

개선된 Quantum 클러스터링을 이용한 자동적인 퍼지규칙 생성 및 비선형 회귀로의 응용

김승석*, 궤근창*

충북대학교 전기공학과, 조선대학교 제어계측로봇공학과

An Automatic Fuzzy Rule Extraction using an Advanced Quantum Clustering and It's Application to Nonlinear Regression

Sung-Suk Kim*, Keun-Chang Kwak*

*Dept. of Electrical Eng., Chungbuk National University, †Dept. of Control, Measurement and Robotic Eng., Chosun University

Abstract - 본 논문에서는 전형적인 비선형 회귀문제를 다루기 위해 슈뢰딩거 방정식에 의해 표현되는 Hilbert공간에서 수행되는 Quantum 클러스터링과 Mountain 함수를 이용하여, 수치적인 입출력데이터로부터 TSK 형태의 자동적인 퍼지 if-then 규칙의 생성방법을 제안한다. 여기서 슈뢰딩거 방정식은 분석적으로 확률함수로부터 유도되어질 수 있는 포텐셜 함수를 포함한다. 이 포텐셜의 최소점들은 데이터의 특성을 포함하는 클러스터 중심들과 관련되어진다. 그러나 이들 클러스터 중심들은 데이터의 수와 같으므로 퍼지 규칙을 생성하기 어려울 뿐만 아니라 수렴속도가 느린 문제점을 가지고 있다. 이러한 문제점들을 해결하기 위해서, 본 논문에서는 밀도 척도에 기초한 클러스터 중심의 근사적인 추정에 대해 간단하면서 효과적인 Mountain 함수를 이용하여 효과적인 클러스터 중심을 얻음과 동시에 적용 뉴로-퍼지 네트워크의 자동적인 퍼지 규칙을 생성하도록 한다. 자동차 MPG 예측문제에 대한 시뮬레이션 결과는 제안된 방법이 기존 문헌에서 제시한 예측성능보다 더 좋은 특성을 보임을 알 수 있었다.

Abstract - Quantum Clustering, mountain function, nonlinear regression, adaptive neuro-fuzzy network

1. 서 론

지난 몇 년 동안 다양한 실세계 응용문제에서의 빠른 성장과 함께 퍼지 논리와 신경 회로망에 관해 수많은 연구가 수행되어져 왔다. 특히 적용 뉴로-퍼지 네트워크(ANFN: Adaptive Neuro-Fuzzy Network)는 의사결정, 시스템 모델링, 제어 문제를 해결하는 것에 목적을 둔 소프트웨어 컴퓨팅의 구성요소로서 연구되었다[1]. 그러나, 이러한 문제들은 보통 전문가에 의해 부정확하게 정의되어지곤 한다. 이렇게 해서, 적용 뉴로-퍼지 네트워크는 인간 지식을 결합하고 그것들의 지식베이스를 적용하기 위한 능력에 근거하여 하이브리드 지능 시스템의 개념과 설계에 근거로 해서 실현되어져 왔다.

반면, 여러 클러스터링 기법들은 방사기저함수 혹은 퍼지 if-then 규칙의 초기 위치를 결정하기 위해 방사기저함수(RBFN: Radial Basis Function Networks) 혹은 퍼지 모델링과 연계해서 사용되어진다. 이러한 목적을 위해, 다양한 오프-라인 클러스터링 기법들이 신경회로망이나 퍼지 모델링의 구조식별에 적용되어져 왔다. 예를 들면, k-means 클러스터링, 퍼지 c-means 클러스터링, 퍼지 c-회귀 모델 클러스터링, Gustafson-Kessel 클러스터링, Gath-Geva 클러스터링, Mountain 클러스터링, Subtractiv 클러스터링이 있다.

본 논문에서는 소프트-백터 클러스터링과 스케일-공간 클러스터링 고유의 개념 확장인 Quantum 클러스터링을 이용하여 자동적인 if-then 규칙을 생성하고 적용 뉴로-퍼지 네트워크를 구축한다. 이 Quantum 클러스터링은 생물정보학[2]과 패턴인식[3]에의 응용문제에서 좋은 성능을 보였으나, 클러스터를 추정하기 위해 학습속도가 느린 단점이 있을 뿐만 아니라 퍼지 규칙을 생성하기 위해서는 데이터의 고유의 특성을 포함한 클러스터 중심을 추정하기에는 적합하지 않은 문제점이 있다.

따라서, 본 논문에서는 Yager[4]에 의해 제안된 밀도 척도에 기초한 클러스터 중심의 근사적인 추정에 대해 효과적인 Mountain 함수를 적용하여 개선된 Quantum 클러스터링 방법을 제안한다. 제안된 방법은 뉴로-퍼지 네트워크의 퍼지 규칙으로 사용되어지며, 전형적 비선형 회귀문제인 자동차 MPG 예측문제에 적용하여 기존연구와 비교되며 우수성을 보인다.

