ）为已知的核函数，或称格林（Green）函数，是已知的物理规律的抽象。同样，由给定的 m（ζ）计算 d（x）的过程称为正演，而由 d（x）反推 m（ζ）的过程称为反演；核函数 G（x，ζ）与 m（ζ）无关是线性问题，核函数 G（x，ζ）与 m（ζ）有关则是非线性问题。

讨论反演问题时，若模型与观测数据用连续函数表示，则是连续反演；若用离散参数表示，则是离散反演。由于观测数据往往是离散的；处理反演问题必须使用计算机，计算机只能处理离散的数，故讨论离散反演更具实用价值。某些实际问题本身是离

散问题，相关的反演必定为离散反演。更多的问题是连续问题，为了进行离散反演，必须进行离散采样（离散化），即用有限个离散的数逼近连续函数。例如，密度随深度的变化函数可以用有限个彼此相隔很近的深度点上的密度值表示，或者用一组具有有限个系数的样条表示。但是，离散化是一种近似。这一近似总达不到利用连续函数进行研究的精度。而且离散化在某种程度上具有随意性，这给反演会带来一定的不确定性。当然，可以事先给以一定的精度要求。只要连续函数与采样间隔相比足够平滑，则可以达到精度要求。不过，用连续函数表示的模型本身是反演欲求的解，对它的性状（如平滑性质等）不可能事先了解得十分清楚，故难以确定相隔多近进行采样才能达到给定的精度要求。因此，在讨论反演理论问题时连续反演扮演着重要的角色。离散反演的研究更多地是依靠向量理论而不是复杂的泛函或算子理论，较为简单。因此，它除了在实用方面有重要价值外，其研究的某些结论仍是研究一般反演理论的良好出发点。

离散反演中离散化的模型参数可以用维数为 M 的向量 $\boldsymbol{m}$ 表示：$\boldsymbol{m}=(m_1, m_2, \cdots, m_M)^T$；观测数据可以用维数为 N 的向量 $\boldsymbol{d}$ 表示：$\boldsymbol{d}=(d_1, d_2, \cdots, d_N)^T$。模型参数与观测数据之间以隐式方程 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{d}, \boldsymbol{m})=0$ 的形式或显式方程 $\boldsymbol{d}=\boldsymbol{g}(\boldsymbol{m})$ 的形式相联系。它们均是向量方程，可能由任意复杂的向量函数组成。若向量函数为线性函数，则反演为线性反演；若向量函数为非线性函数，则反演为非线性反演。离散线性问题可归结为矩阵方程，故离散线性反演的数学描述常与矩阵方程的求解相联系。离散非线性问题的向量方程变化形式要复杂得多，难以作统一的描述。

离散线性反演理论中谈到，若模型参数向量的维数 M 大于观测数据向量的维数 N，则反演的解不唯一。这一结论对离散非线性反演同样适用，甚至更为严格。有些实际问题本身是离散的，其模型参数向量的维数固定不变，观测数据量过少会造成解不唯一。这一问题可以通过增加观测量来加以解决。大多数实际问题是连续的，问题要复杂得多。从反演理论而言，无论怎样增加观测量，

它们也只能为有限个数据，而连续函数具有无限个值；用有限个数据反演无数个模型参数值总是非唯一的。当然，通过离散化采样，模型参数个数成为有限的，反演可能求出“唯一”解。但这个解并不一定能充分反映真实物理系统的性状。因此，在实际工作中，反演的非唯一性问题常常存在，是要密切注意的一个重要问题。

此外，反演的稳定性是要加以注意的另一个问题。所谓稳定性，可以用当数据 $\boldsymbol{d}$ 有微小扰动 $\Delta\boldsymbol{d}$ 时，反演求得的解与真解间的差 $\Delta\boldsymbol{m}$ 的大小来判断。若相当大则是不稳定的，反之则是稳定的。用数学的语言叙述，就是若解连续地依赖于观测数据则是稳定的，否则就是不稳定的。

