독립성분분석을 이용한 혼합물내의 순수물질 구성비 추정

Estimation of Pure Component Fractions in a Mixture Using Independent Component Analysis

전치혁*, 이혜선*, 박해상*, 홍재화**

* 포항공과대학교 산업경영공학과, {chjun,heylee,shoo359}@postech.ac.kr
**포스코 기술연구소 계측연구그룹, hongjh@posco.co.kr

Abstract

Independent component analysis (ICA) is a statistical method for linearly transforming observed high-dimensional multivariate data into several statistically independent components. ICA has gained wide-spread attention in a variety of fields including spectrum application. We focus on the application of ICA for separating independent sources from a set of mixtures and estimating their fractions in a mixture. The proposed method of estimating fractions is based on the regression model subject to the non-negativity constraint on coefficients. Simulation experiments are performed to demonstrate the performance of the proposed approach.

1. 서론

독립성분분석(Independent component analysis; ICA)은 다변량 데이타로부터 서로 독립인 성분을 분리하는데 사용되는 통계적 기법이다. ICA는 주성분분석(Principal component analysis), 요인분석(Factor analysis), Projection pursuit등과 같이 일종의 선형변환방법이라고 볼수 있으며, 최근 영상의학, 통신, 이미지분석 등 다양한 분야에서 기저구조를 밝혀내기 위한 기법으로 적용되고 있다 (Ikeda and Toyama, 2000; Vigário et al., 1998). 유사한 목적으로 NMF (nonnegative matrix factorization) 등이 사용되기도 한다(Lee and Seung, 1999 & 2001).

본 연구의 목적은 ICA를 이용하여 여러가지 순수물질이 섞인 혼합물에 대하여 측정된 시그널 데이타로부터 구성성분들을 도출하고, 그 독립성분들의 구성비율을 비음최소제곱법(non-negative least squares)에 의해서 예측하는 것이다. 본 연구에서 제안한 방법의 타당성을 평가하기 위해 모의실험을 실시하였다. 결과적으로 본 연구에서 제시하는 방안은 혼합물에 대하여 측정한 시그널로부터 혼합물을 구성하는 순수물질의 시그널을 분리할 수 있으며, 나아가 순수물질 구성비를 추정할 수 있는 가능성을 보이고 있다.

2. 독립성분분석의 소개

2.1 개요

ICA방법은 데이타로부터 서로 독립인 성분을 분리해내는 미지성분분리기법이라고도 한다. 즉, p개의 서로 독립인 성분이 다양한 비율로 혼합된 m개의 대상 (이를 혼합물이라 함)에서 관측된 데이타로부터 p개의 독립인 성분을 분리하고자 하는 것이다. 단, 여기서 $m \geq p$이어야 한다. 예를 들어서 어떤 파티장에 p개의 음원(예를 들어 배경음악, 목소리등)이 있고 그 안의 여러위치에설치된 m개의 마이크로 녹음을 하여 파장데이타 (n개의 주파수에 대한 진폭)를 얻었다고 할 때, 이 ($m \times n$) 차원의 혼합물 데이타를 바탕으로 p개의 독립된 음원을 분리하는 것이다 (Hyvärinen, 1999; Hyvärinen and Oja, 2000).

S_i를 i번째(i=1,...,p) 성분을 나타내는 확률변수라 할 때 j번째 혼합물변수인 X_j는 다음과 같이 p개의 성분결합으로 이루어진다.

$$X_j = a_{j1}S_1 + a_{j2}S_2 + \ldots + a_{jp}S_p \quad (j=1,\ldots,m) \qquad (1)$$

여기서 a_{ji}는 i번째 독립성분에 대한 j번째 혼합물계수를 나타낸다. X_{jk}를 j번째 혼합물에 대한 k번째 관측치, S_{ik}를 i번째 독립성분에 대한 k번째 관측차원이라 하면(k=1,...,n), $\boldsymbol{X}=(X_{jk})$, $\boldsymbol{S}=(S_{ik})$일 때 식(1)을 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{AS} \qquad (2)$$

여기서 $\boldsymbol{A}=(a_{ji})$는 ($m \times p$) 행렬로서 혼합물계수행렬이라 한다. ICA는 관측된 $\boldsymbol{X}$로부터 S_i들이 서로 통계적으로 독립이 되어야 한다는 제약조건에서 $\boldsymbol{A}$와 S로 분리하는 것이라 할 수 있다.