2. 클러스터링 융합 및 뉴로-퍼지 시스템

2.1 Quantum 클러스터링

Quantum 클러스터링은 양자역학 (Quantum mechanics) 개념에서 응용한 클러스터링 기법이다. 이 클러스터링은 확률적인 분산의 Parzen-window 평가자를 이용하여 척도 공간 (scale-space) 알고리즘에서 시작한다. 평가함수는 N개의 데이터를 가지고 유클리디언 공간 (Eclidean space)에서 Gaussian 함수를 이용하여 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\psi(x) = \sum_i e^{-\frac{(x-x_i)^2}{2\sigma^2}} \quad (1)$$

여기서 σ 는 클러스터의 척도(scale)를 나타낸다.

이를 이용하여 Quantum 클러스터링을 유도할 수 있다. 먼저 $\psi(x)$ 가 ground 상태일 때, Schrodinger potential을 탐색하여 potential이 최저가 되는 지점을 클러스터의 중심으로 가정한다. 여기서 ψ 는 Schrodinger 방정식

의 고유상태(eigen-state)로 가정한다.

$$H\psi = \left(-\frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 + V(x) \right) \psi = E\psi \quad (2)$$

여기서 하나의 파라미터 σ 를 위해 H 와 E 를 재조정한다. 위 식에서 $V = (1/2\sigma^2)(x-x_i)^2$ 으로하고 $E = d/2$ 라고 한다.

각 데이터에 대하여 주어진 ψ 는 다음과 같이 적용할 수 있다.

$$\begin{aligned} V(x) &= E + \frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 \psi \\ &= E - \frac{d}{2} + \frac{1}{2\sigma^2} \sum_i (x-x_i) e^{-\frac{(x-x_i)^2}{2\sigma^2}} \end{aligned} \quad (3)$$

여기서 V 를 최소화하기 위한 조건 $\min V = 0$ 을 만족하기 위해서는 E 는 다음과 같이 제한할 수 있다.

$$E = -\min \frac{\sigma^2 \nabla^2 \psi}{\psi} \quad (4)$$

여기서 $0 < E \leq d/2$ 를 만족하는 positive definite이어야 한다.

이를 이용하여 Quantum 클러스터링은 반복적인 학습알고리즘으로 구현할 수 있으며 학습되어지는 클러스터의 중심은 다음과 같이 표현할 수 있다.

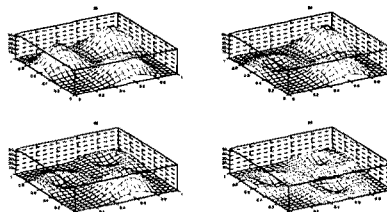
$$v_i^t = v_i^{t-1} + \sum_{x=1}^N \alpha_i^t(x) (x^s - v_i^{t-1}) \quad (5)$$

여기서 t 는 학습과정을 나타내고 i 는 각 클러스터 중심을 의미한다.

위 식에서 볼 수 있듯이 각 학습이 진행되는 동안 클러스터 중심 v_i 는 신경회로망의 학습기법과 유사하게 점진적으로 가중치를 변화시키는 방향으로 학습이 진행된다.

2.2 Mountain 함수와의 융합

Yager와 Filev에 의해 제안된 Mountain 클러스터링은 Quantum 클러스터링과 같이 사전에 주어진 임계값을 이용하여 클러스터의 수를 얻고 파라미터를 추정한다[4]. 기본적인 개념은 각 데이터가 모든 데이터와의 유사도를 누적하고 이를 이용하여 클러스터의 정보를 획득하는 것으로 크게 두 가지 단계로 나눌 수 있다. 먼저 Mountain 함수를 이용하여 그림 1의 첫 번째 그림과 같이 누적분포를 그릴 수 있다.



<그림 1> Mountain 클러스터링의 수행과정

누적 분포를 생성하는 일반적인 방법으로 다음과 같은 함수를 이용한다.

$$m(v) = \sum_{i=1}^N e^{-\frac{(v-x_i)^2}{2\sigma^2}} \quad (6)$$

첫 번째 누적분포에서 가장 큰 값을 첫 번째 클러스터의 중심으로 선택하고 아래의 Destroy 함수를 이용하여 그림 1의 두 번째 그림같이 가장 높은 누적함수값과 인근분포의 값을 제거한 후 새로운 클러스터 중심을 추정한다.

$$m_{new}(v) = m(c_1) - m(c_1) e^{-\frac{(v-c_1)^2}{2\beta^2}} \quad (7)$$

알고리즘은 생성된 Mountain이 모두 제거될 때까지 반복적으로 수행되며, 생성된 클러스터 중심의 수와 파라미터는 파괴된 Mountain의 수와 비례한다. Quantum 클러스터링의 학습에서 매회 학습에서 발생하는 데이터와 동일한 클러스터의 연산은 특정한 위치로 수렴하는 특성을 가지고 있다. 특정한 위치로 수렴하는 클러스터들은 가장 큰 누적밀도를 가지는 클러스

