

모바일 환경에 적합한 적응형 마퀴트 알고리즘 제시

(Adaptive Marquardt Algorithm based on Mobile environment)

이종수*, 황은한**, 송상섭***

(Jongsu Lee, Eunhan Hwang, Sangseob Song)

요약

본 논문은 형광 X선 분석 시스템에서 관찰되는 스펙트럼에서 원하는 원소의 피크값을 검출하는데 쓰이는 마퀴트 알고리즘을 모바일 환경에서 더욱 효과적으로 사용하는 데에 있다. 이러한 마퀴트 알고리즘은 본래 잡음이 섞이기 전의 순수한 데이터가 무엇인지 알아가기 위한 유추해 가는 과정의 방법이다. 이러한 마퀴트 알고리즘에서 매우 중요한 역할을 하는 매개변수가 있는 테 이 매개변수에 따라서 구하고자 하는 변수 값을 더욱 빠르게 구할 수도 있고 아닐 수도 있다. 기준의 방법에서 불필요한 계산량을 줄이기 위하여 매우 중요한 역할을 하는 매개변수인 μ 자리에 이 매개변수 대신 다른 매개변수를 도입한다. 또한 하드웨어적 측면을 고려시, 여러개의 정규분포의 모양으로 되어있는 함수를 여러개의 정규분포로 나누어서 생각하면 원하는 값을 구하기 더욱 간단해지지만 신뢰도 문제가 발생할 수 있다. 이러한 문제를 해결할 새로운 시스템을 제시한다.

■ 중심어 : | 데이터 피팅 알고리즘 | 댐핑 파라미터 | 비선형 문제 | 마퀴트 알고리즘

Abstract

The Levenberg–Marquardt (LM) algorithm is the most widely used fitting algorithm. It outperforms simple gradient descent and other conjugate gradient methods in a wide variety of problems. Based on the work of paper [1], we propose a modified Levenberg–Marquardt algorithm for better performance of mobile system. The LM parameter at the k_{th} iteration is chosen $\mu = A \cdot \|f(x)\| \cdot I$ where f is the residual function, and J is the Jacobi of f . In this paper, we show this method is more efficient than traditional method under the situation that the system iteration is limited.

■ keyword : | Data fitting algorithm | Damping parameter | Nonlinear equations | Levenberg–Marquardt algorithm |

I. 서 론

XRF 장비의 디텍터로부터 획득한 스펙트럼을 기준으로 각각의 피크의 정보를 원소의 에너지 별로 검출하며, 이러한 원소의 피크의 정보가 12개의 가우시안 정규 분포의 모양으로 나타나는데, 전처리기를 통하여 미리 가우시안 정규 분포 모양의 피크가 검출되는 위치 및 정규 분포의 분산정도를 미리 알 수 있다는 점을 이용하여, 스펙트럼 각각의 신호 피크의 정도를 동시에 추정하고 분리하여 처리할 수 있는 알고리즘을 개발하였다. 디텍터를 통해 나타나는 원소의 피크 값 중 비슷한 에너지 위치에서 스펙트럼이 형성될 경우에 이를 알아내어 분리할 수 있는 방법이 필요하다. 뿐만 아니라 특히 개발하려는 장비가 휴대형이라는 점을 차안하여, 사용자가 측정하려는 시료에 장비를 일정 시간동안 움직이지 않고 가만히 있어야 하는 점이 있다. 이러한 환경에서 사용자의 편의를 위하여 적용할 수 있는 S/W 단에서 역시 기존의 알고리즘보다 훨

씬 빠른 프로세싱이 요구된다. 이러한 두 가지 측면에 중점을 두어 비슷한 에너지 위치에서 검출된 원소들을 신뢰도 구간 안에서 피크를 분리, 검출할 수 있는 알고리즘, 그리고 휴대형 환경에 적용할 수 있게 기준 보다 빠른 알고리즘을 연구하였다.

