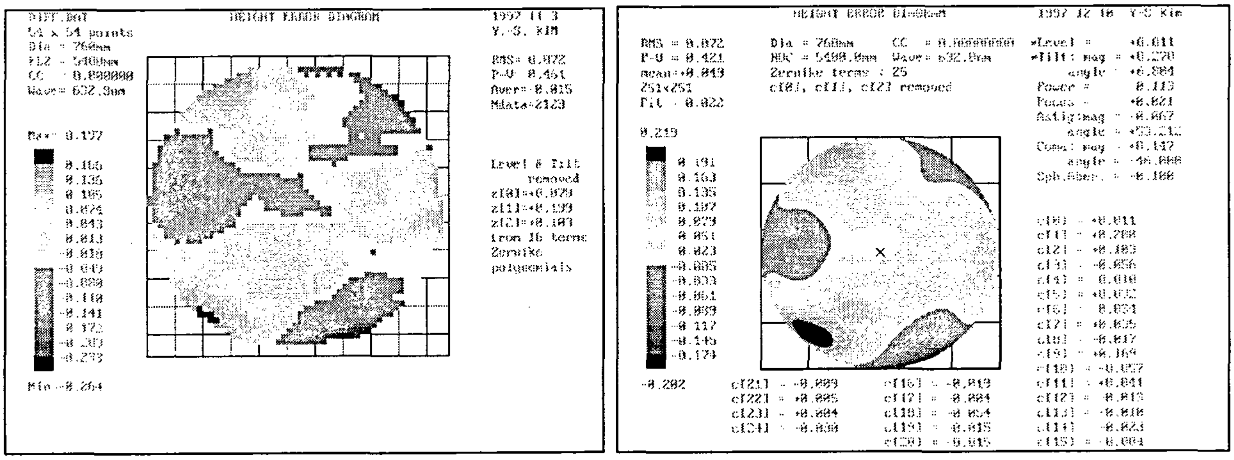
심플렉스 근사법과 축약 메커니즘

Simplex Fitting Method and Shrinkage Mechanism

김영수
한국 천문 연구원
ykim@kao.re.kr

광학계의 wavefront를 표현하는 방법으로 Zernike polynomials을 사용하는 경우가 많다. Zernike polynomials는 각 수차들을 나타내는 항으로 표시되기 때문에, wavefront가 내포하는 각각의 수차들을 파악하고 비교할 수 있기 때문이다. 측정된 wavefront 값을 Zernike polynomials로 전환하기 위해서는 주로 수치해석의 방법을 사용하는 데, 심플렉스 근사법을 사용하여 Zernike polynomials 계수들을 도출하여 보았다. 그림 1은 반사경 표면의 에러데이터를 측정하여(a), 이를 Zernike polynomials의 25개 항에 대입하는 데 있어서 심플렉스 근사법으로 구한 결과의 한 예이다.



(a) 760mm 반사경의 표면 높이차이 그림 (b) Zernike polynomials로 근사한 해

그림 1. 반사경 표면의 측정값을 심플렉스 근사법을 이용하여 Zernike polynomials에 적용한 해.

심플렉스 근사법은 기하학적인 수치해석 방법으로서, 반복적인 계산을 통하여 최적의 근사값을 찾아나간다. 이 방법은 1965년에 Nelder & Mead[1]에 의해 개발되었는데, 그 근원은 simplex method of linear programming[2,3]으로, 이와 구분하기 위하여 심플렉스 근사법 (simplex fitting method)이라고 칭한다. 이 방법은 그 후 몇몇 연구자들에 의해 개선되고 실제로 여러 컴퓨터 언어로 만들어져서 현재 널리 사용되고 있다.[4-8]

심플렉스 근사법은 그림 2에서와 같은 response surface에서 z축에 있는 variance가 최소가 되는 점을 찾아나가는 데, 4가지 mechanism을 사용한다. 우선 초기값의 세트를 만들어야 한다. 구해야 할 계수가 m개 있을 때에, 하나의 데이터 포인트에는 m개의 계수의 초기값과 그로부터 계산한 variance 값이 포함되는 데 이것을 vertex라고 한다. 서로 다른 vertex를 m+1개 만들면 초기의 데이터 세트가 완성

된다. 그림 2에는 2개의 계수 (a, b)를 가지는 함수에 대한 예를 보이고 있다. 계수가 2개이므로 (ai, bi, variancei)이 1개의 vertex가 되고, 이러한 vertex를 3개 만들면 초기 vertex 세트가 된다. 1H, 1M, 1L의 각각이 vertex이고, 이들 3점을 잇는 삼각형 1이 초기 vertex 세트가 된다.