터를 제외한 인근 클러스터를 소거하더라도 클러스터의 수렴특성에 영향을 주지 않는다. 중복된 연산과 같은 클러스터 추정을 가지는 다수의 수렴되는 클러스터는 추가된 Destroy 함수를 융합시켜 연산량 제거를 위해 학습에서 제외시킬 수 있다. 이러한 Destroy 함수의 활용은 클러스터링 성능은 유지하면서 학습속도를 개선시켜 전체적인 클러스터링 성능을 향상시킬 수 있다.

3. 뉴로-퍼지 시스템

제안된 기법의 우수성을 보이기 위해 적응 뉴로-퍼지 시스템 (Adaptive Neuro-Fuzzy System) 에 적용하여 시뮬레이션을 실시하였다. 시뮬레이션에 이용된 Neuro-Fuzzy 시스템은 언어적인 입력과 1차 선형 방정식 형태의 출력을 가지는 Takagi-Sugeno-Kang (TSK) 퍼지 모델 기반 학습 시스템이다. 두 개의 입력차원을 가지며 하나의 출력을 가지는 적응 뉴로-퍼지 시스템의 i 번째 규칙에 의한 출력 f_i 를 표현하는 식(8)과 같다.

RULE i : If x is A_i and y is B_i (8)

Then $f_i = p_i x + q_i y + r_i$

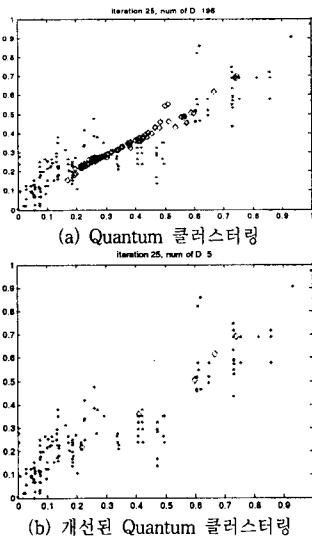
$$f = \frac{\sum_i \omega_i f_i}{\sum_i \omega_i} \quad (9)$$

각 입력의 차원을 x, y 라고 하고 A_i 와 B_i 는 각각의 입력차원에 연결된 i 번째 소속함수이다. p_i, q_i, r_i 는 적응 뉴로-퍼지 시스템의 결론부 파라미터이다. 최종 출력 f 는 식(9)에 의해 가중 평균법에 의한 출력으로 나타난다. 입력부의 초기 파라미터는 개선된 Quantum 클러스터링에 의해 추정되며 이를 이용하여 결론부 파라미터는 최소자승법을 이용하여 추정한다. 클러스터 학습 파라미터 σ 를 가변하여 추론된 클러스터 정보를 모델에 적용하여 우수한 성능을 보이는 클러스터와 모델을 얻는 형태로 클러스터의 수를 선택한다. 학습에 이용된 전체부 소속함수는 Gaussian 소속함수로 개선된 Quantum 클러스터링에서 추정된 클러스터 중심과 Yager에 의한 제안된 방법을 이용하여 분산 σ 를 추정하였다.

4. 시뮬레이션 및 결과

제안된 클러스터링을 전형적인 비선형 시스템에 적용하여 클러스터를 추정하고 이를 이용하여 모델링을 실시한다. 시뮬레이션에 이용할 모델은 자동차의 정보를 이용하여 연비를 예측하는 MPG 모델로서 6개의 자동차 정보를 가진 입력과 이와 연관된 연비로 대변하는 1개의 출력을 가지고 있다. 시뮬레이션에서는 이산적(discrete)인 입력을 가지는 실린더(cylinder) 정보를 제외한 5개의 입력을 이용하여 모델링을 실시하였다.

기존 Quantum 클러스터링과 개선된 Quantum 클러스터링을 실시하였을 경우를 비교하여 클러스터링을 비교하여 실시하였다. Quantum 클러스터링 학습 파라미터 σ 를 0.85로 설정하고 누적밀도를 추정한 후, 개선된 클러스터링은 Destroy 함수의 β 를 0.08로 추가로 설정하였을 때의 클러스터링 결과를 그림 2에 나타내었다.



〈그림 2〉 Quantum 클러스터링 및 개선된 클러스터링 비교

기존 Quantum 클러스터링은 학습이 진행되는 동안 클러스터가 수렴되지 않는 경우까지 발생할 수 있으나 제안된 기법은 학습과정 중에서 연산에 불필요한 인근 클러스터를 제거하여 학습시간을 줄이면서 클러스터의 수렴을 원활히 하는 것을 볼 수 있다.