2.2 비정규성척도

식(1)에서 하나의 성분을 나타내는 확률변수 S (편의상 아래첨자 생략)는 다음과 같은 형태로 나타낼 수 있다.

$$S = w_1X_1 + \ldots + w_mX_m = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} \qquad (3)$$

여기서 $\boldsymbol{w}^T=(w_1,\ldots,w_m)$은 가중치 벡터이며

$\boldsymbol{x}^T=(X_1,...,X_m)$은 혼합물 변수벡터이다. 따라서 ICA에서는 독립적인 S를 도출하기 위하여 $\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}$의 비정규성을 최대화시키는 가중치벡터 $\boldsymbol{w}$를 찾고자 한다 (Hyvärinen and Oja, 2000). 여기서 비정규성 척도로 negentropy를 사용하는데 다음과 같이 정의된다.

확률변수 벡터 $\boldsymbol{y}$의 확률밀도함수가 $f(\boldsymbol{y})$일 때 이에 대한 entropy는 다음과 같이 정의된다.

$$H(\boldsymbol{y})=-\int f(\boldsymbol{y})\log f(\boldsymbol{y})d\boldsymbol{y} \quad (4)$$

$\boldsymbol{y}$가 정규분포를 따를 때 동일한 분산을 갖는 확률변수 중 위의 entropy가 최대가 됨을 이용하여 negentropy J를 다음과 같이 정의한다.

$$J(\boldsymbol{y})=H(\boldsymbol{y}_{gauss})-H(\boldsymbol{y}) \quad (5)$$

위에서 $\boldsymbol{y}_{gauss}$는 $\boldsymbol{y}$와 동일한 분산-공분산 행렬을 갖는 정규확률변수벡터이다. 즉, 위의 negentropy는 $\boldsymbol{y}$가 정규분포를 따를 때 0이 되며 다른 분포를 따를 때는 양의 값을 가진다. 비정규성척도인 negentropy J를 최대화함으로써 비정규성을 띠게 된다.

ICA에서는 negentropy를 근사시키기 위하여 다음과 같은 식을 사용한다.

$$J(\boldsymbol{y})\approx E[G(\boldsymbol{y})]-E[G(\boldsymbol{z})]^2 \quad (6)$$

여기서 $\boldsymbol{z}$는 평균 0, 분산-공분산행렬이 단위행렬($\mathbf{I}$)인 정규확률변수를 의미하며, 함수 G로는 임의의 non-quadratic 함수를 사용할 수 있으나 보통 아래와 같은 함수를 사용한다.

$$G_1(u)=\frac{1}{a_1}\log\cosh(a_1 u) \quad (7\ a)$$

$$G_2(u)=-\exp(-u^2/2) \quad (7\ b)$$

식(7 a)에서 a_1은 $1\le a_1\le 2$에서 취해지며, a_1=1 이 자주 사용된다 (Hyvärinen and Oja, 2000).

2.3 FastICA 알고리듬

널리 사용되는 FastICA는 식(3)에서의 가중치벡터 $\boldsymbol{w}$를 구하기 위하여 식 (6)의 negentropy를 최대화시킨다. 즉,

$$\max J(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}) \quad (8\ a)$$

$$\text{subject to } ||\boldsymbol{w}||=1 \quad (8\ b)$$

위의 최적화문제 해결을 위해 고정점알고리듬을 이용한 Newton방법을 사용한다. 결국 하나의 $\boldsymbol{w}$를 구하기 위하여는 다음과 같은 과정이 진행된다.

Step 1. $\boldsymbol{w}$의 초기값 선택

Step 2. $\boldsymbol{w}\leftarrow E[\boldsymbol{x}g(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x})]-\boldsymbol{w}E[\boldsymbol{x}g'(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x})]$
(기대치는 데이터의 평균으로 추정)
여기서 함수 g는 non-quadratic 함수 G의 미분함수이다.