비슷한 에너지 위치에서 검출된 원소들을 분리 및 검출 할 수 있는 알고리즘 중 대표적으로 마퀴트 알고리즘을 들 수 있다. 이 마퀴트 알고리즘을 통해 검출기에서 수신한 데이터를 기초로 하여, 본래 잡음이 섞이기 전의 순수한 데이터가 무엇인지 알아가기 위한 유추해 가는 과정의 방법이라 말 할 수 있다. 마퀴트 알고리즘은 다음 식의 값을 줄여나가는 방법이다.

$$F(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m (f_i(x))^2 \quad (1)$$

위 식에서 x 는 벡터이다. 그리고 f_i 는 R^n to R 에서의 하나의 함수이다. f_i 의 미분값을 야코비 행렬인데 다음과 같다.

* 이종수, 전북대학교 전자공학과

** 황은한, 전북대학교 전자공학과

*** 송상섭, 전북대학교 전자공학과

본 연구는 교육과학기술부와 한국연구재단의 지역혁신인력양성사업으로 수행된 연구결과임.

접수일자 : 2013년 6월 23일

수정일자 : 2013년 9월 11일

제재확정일 : 2014년 6월 30일

교신저자 : 송상섭 e-Mail : ssong@jbnu.ac.kr

$$J(x)_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x) \quad (2)$$

여기에서 비선형 방정식인 (1)번 식을 여러차례 미분해주면 $F'(x)=J(x)^T f(x)$ 그리고 $F''(x)=J(x)^T J(x)$ 의 관계를 알 수 있다. 식 (1)이 최소값으로 갈수록 이 식을 미분한 값인 $F'(x)$ 값이 0에 가까워 진다. 따라서 찾고자 하는 변수를 구하기 위해 $F'(x)=0$ 로 놓고 계산해 보면 $x_{min}=-(J(x)^T J(x))^{-1} J(x)^T f(x)$ 의 식을 구할 수 있게된다. 본론에서 전통적으로 쓰이는 마厩트 알고리즘을 소개하고 난 뒤 본 논문에서 모바일 환경에 적합하게 계산량을 줄인 새로운 마厩트 알고리즘을 제시한다. 그리고 나서 시뮬레이션 결과를 보여준 다음 마지막으로 결론을 맺는다.

II. 본 론

1. 마厩트 알고리즘

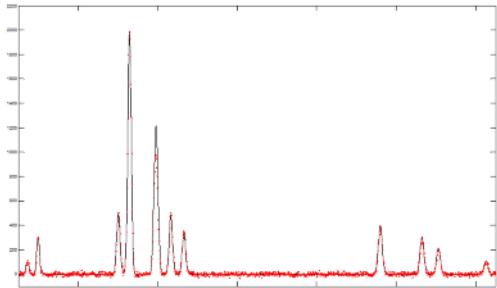


그림 1. 피크분리 결과

디텍터로 들어오는 스펙트럼 데이터는 그림 1과 같다. 이러한 데이터를 수신한 다음 구하고자 하는 파라미터 값을 각각 원소가 위치하는 자리의 값으로 초기화한다. 그런 다음 12개의 가우시안 정규분포의 함수를 단 하나의 함수로 생각하여 새로 개발한 마厩트 알고리즘을 수행하여 12개의 위치에 있는 각각의 원소의 피크값을 모두 구한다. 여기에서 12개의 정규분포의 함수를 프로세싱 하드웨어적인 측면을 고려하여 하나의 함수로 각각 하나씩 분할하여 12번의 마厩트 알고리즘을 수행할 수 있다. 하지만 이런 경우에 있어서 12개의 원소의 위치가 비슷한 위치에 있으면 매우 좋지 않은 피크분리 검출 성능을 보일 수 밖에 없다. 따라서 원소의 피크의 위치가 비슷한 곳에 나타날 경우를 대비하여 단 하나의 함수로 생각하여 마厩트 알고리즘을 수행한다. 이 때, 마厩트 알고리즘을 여러번 수행하면 원소의

피크값의 신뢰도를 보장할 수 있지만, 프로세싱 속도는 많은 연산량 요인으로 느려지게 된다. 원하는 알고리즘 성능을 요구하면서 보다 빠른 알고리즘 프로세싱을 위하여 마厩트 알고리즘에서 매우 중요한 역할을 하는 파라미터 값을 변형시킨다.