이러한 vertex 세트는 4가지의 mechanism을 반복하여서 variance의 최소 값에 접근하게 된다. 이 4가지 mechanism은 reflection, expansion, contraction, shrinkage로서, vertex 세트 중에서 variance가 가장 큰 vertex를 찾은 후, 이 vertex를 4가지 mechanism 중에서 적절한 것을 이용하여 최소 값에 접근하는 것이다.

이 심플렉스 근사법의 4가지 mechanism 중 하나인 shrinkage mechanism은 대부분의 경우에 필요하지 않은 것으로 연구되었다. 이것을 확인하기 위하여 Zernike polynomials를 포함하여 5가지 수식에서 각 mechanism의 발생빈도를 점검하였다. 이 연구발표에서는 심플렉스 근사법의 원리에 대해 소개하고, shrinkage mechanism의 필요성에 대해 논한다.

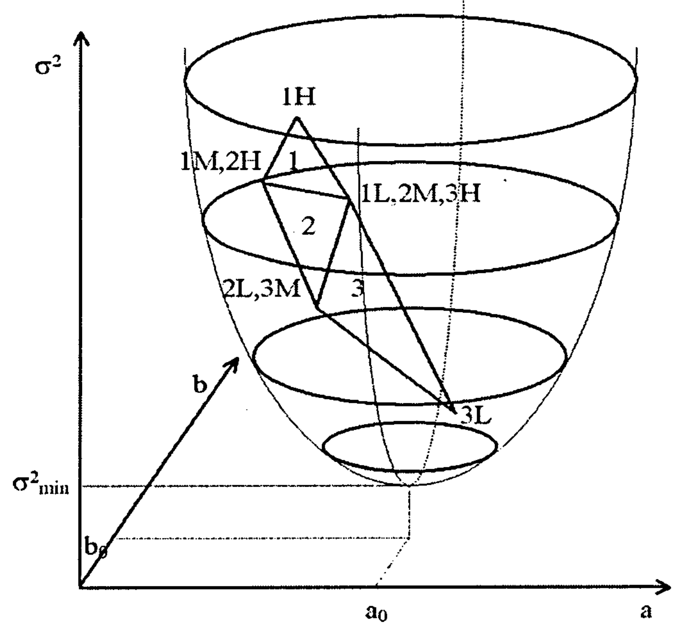


그림 2. 계수와 variance의 상관관계를 보이는 response surface.

참고문헌

1. J. A. Nelder and R. Mead, "A simplex method for function minimization," *The Computer Journal* **7**, pp.308-313 (1965).
2. W. Spendley, G. R. Hext, and F. R. Himsworth, "Sequential Application of Simplex Designs in Optimisation and Evolutionary Operation," *Technometrics*, **4** (4), pp.441-461 (1962).
3. G. James, D. Burley, P. Dyke, J. Searl, N. Steele, and J. Wright, *Advanced Modern Engineering Mathematics*, Addison-Wesley Publishing Company, Wokingham (1993).
4. R. O'Neill, "Function minimization using a simplex procedure," *Applied Statistics*, **20**, pp.338-345 (1971).
5. J. W. Akitt, "Function minimisation using the Nelder and Mead simplex method with limited arithmetic precision: the self regenerative simplex," *The Computer Journal*, **20** (1), pp. 84-85 (1977).
6. M. S. Caceci and W. P. Cacheris, "Fitting Curves to Data," *Byte*, May issue, pp.340-362 (1984).
7. Y.-S. Kim, "Refined Simplex Method for Data Fitting," *Astronomical Data Analysis Software and Systems VI*, G. Hunt and H. E. Payne Eds., Astronomical Society of the Pacific Conference Series, **125**, pp.206-209 (1997).
8. Y.-S. Kim, *An Improved Geometric Test forOptical Surfaces*, PhD thesis, London University (1998).

F
C