Step 3. $\boldsymbol{w}\leftarrow\boldsymbol{w}/||\boldsymbol{w}||$

Step 4. 수렴하면 stop. 그렇지 않으면 Step 2 반복

알고리즘의 유도 및 상세과정은 Hyvärinen and Oja (2000)를 참조할 수 있다.

2.4 미지성분 비율예측

위의 알고리즘으로부터 $\boldsymbol{w}$를 구한후 식(3)을 이용하여 각 독립성분을 얻을수 있으며 다시 식(1)의 모형을 통하여 혼합물 계수 a_{ji}를 산출할 수 있다. 이 때 계수값은 양수 또는 음수를 취할 수 있다. 그러나 본 연구에서와 같이 a_{ji}가 j번째 혼합물의 i번째 성분의 혼합비율을 나타내는 경우에는 비음의 계수가 되어야 한다. 따라서 $a_{ji}\ge 0$이고 $\sum a_{ji}=1$인 제한식이 적용된 비음최소제곱법 (Non-negative least squares method)을 적용한다. 즉, j번째 시료에 대하여 사용되는 회귀모형은 아래와 같다.

$$X_{ji}=\sum_{i=1}^{p} a_{ij}S_{ik}+\varepsilon_{jk},\ k=1,\cdots,n \quad (9)$$

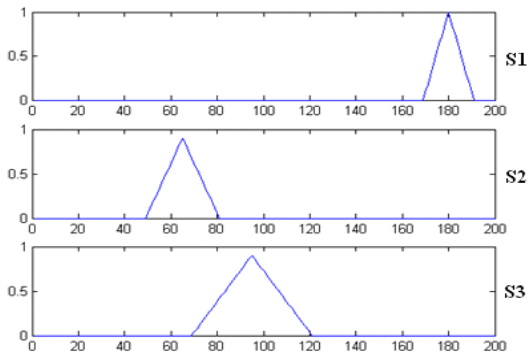
단, $a_{ji}\ge 0$, $\sum a_{ji}=1$이며, ε_{jk}는 회귀모형관련 오차항을 나타낸다. 비음최소제곱법은 Lawson과 Hanson(1974, p.161)의 알고리즘을 구현한 Matlab의 LSQNONNEG (Linear least squares with nonnegativity constraints) 함수를 이용한다.

3. 모의실험

본 제안방법의 타당성을 검증하기 위한 모의실험을 수행한다. 실제독립성분을 아는 것으로 가정하고 성분비율을 다양하게 혼합한 관측치를 생성한 후 제안한 방법에 의거한 성분비율 추정치를 실제 비율과 비교하고자 한다.

3.1 독립성분의 생성

모의실험을 위해 [그림 1]과 같은 세가지 종류의 독립성분을 가정하였는데 여기서 S_1 은 피이크가 가장 뒤쪽에 있도록 하고, S_2, S_3 은 일부 피크가 서로 겹치는 부분이 존재하도록 하였다. 여기서 x축은 관측차원, y축은 각 독립성분의 수준을 나타낸다.



[그림 1] 가정된 독립성분

3.2 독립성분 혼합비율

다양한 혼합물을 생성하기 위하여 세 가지 독립성분 S_1, S_2, S_3에 대한 실제 혼합비율은 [표 1]과 같으며 다음과 같이 생성하였다. 총 20개의 시료로 구성되는데 9번째 관측치까지는 S_1 은 없이 S_2, S_3 구성비율을 0.1씩 증가(감소)시켰고, 10번째 관측치부터는 S_1 에 대해 0.9부터 0.1씩 감소시키고 남은 비율은 S_2, S_3 의 시료1~ 9번째까지의 비율대로 할당하였다. 19번째와20번째에는 S_3 없는 두 가지 혼합비율을 포함시켰다.