수신한 스펙트럼에는 포아송 잡음이 섞여 여러개의 원소를 가리키는 가우시안 정규분포의 왜곡으로 표현 된다. 특히 비슷한 에너지 위치에서 스펙트럼이 형성된 경우 이를 알아낼 방법이 필요한데, 이러한 경우 역시 Nonlinear Least Square Fit 방법의 하나인 마厩트 알고리즘을 이용하여 피크의 값을 알아낼 수 있다. 마厩트 알고리즘은 검출기에서 수신한 데이터를 기초로 하여, 본래 잡음이 섞이기 전의 순수한 데이터가 무엇인지 알아가기 위한 유추해가는 과정의 방법중 하나이다.

Nonlinear Least Square 란 구해야 할 힘수가 선형이지 않은 정규분포함수와 같은 경우에 사용할 수 있는 방법이라고 할 수 있다. 선형의 경우는 단순한 연립방정식으로 잡음이 섞이기 전의 순수한 데이터를 명백하게 단지 수식으로 유추할 수 있다. 이에 반해 비선형 함수의 경우 찾고자 하는 파라미터 벡터를 알고리즘 안에서 매번 일정한 횟수 안에서 갱신시켜 구하고자 하는 값이 신뢰구간의 값으로 수렴하면 더 이상 알고리즘을 수행하지 않고 멈춘다. 이렇게 알고리즘 안에서 일정히 매번 적당한 파라미터 값을 찾아나가는 과정을 Nonlinear Least Square Fit 방법이라 말한다.

Nonlinear Least Square Fit 방법 중에, 유추한 데이터가 원래의 데이터와 비슷하지 않을 때, Gradient 방법이 효율적인 반면, 유추한 데이터가 원래의 데이터와 비슷할 경우 First order expansion 방법이 효율적이다. 이러한 점을 이용하여 두 개의 방법을 하나의 방법으로 묶어 만든 알고리즘이 마厩트 알고리즘이라 한다[2][3].

이러한 마厩트 알고리즘은 다음 식 (3)의 연산을 풀어가는 과정이라 말할 수 있다.

$$(J^T J + \mu I)h = -g \text{ with } g = J^T f \text{ and } \mu \geq 0 \quad (3)$$

그리고 식(3)에서 찾고자 하는 변수값을 구하기 위해 μ 값을 바꿔줘야 하는데 위 식에 대한 알고리즘을 다음과 같이 표현 할 수 있다.

```

Algorithm 1 – Classic Levenberg-Marquardt
Begin
    k=0;
    x=x0;
    A=J(x)^T J(x);
    g=J(x)^T f(x);
    if (||g||<e1)
        found;

```

```

while (not found) and (k<kmax)
    k=k+1;
    solve (A+ μI)h=-g
    if (||h|| < e2(||x|| + e2)
        found = true;
    endif
    else
        xnew=x+h;
        ρ = F(x)-F(xnew);
        if (ρ>0)
            x=xnew;
            A=J(x)TJ(x);
            g=J(x)Tf(x);
            if (||g||<e1) found;
            μ=μ·0.1;
        endif
        else
            μ=μ·2;
        endif
    endwhile
end

x=x0;
A=J(x)TJ(x);
g=J(x)Tf(x);
if (||g||<e1)
    found;
while (not found) and (k<kmax)
    k=k+1;
    solve (A+A||f(x)||I)h=-g
    if (||h|| < e2(||x|| + e2)
        found = true;
    endif
    else
        xnew=x+h;
        ρ = F(x)-F(xnew);
        x=xnew;
        if (ρ>0)
            A=J(x)TJ(x);
            g=J(x)Tf(x);
            if (||g||<e1) found;
        endif
    endwhile
end

