

석사학위논문

1차원 신호 분석 신뢰성  
향상을 위한 인공지능 기반  
전처리 및 데이터 증강 기법 연구

2026년

한 성 대 학 교 대 학 원

A I 응 용 학 과

A I 응 용 학 전 공

이 주 형



석사학위논문  
지도교수 이용희

1차원 신호 분석 신뢰성  
향상을 위한 인공지능 기반  
전처리 및 데이터 증강 기법 연구

2025년 12월 일

한 성 대 학 교 대 학 원

A I 응 용 학 과

A I 응 용 학 전 공

이 주 형

석사학위논문  
지도교수 이용희

1차원 신호 분석 신뢰성  
향상을 위한 인공지능 기반  
전처리 및 데이터 증강 기법 연구

위 논문을 공학 석사학위 논문으로 제출함

2025년 12월 일

한 성 대 학 교 대 학 원

A I 응 용 학 과

A I 응 용 학 전 공

이 주 형

이주형의 공학 석사학위 논문을 인준함

2025년 12월 일

심사위원장 공진우 (인)

심 사 위 원 이윙희 (인)

심 사 위 원 강미선 (인)

# 국 문 초 록

## 인공지능 기반 1차원 신호 분석 신뢰성 향상을 위한 전처리 및 데이터 증강 기법 연구

한 성 대 학 교    대 학 원  
A I    응    용    학    과  
A I    응    용    학    전    공  
이                    주                    형

1차원 신호는 다양한 분야에서 물질 조성, 반응 상태, 이상 여부 등을 판별하는 핵심 정보원으로 활용된다. 그러나 실제 계측 환경에서는 낮은 신호 대잡음비(Signal-to-Noise Ratio)와 제한된 계측 조건으로 인해 신호가 심하게 오염되거나 계측 조건 전 구간을 포괄하는 고품질 학습 데이터셋을 확보하기 어려운 경우가 많다. 특히 피크의 위치, 높이, 폭과 같은 형태학적 특징이 정량 분석의 중심 지표임에도 불구하고 기존 잡음 제거 및 데이터 증강 기법은 피크 구조를 충분히 보존하지 못하거나 조건 변화 및 성분 간 상호작용에 따라 비선형적으로 변화하는 파형 특성을 적절히 반영하지 못해 딥러닝 기반 분석 모델의 신뢰도와 일반화 성능을 제약하는 한계를 드러낸다. 이러한 한계를 해결하기 위해 본 논문에서는 피크 기반 1차원 신호의 신호 품질 향상과 데이터 부족 완화를 동시에 달성하기 위한 두 가지 방법론을 제안한다. 첫째, 피크 구조를 명시적으로 고려하는 피크 인지형(peak-aware) 적응적 잡

음 제거 기법을 제안한다. 잡음이 포함된 1차원 신호에서 피크를 자동 검출한 뒤 피크 간 거리와 기준 신호와의 유클리드 거리(Euclidean Distance, ED)를 기반으로 구간별 최적 Savitzky-Golay(SG) 필터 윈도우 길이를 회귀 모델 형태로 학습함으로써 신호 전체에 하나의 고정 윈도우를 적용하는 기존 방식의 한계를 극복하였다. 라만 분광 신호를 대상으로 한 실험 결과 제안 기법은 고정 윈도우 SG 대비 ED를 약 28% 감소시키고 Fréchet Inception Distance(FID)를 약 48% 개선하여 피크 형상 보존과 잡음 억제 성능을 동시에 향상시키는 것으로 나타났다. 둘째, 극히 제한된 수의 실측 혼합 신호만으로도 비선형 혼합 상호작용을 반영한 고품질 1차원 혼합 신호를 생성하기 위한 비선형 혼합 신호 생성 프레임워크를 제안한다. 제안 프레임워크의 핵심은 혼합 비율 조건 벡터를 입력으로 받는 조건부 변분 오토인코더(Conditional Variational Autoencoder)를 기반으로 서로 다른 혼합 비율에서 계측된 소수의 실측 혼합 신호를 앵커로 활용하여 목표 혼합 비율 주변에서 동적 보간을 수행함으로써 순수 성분 신호의 단순 선형 결합만으로는 포착하기 어려운 비선형 혼합 궤적을 학습하게 하는 데 있다. 또한 피크 위치와 강도 차이를 직접 규제하는 피크 손실(peak loss)을 도입하여 평균 제곱 오차(Mean Squared Error, MSE) 기반 손실만으로는 포착되기 어려운 좁은 피크 영역의 국소 오류를 효과적으로 억제하였다. 이성분 라만 혼합계를 대상으로 한 실험에서 제안 프레임워크는 단순 선형 결합 방식 대비 MSE를 약 69.2% 감소시키고 FID를 약 84.6% 개선하였으며 피어슨 상관계수(Pearson Correlation Coefficient) 약 0.999를 달성하여 실제 계측 신호와 거의 구별이 어려운 수준의 신호 생성 성능을 보였다. 종합적으로, 본 논문에서 제안하는 피크 인지형 적응적 잡음 제거와 비선형 혼합 신호 생성 프레임워크는 피크 구조를 중심으로 한 도메인 지식을 모델 설계에 직접 통합함으로써 신호 품질 저하와 데이터 부족이라는 두 문제를 동시에 완화하는 통합적 해법을 제공한다.