혼합물데이타 $\mathbf{X}$는 다음의 식으로부터 생성하였다. 여기서 오차항 ε_{jk}은 평균이 0이고, 세 가지 수준(잡음수준)의 표준편차 (0.01, 0.05, 0.1)를 가진

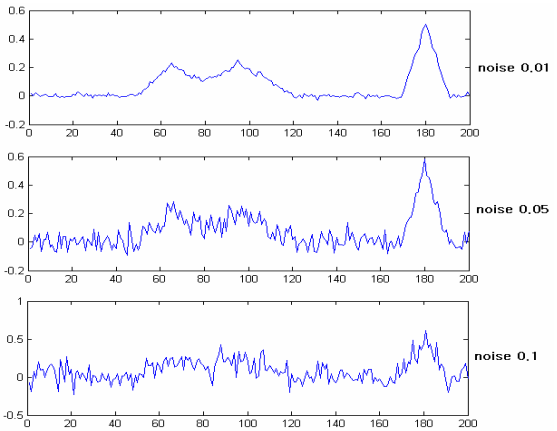
정규분포로부터 생성한다.

$$X_{jk} = \sum_{j=1}^{3} a_{ji} S_{ik} + \quad _{jk}, j=1,\cdots,20; k=1,\cdots,200 \quad (9)$$

[표 1] 시료별 실제 성분비율

시료	S_1 비율	S_2 비율	S_3 비율
1	0.00	0.10	0.90
2	0.00	0.20	0.80
3	0.00	0.30	0.70
4	0.00	0.40	0.60
5	0.00	0.50	0.50
6	0.00	0.60	0.40
7	0.00	0.70	0.30
8	0.00	0.80	0.20
9	0.00	0.90	0.10
10	0.90	0.01	0.09
11	0.80	0.04	0.16
12	0.70	0.09	0.21
13	0.60	0.16	0.24
14	0.50	0.25	0.25
15	0.40	0.36	0.24
16	0.30	0.49	0.21
17	0.20	0.64	0.16
18	0.10	0.81	0.09
19	0.20	0.80	0.00
20	0.40	0.60	0.00

한 예로 [그림 2]는 시료 14번에 대한 것으로 S_1, S_2, S_3가 각각 0.5, 0.25, 0.25로 혼합된 것이며, 오차항 표준편차(잡음수준)를 각각 0.01, 0.05, 0.1로 하였을 때 생성된 혼합물 스펙트럼을 보여준다. x축은 관측차원, y축은 독립성분의 수준이다.



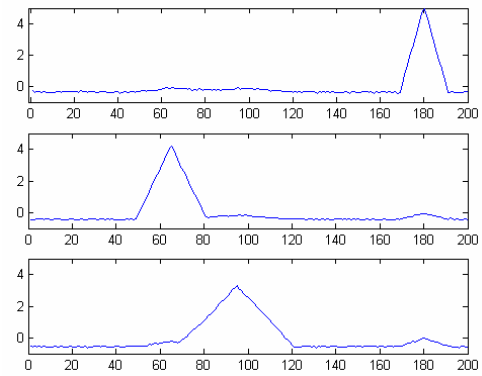
[그림 2] 잡음 수준에 따른 혼합물 스펙트럼 (14번 시료)

3.3 모의실험 결과

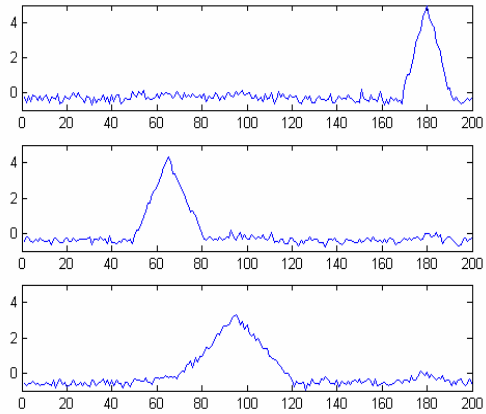
ICA 알고리즘을 적용하여 얻은 독립성분은 [그림 3]과 같으며, 잡음수준에 따라 다소 차이가 있으나 원래의 가정된 독립성분인 [그림 1]과 유사한 형태를 가짐을 볼 수 있다. 여기서 x축은 관측차원이며, y축은 독립성분의 수준이다.