```

마퀴트 알고리즘에서 구하고자 하는 새로운 파라미터 즉 스펙트럼의 피크값이 x 인 알고리즘의 매번 iteration 마다 μ 값을 갱신시킨다. 행렬의 대각원소의 값인 μ 값을 더해줌에 따라 두 개의 Gradient 방법과 First order expansion 방법을 하나의 알고리즘으로 융합한다. 즉 μ 값을 큰 수로 올려주면 계산에서 미분이 한번 필요한 Gradient 방법으로 작동하고, μ 값을 작게 만들어주면 모든 행렬의 값이 무시할 수 없는 요소가 되기 때문에 이차미분이 필요한 First order expansion 방법으로 작동되게 된다.

2. 새로 제시하는 마퀴트 알고리즘

마퀴트 알고리즘에서 구하고자 하는 파라미터의 값 x 에 따라 한번 미분한 $J(x)$ 의 값이 nonsingular 이어야 작동한다. 두 번째로 휴대형 XRF 장비에 적용해야 하는 점을 감안하여 높은 신뢰도의 값을 구하기 위해 알고리즘 계산식이 너무 복잡하여 프로세싱 시간이 길어지면 이 또한 극복해야 할 문제인 것이다. 이러한 문제점을 극복하고자 $(A+ \mu I)h=-g$ 의 식[4][5]에서 알고리즘이 제대로 유추하면 작게 만들고 제대로 유추하지 못하면 크게 만드는 μ 의 파라미터 대신 계산량을 줄이고자 다른 파라미터를 대신 넣어주었다. 마퀴트 알고리즘이 제대로 잘 유추하면 Least Square 의 값이 작아지고 그와는 반대로 알고리즘이 유추하면 Least Square 의 값이 커지는 특성을 이용하여 대신에 μ 의 파라미터를 알고리즘에서 없애는 대신 Least Square 값인 $f(x)$ 을 넣어주었다. 본 논문을 통해 제시하는 새로운 알고리즘은 다음과 같다.

```

Algorithm 2 – Modified Levenberg-Marquardt
Begin
    k=0;

```

3. 시뮬레이션 결과

기존의 마퀴트 알고리즘 성능과 새로 제시하는 알고리즘의 비교를 위하여 10,000번 정도 테스트하여, 알고리즘을 통하여 유추한 피크와 구하고자 하는 원래의 피크값과의 정확도가 95% 이상인 경우에만 카운트하여 Frame Rate 와 iteration 반복 횟수에 따른 신뢰구간으로의 수렴 정도를 분석하였다.