Quantum 클러스터링에 Scale을 의미하는 σ 의 변화에 따라 추정되는 클러스터의 수가 달라지며 각각의 추정결과를 뉴로-퍼지 시스템에 적용하였을 때의 결과 역시 달라진다. Destroy 함수의 β 의 범위는 범위에 따라 값

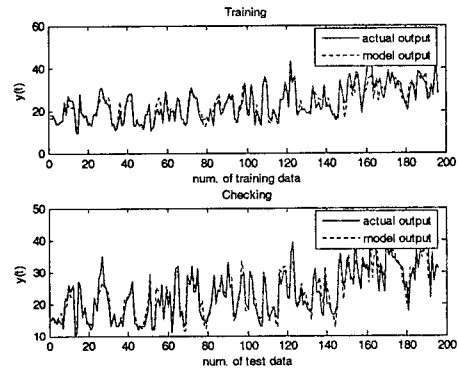
이 작을수록 유사 클러스터 소거작업이 떨어져 연산량은 증가하는 반면 다수 클러스터를 이용해 정밀한 클러스터링을 수행할 수 있고 값이 커지는 경우 활발하게 소거작업을 수행해 학습시간은 개선시키지만 불필요한 클러스터까지 학습에서 제외시킬 수 있다.

추정된 클러스터 정보를 이용하여 뉴로-퍼지 모델에 적용하여 100회 학습을 시켰을 때의 결과와 이전 연구 결과와의 비교를 표 1에 나타내었다. 결과는 Root Mean Square Estimation (RMSE)를 이용하였으며 데이터의 홀수 열을 학습에, 짝수 열을 검증에 이용하였다.

〈표 1〉 결과비교

	Membership	Training	Checking	Remarks
GG-LS[6]	4	2.77	2.95	
FM-ID[6]	4	2.84	2.96	
Proposed	5	2.65	2.81	

뉴로-퍼지 시스템의 학습데이터에 의한 출력과 검증 데이터에 의한 출력을 그림 3에 나타내었다.



〈그림 3〉 뉴로-퍼지 시스템의 출력

사전 설정된 학습 파라미터를 이용한 클러스터링의 결과에서 보듯이 데이터의 분포에 따라 자율적으로 클러스터를 추정하고 이를 이용한 모델의 학습 역시 우수한 결과를 추정하는 것을 볼 수 있다.

5. 결 론

본 논문에서는 서포트-벡터 클러스터링과 스케일-공간 클러스터링 고유의 개념 확장인 Quantum 클러스터링을 이용하여 자동적인 퍼지 규칙을 생성하고, 전형적인 비선형회귀 문제를 다루기 위해 적응 뉴로-퍼지 시스템을 구축하였다. 제안된 방법은 전형적인 비선형회귀인 자동차 MPG 예측문제에 적용한 결과, 근사적 능력과 일반화 능력 모두 좋은 성능을 가지고 있을 뿐만 아니라 클러스터 중심을 추정함에 있어서 빠른 수렴특성을 보임을 알 수 있었다.

향후 연구과제로는 Quantum 클러스터링이 가지는 장점을 극대화하면서도 사전 임계값의 변화에도 강한 클러스터 추정 성능을 가지고 우수한 성능을 구현할 수 있는 클러스터 융합에 대한 연구와 클러스터링에서 추정된 파라미터를 효과적으로 활용할 수 있는 시스템과의 융합에 관해 연구가 필요하다.

〔참 고 문 헌〕

- [1] J-S. R. Jang, C. T. Sun, E. Mizutani, Neuro-Fuzzy and Soft Computing : A Computational Approach to Learning and Machine Intelligence, Prentice Hall, 1997.
- [2] D. Horn, I. Axel, "Novel clustering algorithm for microarray expression data in a truncated SVD space", Bioinformatics, vol.19, no.3, pp.1110-1115, 2003.
- [3] D. Horn, A. Gottlieb, "Algorithm for data clustering in pattern recognition problems based on quantum mechanics", Physical Review Letters, vol.88, no.1, 00.1-4, 2002.
- [4] R.R. Yager, D. P. Filev, "Generation of Fuzzy Rules by Mountain Clustering", Journal of Intelligence and Fuzzy System, Vol. 12, pp.209-230, 1994.
- [5] 김승석, 김성수, 유정웅, "새로운 클러스터링 알고리즘을 적용한 향상된 뉴로-퍼지 모델링", 대한전기학회 논문지, Vol. 53D, No. 7, pp. 536-543, 2004.
- [6] J. Abonyi, R. Babuska, and F. Szeifert, "Modified Gath-Geva fuzzy clustering for identification of Takagi-Sugeno fuzzy models," IEEE Trans. on Systems, Mans, and Cybernetics-Part B, vol.32, no.5, pp.612-621, 2002