[그림 3]의 세 가지 독립성분을 비음최소제곱법에 적합시켜 추정된 구성비율은 [표 2]와 같다. [표 2]의 (a)-(c)의 마지막 열은 각 독립성분의 실제비율(a_{ji})과 예측비율($\widehat{a_{ji}}$)의 차이의 절대값의 평균, 즉 평균절대오차 (MADj)를 나타낸다.

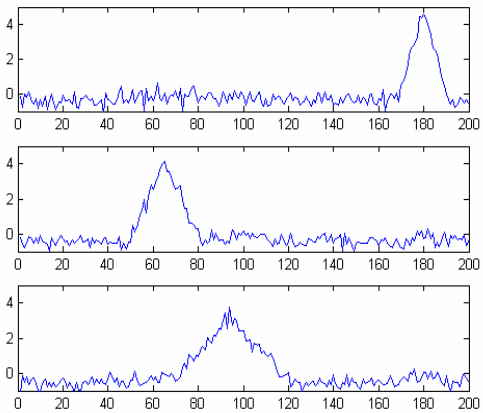
$$\text{MADj} = \frac{1}{3}\sum_{j=1}^{3} | a_{ji} - \widehat{a_{ji}} | \quad (10)$$



(a)잡음수준:0.01



(b) 잡음수준: 0.05



(c) 잡음수준: 0.1

[그림 3] ICA에 의한 독립성분 (잡음수준별)

[표 2] 예측 혼합비율의 절대값 오차

(a) 예측 혼합비율 (잡음 수준: 0.01)

표본	S_1 비율	S_2 비율	S_3 비율	MADj
1	0.00	0.02	0.98	0.05
2	0.00	0.12	0.88	0.05
3	0.00	0.23	0.77	0.05
4	0.00	0.34	0.66	0.04
5	0.00	0.45	0.55	0.04
6	0.00	0.56	0.44	0.03
7	0.00	0.68	0.32	0.01
8	0.00	0.81	0.19	0
9	0.00	0.94	0.06	0.02
10	0.93	0.00	0.07	0.02
11	0.83	0.00	0.17	0.03
12	0.72	0.04	0.24	0.03
13	0.6	0.12	0.28	0.03
14	0.48	0.23	0.29	0.03
15	0.37	0.35	0.28	0.02
16	0.26	0.52	0.23	0.03
17	0.15	0.69	0.16	0.04
18	0.04	0.90	0.06	0.06
19	0.15	0.85	0.00	0.03
20	0.37	0.63	0.00	0.02

(b) 예측 혼합비율 (잡음 수준: 0.05)

표본	S_1 비율	S_2 비율	S_3 비율	MADj
1	0.00	0.03	0.97	0.05
2	0.00	0.13	0.87	0.05
3	0.00	0.21	0.79	0.06
4	0.00	0.34	0.66	0.04
5	0.00	0.43	0.57	0.04
6	0.00	0.53	0.47	0.05
7	0.00	0.68	0.32	0.01
8	0.00	0.82	0.18	0.01
9	0.00	0.95	0.05	0.03
10	0.92	0.00	0.08	0.01
11	0.83	0.00	0.17	0.03
12	0.72	0.03	0.25	0.04
13	0.57	0.12	0.32	0.05
14	0.51	0.23	0.27	0.02
15	0.34	0.38	0.28	0.04
16	0.29	0.50	0.21	0.01
17	0.15	0.69	0.16	0.04
18	0.02	0.92	0.06	0.07
19	0.16	0.84	0.00	0.03
20	0.35	0.65	0.00	0.03

(c) 예측 혼합비율 (잡음수준: 0.1)