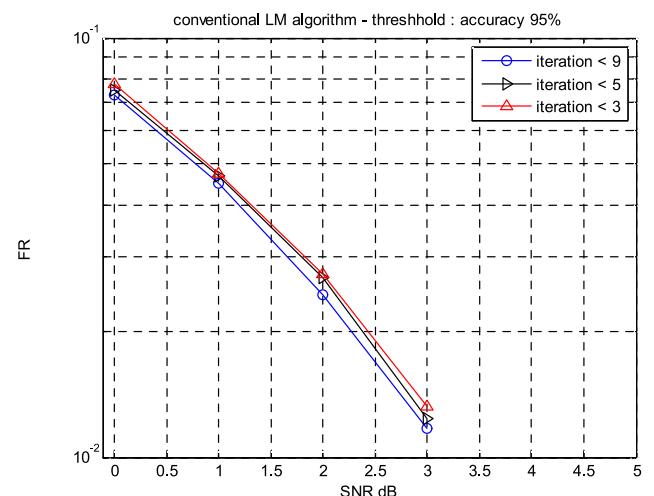


그림2. 각각의 iteration 경우, 신뢰 구간 95%를 보이는 SNR에 따른 Frame Rate

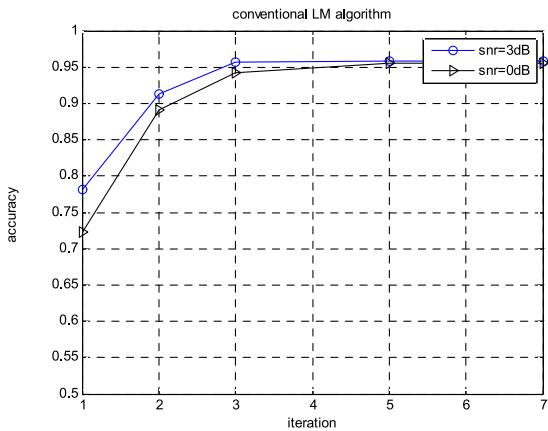


그림3. iteration 수에 따른 신뢰구간으로의 수렴

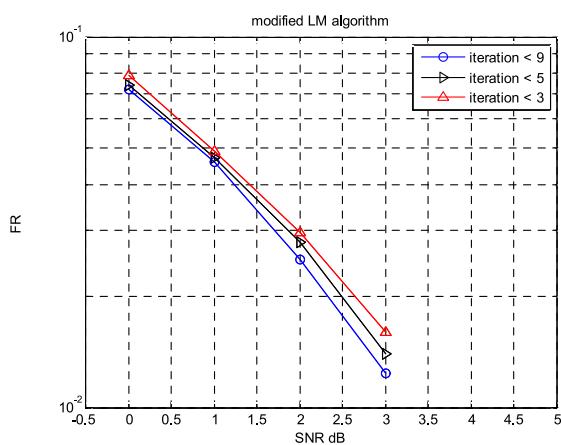


그림4. 각각의 iteration 경우, 신뢰 구간 95%를 보이는 SNR에 따른 Frame Rate

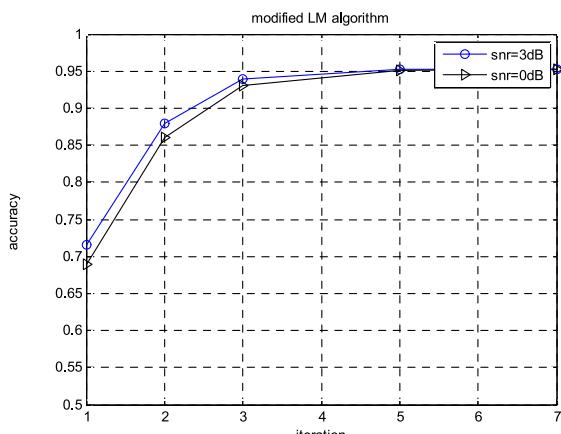


그림5. iteration 수에 따른 신뢰구간으로의 수렴

그림2와 4 그리고 그림3과 5를 비교해서 보면, 새로 제시한 알고리즘과 기존의 마厩트 알고리즘과의 성능 차이가 거의 없음을 확인하였다. 하지만 새로 제시한 마厩트 알고리즘을 통하여 기존 마厩트 알고리즘 보다 더 휴대형 장비의 특수성에 맞는 대략 20% 정도 계산횟수가 줄어드는 것을 확인하였다. 이는 기존 알고리즘에서 사용되는 파라미터를 없애줌으로 생긴 효과라 할 수 있다.