由上述论述可以看到，与相应的正演相比，反演要复杂得多。除了计算上的困难之外，还存在非唯一性和稳定性的考虑。方程（1-3）是第一类弗雷德霍姆（Fredhom）积分方程。巴克斯（Backus）和吉尔伯特（Gilbert）已经证明，对于任一有限观测数据集，此方程的解是非唯一的，也是不稳定的。因此，对于连续反演而言，非唯一性和不稳定性是本质的，即问题是不适定的，不可能求得经典意义下的“真”解。但是，不可能求得真解并不意味着不能得到关于物理系统的性质的了解。我们可以通过各种方法获得在不同意义下逼近真解的近似解，如最小二乘解、最大似然解，或者由所有可接受的解中提取出共同性质作为该物理系统的特殊性质。当然，对于离散反演而言，情况有时要稍好一些（例如当实际问题本身就是离散的那种情况有可能存在稳定的唯一解）。但是，大多数离散反演都是通过离散化采样得到的，故上述问题依然存在。线性反演存在这些问题，非线性反演中这些问题更为严重。

1.2 模型空间和数据空间

如前所述，描述一个物理系统的量的选择不是唯一的，不存在“固有的”选择。为了理论讨论的方便，可以引进一个不依赖

于任何特定量的抽象空间。该空间中的每个点都表示物理系统的一个想象的模型。这个空间称为模型空间。为了对系统进行定量的讨论，肯定要取特定的量描述系统。一旦特定的量选定之后，模型空间中的每一个点将与定量表述特定量的一组数值相联系。因此，模型空间中的点（或元素）称为模型或模型参数。完整地描述一个系统所需的数值个数可能是有限的，相应的模型空间为有限维；描述一个系统也可能需要无限多个数，则相应的模型空间是无限维的。例如，若固体是均匀的（即其性质与空间坐标无关），则 21 个弹性参数就足够对它的弹性性质进行全面描述了。此时模型空间是有限维的。若固体的弹性性质逐点变化，为了完全描述该系统就需要无限多个弹性参数值，故模型空间是无限维的。众所周知，无限维空间理论比有限维空间理论复杂，但其适用范围更广泛，研究的结论也更具一般性。因此，在无限维空间讨论反演问题与在有限维空间讨论反演问题各有其特点和意义。

模型参数很可能是不易直接观测的量。为了得到模型参数的信息，需要安排一定的物理实验进行观测，即对一些可以直接观测且与模型参数有关的量进行测量。例如，地球内部各深度处的密度难以直接观测，但与之有关的地球表面各处的重力值可以很容易测量。物理实验的安排应当使得所观测的量中携带着模型参数的最大限度的信息，即观测的量应与模型参数有最为密切的联系。例如，我们也可以通过在地面上测定地震反射波来反演地下各深度处的密度值。但是，与测量各处的重力值相比，地震反射波与密度的关系不如重力紧密，其所携带的关于密度的信息不如重力丰富。与模型参数一样，实验设备给定之后选择可测参数时仍有一定的自由度。例如，对于地震仪，可以选择正比于位移的电压输出作为观测数据；也可以选择正比于速度或加速度的电压输出作为观测数据。于是需要引入所谓的数据空间（或资料空间）这一抽象概念。它可以定义为由所有可能的仪器响应所组成的空间。任何一个可能的观测结果均为该空间的一个“分量”或点，称之为数据参数或资料参数。同样，数据空间可以是有限维

的，也可以是无限维的。与模型空间不太一样之处在于它往往是有限维的。因为观测的时间和空间总是有限的，故观测数据往往是有限的。

从空间映射的角度来看，方程（1-2）表述的是一个映射关系，即由模型空间的点 $\boldsymbol{m}$ 到数据空间的点 $\boldsymbol{d}$ 的映射，$\boldsymbol{G}$ 为一个映射算子。因此，正演就是由模型空间到数据空间的映射；而反演则是由数据空间到模型空间的逆映射，可写为

$$\boldsymbol{m} = \boldsymbol{G}^{-1}\boldsymbol{d} \tag{1-4}$$

其中 $\boldsymbol{G}^{-1}$为逆映射算子。

如果模型空间中不止一个点都映射到数据空间的一个点上，则它的逆映射就不是唯一的，即反演是非唯一的。线性反演中往往引入“零空间”的概念来谈论反演的非唯一性问题。若在模型空间中存在着一个元素 $\boldsymbol{m}^0$，它使得