[주요어] 생성형 인공지능, 신호 처리, 화학 신호 분석, 데이터 증강, 잡음 제거

# 목 차

I. 서론 .....	1
II. 관련 연구 .....	5
2.1 1차원 신호 데이터의 특성 .....	5
2.2 1차원 신호 잡음 제거 선행연구 .....	6
2.3 딥러닝 기반 1차원 신호 생성 모델 .....	7
III. 피크 인지형 적응적 잡음 제거 .....	9
3.1 제안 방법 .....	9
3.1.1 피크 검출 및 스펙트럼 영역 분할 .....	9
3.1.2 피크 간 거리와 최적 윈도우 길이의 상관관계 분석 .....	12
3.1.3 피크 인지형 메커니즘을 이용한 영역별 적응적 잡음 제거 .....	14
3.2 성능평가 .....	16
3.2.1 실험 설계 .....	16
3.2.2 정성 평가 .....	17
3.2.3 정량 평가 .....	18
3.3 소결 .....	19
IV. 비선형성을 고려한 1차원 혼합 신호 생성 프레임워크 .....	21
4.1 제안 방법 .....	21
4.1.1 데이터 전처리 .....	22
4.1.2 모델 학습을 위한 데이터 증강 전략 .....	24
4.1.2.1 Strategy 1: 순수 성분 신호의 선형 결합 .....	25
4.1.2.2 Strategy 2: 실측 혼합 신호의 동적 보간 .....	26
4.1.3 비선형성을 고려한 1차원 혼합 신호 생성 모델 아키텍처 .....	27
4.1.4 손실 함수 .....	29
4.2 성능평가 .....	31
4.2.1 실험 설계 .....	31
4.2.2 정성 평가 .....	34
4.2.3 정량 평가 .....	34
4.2.4 잠재 공간 시각화를 통한 비선형 궤적 학습 검증 .....	37
4.3 소결 .....	39

V. 결론 .....	41
참고문헌 .....	44
ABSTRACT .....	49

## 표 목 차

[표 3-1] 잡음 제거 이전, 고정 윈도우 SG 잡음 제거 이후, 피크 인지형 적응적 잡음 이후 성능 비교 .....	19
[표 4-1] 선형 조합을 통한 신호 생성 의사 코드 .....	25
[표 4-2] 동적 보간을 통한 신호 생성 의사 코드 .....	26
[표 4-3] 피크 손실 계산 의사 코드 .....	31
[표 4-4] 신호 생성 전략과 기준 측정 스펙트럼 수를 기준으로 분류된 정량적 성능 비교 .....	36

## 그림 목 차

[그림 3-1] 1차원 신호 피크 검출 결과 .....	11
[그림 3-2] 피크 간 거리와 최적 SG 윈도우 길이 사이의 관계 .....	13
[그림 3-3] 피크 기반 분할과 피크 인지형 적응적 잡음 제거 파이프라인	15
[그림 3-4] 잡음이 포함된 신호(왼쪽), 고정 윈도우 SG 잡음 제거 결과(가운데), 피크 인지형 적응적 잡음 제거(오른쪽) .....	18
[그림 4-1] 비선형 혼합 1차원 신호 생성 프레임워크 개요 .....	22
[그림 4-2] CVAE 기반 1차원 혼합 신호 생성 모델 아키텍처 .....	28
[그림 4-3] 제안된 방법으로 생성된 신호의 정성적 비교 .....	35
[그림 4-4] 혼합 비율에 따른 학습된 잠재 공간의 비선형 궤적 .....	38