표본	S_1 비율	S_2 비율	S_3 비율	MADj
1	0.00	0.00	1.00	0.07
2	0.00	0.11	0.89	0.06
3	0.00	0.23	0.77	0.05
4	0.00	0.31	0.69	0.06
5	0.00	0.40	0.60	0.07
6	0.00	0.59	0.41	0.01
7	0.00	0.70	0.30	0.00
8	0.00	0.83	0.17	0.02
9	0.00	0.93	0.07	0.02
10	0.91	0.03	0.07	0.01
11	0.82	0.00	0.18	0.03
12	0.76	0.01	0.24	0.06
13	0.54	0.13	0.32	0.06
14	0.46	0.24	0.30	0.03
15	0.34	0.31	0.35	0.08
16	0.26	0.51	0.24	0.03
17	0.21	0.66	0.14	0.01
18	0.00	0.92	0.08	0.07
19	0.20	0.80	0.00	0.00
20	0.43	0.57	0.00	0.02

본 논문에서는 성분비율의 전반적인 예측정확도를 비교하는 척도로서 평균절대오차와 평균제곱근오차를 사용하였다.

$$\text{평균절대오차} = \frac{1}{60}\sum_{j=1}^{20}\sum_{i=1}^{3}|a_{ji}-\widehat{a_{ji}}| \quad (11)$$

$$\text{평균제곱근오차} = \sqrt{\frac{1}{60}\sum_{j=1}^{20}\sum_{i=1}^{3}(a_{ji}-\widehat{a_{ji}})^2} \quad (12)$$

[표 3]의 요약표를 보면 잡음수준 0.01, 0.05, 0.1에 대한 평균절대오차는 각각 0.03, 0.04, 0.04로서 잡음수준이 높아져도 구성비에 대한 예측정확도는 크게 영향을 받지 않음을 볼 수 있다. 이는 ICA에 의한 독립구성성분 도출과정에서 잡음의 영향이 어느정도 제거되기 때문이라고 보인다. 따라서 독립성분분석을 이용한 혼합물의 미지성분 비율 예측은 분광데이타에서 가질 수 있는 잡음을 고려하더라도 그 성분비율을 예측하는데 안정적인 방법이라고 하겠다.

[표 3] 잡음 수준에 따른 예측정확도의 비교

잡음 수준	평균절대오차	평균제곱근오차
0.01	0.03	0.0405
0.05	0.04	0.0455
0.1	0.04	0.0518

4. 결론

ICA는 오디오 프로세스, 의학영상 시그널분석, 이미지 분석, 통신분야, 계량경제분야 등 다양한 분야에서 그 적용범위가 넓어지고 있는 통계적 기법으로서, 독립성분이 미지인 경우 혹은 성분을 계량화하여 이차적 분석이 필요한 경우 유용한 다변량 기법이다.

본 연구에서는 혼합물의 미지 구성성분을 분리하고 분리된 성분을 이용하여 성분간 비율을 예측하는 방안을 제시하였다. 또한 ICA에 의한 성분도출과 NNLS를 이용한 비율이 적합하게 추정되는지 평가하기 위하여 모의실험을 수행한 결과 여러가지 잡음수준에서도 안정적인 예측이 가능함을 보였다.

참고문헌

Hyvärinen, A. (1999), "Survey on independent component analysis", *Neural Computing Surveys*, 2, 94-128.

Hyvärinen, A., and Oja, E. (2000), "Independent component analysis: algorithms and applications", *Neural Network*s, 13(4-5), 411-430.

Ikeda, S., and Toyama, K. (2000), "Independent component analysis for noisy data-MEG data analysis", *Neural Networks* 13, 1063-1074.

Lawson, C.L., and Hanson, R.J.(1974), *Solving least squares problems*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, chapter 23

Lee, D. D., and Seung, H. S.(1999), "Learning the parts of objects by non-negative matrix factorization", *Nature*, 401, 788-791.

Lee, D. D., and Seung, H. S. (2001), "Algorithms for nonnegative matrix factorization," in *Advances in Neural Information Processing Systems*, Vol. 13, Cambridge, MA: MIT Press, 556-562

Vigário, R., Jousma¨ki, V.,Hyvärinen, A., Hari, R., & Oja, E. (1998), "Independent component analysis for identification of artifacts in magnetoencephalographic recordings", in *Advances in Neural Information Processing Systems*, Vol. 10. Cambridge, MA: MIT Press, 229-235.