$$\boldsymbol{G}\boldsymbol{m}^0 = \boldsymbol{0} \tag{1-5}$$

则除了解 $\boldsymbol{m}$（有 $\boldsymbol{G}\boldsymbol{m}=\boldsymbol{d}$）之外，必然存在另一个解 $\boldsymbol{m}^*=\boldsymbol{m}+\boldsymbol{m}^0$，它也映射到数据空间中的同一点 $\boldsymbol{d}$，因为

$$\boldsymbol{G}\boldsymbol{m}^* = \boldsymbol{G}\boldsymbol{m} + \boldsymbol{G}\boldsymbol{m}^0 = \boldsymbol{d} \tag{1-6}$$

$\boldsymbol{m}^0$ 的存在意味着模型空间中存在零空间 $\boldsymbol{a}$，其中的点在映射算子 $\boldsymbol{G}$ 的作用下的象为零函数或零向量 $\boldsymbol{0}$（图 1-1）。若模型空间中存在零空间，则反演问题的解是非唯一的。反演时我们希望恢复位于 $\boldsymbol{m}$ 中的一个解。但 $\boldsymbol{a}$ 中的任何元素均可以加到 $\boldsymbol{m}$ 中的元素上并仍

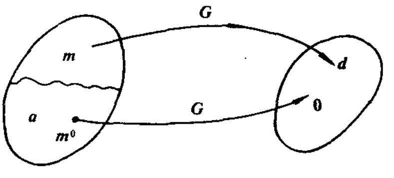

图 1-1　零空间示意图

能产生一个与实际数据拟合的模型。在非线性反演中我们仍然沿

用“零空间”这一概念。虽然零空间的分析在非线性问题中要稍微复杂一些，不像线性问题那样是简单的线性叠加，但结论是一样的，即模型空间中可能存在着使反演问题非唯一的所谓“零空间”。

实际观测数据 d 总是有误差或受到外界干扰的。真正观测到的数据为 $d_c=d+\delta d$。若存在逆映射算子 $G^{-1}d=m$，则 $G^{-1}d_c=m_c=m+\delta m$。假设 δd “较小”，即 $d_c\approx d$，若 δm 也“较小”，即有 $m_c\approx m$，则反演是稳定的；否则就是不稳定的。从空间映射关系讨论，可以这么认为：当模型空间中的点 m 附近的一个小区域上的各点与数据空间中的点 d 附近的一个小区域上的各点有对应关系（图1-2），则反演是稳定的；否则就是不稳定的。

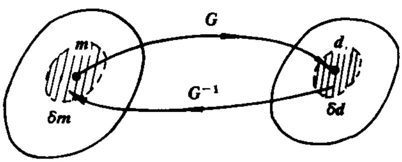

图 1-2　稳定性示意图

1.3　反演问题的求解

现代反演理论用信息论的思想讨论反演问题的求解。认为反演问题的求解实质上就是对通过观测得到的可测数据参数的实验信息、由物理理论得到的理论信息以及先验信息的综合利用。其中，先验信息的利用十分重要，几乎贯穿于反演求解的全过程中。例如，实际问题通常是连续的，为了在计算机中进行计算需要离散化，离散化有一定的随意性。如何正确地进行离散化使得所求的解与“真”解接近又不至于有太大的计算工作量需要利用先验信息。利用得好则可以得到较合理的解，否则会出现一些令人难以相信的结果。又如由地球表面的重力场反演地下介质的密度分布是一个没有唯一解的问题，没有先验信息无法进行反演。但如