표1. 기존 마厩트 알고리즘과 새로 제안한 마厩트 알고리즘 간의 계산량의 비교

기존 마厩트 알고리즘	제안 마厩트 알고리즘
전체수식 계산량	전체수식 계산량
57	47

4. 적용형 마厩트 알고리즘 시스템

적용형 피크 분리 알고리즘 개발로써 그림 1의 피크분리 결과를 보면 12개의 위치에서 12개의 각각 다른 원소의 피크가 나와야 함을 알 수 있는데, 그림에서는 5번째와 6번째의 원소가 나오는 스펙트럼 위치가 비슷하기 때문에 하나의 정규분포 모양으로 보임을 알 수 있다. 5번째와 6번째의 원소의 피크값을 잘 검출하기 위하여 디텍터로부터 나오는 12개의 정규분포를 단 하나의 함수로 놓고 알고리즘을 수행하였다. 하지만 이렇게 알고리즘을 수행할 시에 하드웨어적인 측면으로 부담을 줄 수 밖에 없다. 따라서 전처리기를 통하여 각각의 원소가 어느 위치에서 나오는지 사전적 정보를 가지고 있기 때문에 비슷한 위치의 원소들의 피크 값은 정규분포를 하나의 함수로 놓고 알고리즘을 수행하고 어느 정도 떨어져 있는 원소들의 피크값들은 각각 따로따로 하나의 함수로 생각하여 알고리즘을 수행할 수 있다. 예를 들어 그림1과 같은 경우에는 12개의 원소의 위치를 검출하기 위하여 적용형 피크 분리 알고리즘으로 11개의 정규분포로 분할한 다음 각각의 11개를 가지고 알고리즘을 수행한다. 단 5번째와 6번째의 원소가 비슷한 위치에 있다는 정보는 사전정보로 알고 있어야 한다. 시뮬레이션 결과 하나의 원소의 위치에서 그 원소의 분산값의 3배 되는 영역에서 다른 원소의 분산값의 3배 되는 영역과 겹쳐지지 않은 경우에 원래의 시스템과 같은 성능을 보임을 확인 할 수 있었다. 적용형 피크 분리 알고리즘은 같은 성능에서의 하드웨어 복잡도를 줄여준다라는 점에서 매우 큰 장점이라 할 수 있다.

III. 결 론

디텍터의 특징에 따라 XRF 장비를 사용시, 원소의 에너지 스펙트럼이 여러 개의 가우시안 함수모양으로 퍼지게 되는데, 이 중 비슷한 에너지 위치에서 스펙트럼이 형성될 경우 이를 알아낼 방법이 매우 중요해진다. 특히 휴대형 장비의 경우 사용자의 편의를 위해 기존 마厩트 알고리즘 보다 더욱 빠른 프로세싱이 요구된다. 따라서 본논문에서는 이러한 환경에서 적용할 수 있는 알고리즘을 개발 및 시스템을 제시한다.

참 고 문 헌

- [1] J. Y. Fan and Y.X. Yuan, "On the convergence of a new Levenberg-Marquardt method", Report No. 005, AMSS, Chinese Academy of Sciences, 2001.
- [2] K. Levenberg, "A method for the solution of certain nonlinear problems in least squares", Quart. Appl. Math., 2 (1944), 164-166.
- [3] D. Marquardt, "An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters," SIAM J.APPL.Math., 1963, Vol. 11, pp. 431-441.
- [4] Kelley, C. T: Iterative methods for optimization (Frontiers in Applied Mathematics 18). Philadelphia: SIAM 1999.
- [5] More, J. J.: Recent developments in algorithms and software for trust region methods. In: Mathematical programming: The state of art. (Bachem, A., Grotshel, M., Korte, B., eds.), pp. 258-287. Berlin: Springer 1983



송상섭(정회원)

1978년 전북대학교 전기공학과 학사 졸업.
1980년 KAIST, 전기및전자공학과 석사 졸업.
1990년 마니토바대학교, 전기및컴퓨터공학과 박사 졸업.

<주관심분야 : 정보통신, 신호처리, 인터넷 보안 >

저 자 소 개



이종수(학생회원)

2008년 전북대학교 전기전자공학과 학사 졸업.
2010년 전북대학교 전자공학과 석사 졸업.
현재 박사과정

<주관심분야 : 정보통신, 오류정정부호, 미디어 신호처리>



황은한(학생회원)

2010년 전북대학교 전기전자공학과 학사 졸업.
현재 석사과정

<주관심분야 : 정보통신, 신호처리, 인터넷 보안>