果人们自信得足够说明介质分布是球状的、或柱状的、或矩形的，则可以导出十分简单的反演公式，求出反演解。

反演问题的求解也可以看作是对模型空间的搜索。在模型空间中搜索出一个其映射象为观测数据(相应于数据空间中一点)的点即为求得反演问题的一个解。由于某些反演问题的非唯一性，可能搜索出不止一个这样的点，即得到一个解集（点集）。无论是搜索一个点，还是一个点集，均是进行反演问题的求解。从模型空间的搜索角度来看，各种反演方法的不同之处在于搜索方式的不同。例如可以进行系统搜索，称为穷举法；也可以进行随机搜索，称为蒙特卡洛法；还可以仅在某个初始点附近搜索，为线性化方法。

如前所述，模型空间中有多个点的映射象同为数据空间中一点（同一组观测数据），意味着这一组观测数据可以被多个模型所满足，则反演存在着非唯一性。但是，某一组观测数据可以被许多个（甚至无数个）模型所满足并不隐含着这些模型在可能的模型参数值范围内任意变化（即在模型空间中任意位置处）。无限数量的模型可以存在于很窄的范围内，即这些模型在某些方面有一定的共性。所有的解共有的特征必然是物理系统本身的特征。将这些共性提取出来就可以得到有关物理系统的真实信息和特征。由这种思想出发，反演问题求解的一种方法是不试图求唯一解，只打算求出反演解的非唯一性范围——“所有”可能解所存在的一个共同区域的边界——上、下界。欲达到这一目的，通常是利用先验信息规定一些判别标准，或者称为约束，在这些约束下进行判别检验或计算以求得解的范围。普雷斯（Press）提出的一种蒙特卡洛非线性反演方法是这类反演求解方法的典型。

多数情况下希望能获得唯一的解，最好是“真”解。由于通常反演问题的模型空间是无限维的，数据空间是有限维的，因此反演是非唯一的。再加上观测数据中必然存在着误差和干扰，故欲求得唯一的“真”解是不可能的。一般只能求得在某种意义下的唯一“最佳”解。欲求取这种解，需要根据某些可接受的标准

建立一个所谓的“目标函数”(或称“代价函数”),求此目标函数的最小值(或最大值)所对应的一组模型参数,即为在某种意义下的“最佳”解。最常用的目标函数为观测数据 $\boldsymbol{d}$ 与按物理理论正演计算出的计算数据 $\boldsymbol{Gm}$ 之间的残差平方和(或曰二阶范数)。取其最小值所对应的那组模型参数作为“最佳”解,称为最小平方解,即在最小平方残差和意义下的“最佳”解。此时反演称之为最小平方反演。

$$Q=\|\boldsymbol{d}-\boldsymbol{Gm}\|^2\rightarrow \min \tag{1-7}$$

其中 $\|\cdot\|^2$ 表示二阶范数。另一种常用的目标函数则是由对模型参数的先验概率分布 $P(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{m})$ 用贝叶斯定理求出的后验条件概率。取其最大值所对应的那组模型参数作为“最佳”解,称为最大后验解或最大似然解,即在最大后验概率意义下的“最佳”解。此时反演称之为最大后验反演或最大似然反演。

$$Q=P(\boldsymbol{m}|\boldsymbol{d})\rightarrow \max \tag{1-8}$$

这两种目标函数所包含的内涵代表着理解反演问题求解的两种观点。以残差平方和为代表的是用代数方法求解反演问题,希望在自然科学中保持确定状态。它认为无论观测数据还是模型参数均是确定的量。由确定的量求取确定的量只能是求解代数方程。从这一观点出发,对反演问题求解时,连续反演是求解积分方程问题,离散反演是求解向量方程问题。虽然在多数情况下不可能求得唯一的“真”解,借助于以代数函数形式出现的目标函数求得在某种意义下的“最佳”解,即模型参数的某种估计值。另一种以后验概率为代表的观点来自概率论,用概率统计的语言来得到反演求解的一般公式。在反演求解理论的这一观点中,把观测数据和模型参数均作为随机变量处理,强调的主要方面是确定它们所服从的概率分布。概率分布确定了,期望值、特征值等均可以方便地用一定的公式计算出来。当然,从本质上而言,这两种观点是一致的。一个用代数方法计算出的估计值常常正是某种概率分布的期望值。例如最小二乘反演就相应于数据为高斯分布时的最大似然反演。两种观点的差别仅在于强调的方面不同而已,因