# I. 서론

현대 분석화학, 환경 모니터링, 국방, 의료, 재료 과학 등 다양한 응용 분야에서 분광 신호, 전기화학 센서 출력, 바이오 센서 응답, 시간-주파수 영역 측정 신호와 같은 1차원 계측 신호는 물질의 조성, 반응 상태, 환경 변화, 생리적 이상 여부를 판별하는 핵심 단서로 활용되고 있다[1-4]. 최근 딥러닝 기술의 발전으로 1차원 신호의 정밀 분석 및 이상 탐지 연구가 가속화되고 있으며 충분한 데이터를 확보할 수 있는 환경에서는 기존 통계 및 기계학습 기법 대비 우수한 성능이 보고되고 있다[5]. 그러나 실제 운용 환경에서 수집되는 1차원 신호는 신뢰도 높은 분석을 어렵게 만드는 두 가지 구조적인 문제로 신호 품질 저하를 유발하는 잡음(Noise)과 학습용 고품질 데이터 부족(Data Scarcity)에 직면해 있으며 이는 지능형 분석 모델의 성능과 현장 적용 가능성을 동시에 제약하는 요인으로 작용한다.

먼저 신호 품질 관점에서 센서와 계측 장비의 하드웨어 한계, 주변 환경 요인(온도, 조도, 진동, 전자기 간섭 등), 짧은 누적 시간이나 이동체 계측 등 운영상의 제약은 필연적으로 잡음을 유발한다. 피크의 위치, 높이, 폭과 같은 형태학적 특징은 물질 농도나 상태 변화를 추정하는 분석에 직접적으로 사용되므로 잡음 제거 과정에서 피크 형상이 과도하게 변형될 경우 후속 분류기나 회귀 모델이 학습해야 하는 신호 표현이 훼손된다. 이러한 문제를 완화하기 위해 전통적으로 Savitzky-Golay(SG) 필터와 같이 국소 다항 근사를 기반으로 하는 잡음 제거 기법이 1차원 신호 전처리에 널리 사용되어 왔다[6]. SG 필터는 비교적 적은 연산량으로 잡음을 줄이면서 전체적인 파형 추세를 보존할 수 있어 휴대형 센서나 엣지 디바이스와 같은 자원 제약 환경에서도 활용이 용이하다. 그러나 하나의 고정된 파라미터인 윈도우 길이를 신호 전체에 일괄 적용하는 구조적 특성 때문에 잡음 제거와 피크 보존 사이의 상충관계(trade-off)를 근본적으로 해결하기 어렵다는 한계가 있다[7, 8]. 윈도우가 짧으면 잡음이 충분히 제거되지 않고 길면 피크의 꼭짓점이 평탄해지거나 인접 피크가 하나의 둔탁한 봉우리로 합쳐지는 현상이 발생하여 피크 기반

분석의 신뢰도가 하락한다.

딥러닝 기반 잡음 제거 모델은 이러한 한계를 어느 정도 보완할 수 있는 대안으로 주목받고 있다. 다양한 구조의 딥러닝 모델이 1차원 신호에 적용되면서 고, 저 SNR(Signal-to-Noise Ratio) 쌍 데이터가 충분히 확보된 상황에서는 전통적 필터보다 우수한 복원 성능을 보이는 사례가 보고되고 있다 [9-13]. 하지만 이들 기법은 대규모 학습 데이터와 상당한 연산 자원을 전제로 하는 경우가 많으며 모델 크기와 지연 시간도 무시하기 어려워 배터리로 구동되는 소형 센서, 휴대형 탐지기, 임베디드 장치 등 실제 응용이 요구하는 제약된 환경에 직접 도입하기에는 부담이 크다. 반대로 SG 필터와 같은 전통 필터 기반 방법은 연산 비용이 낮고 구현이 단순하다는 장점이 있으나 피크 간 거리, 피크 밀도, 국소 신호 형태와 같은 도메인 특성을 명시적으로 보존하지 못해 피크 왜곡을 유발한다는 근본적인 약점을 지닌다.

데이터 측면에서 후속 분석 모델이 다양한 조건에 대해 일반화된 성능을 확보하려면 서로 다른 성분 조합과 혼합 비율, 온도와 압력 및 배경 조건 등을 포괄하는 충분한 양의 학습 데이터가 필요하다. 그러나 실제 위험 물질, 희귀 물질, 고가 시약, 또는 장기간 및 특수 조건이 필요한 실험에서 얻어지는 1차원 혼합 신호에 대해 모든 혼합 비율 전 구간에 걸쳐 데이터를 확보하는 것은 현실적으로 불가능에 가깝다. 이로 인해 실제 현장에서 수집 가능한 데이터는 일부 대표적인 조건에 편향되는 경향을 보이며 혼합 비율 조건 공간 전역에 대한 모델의 일반화 능력을 보장하기 어렵다는 한계가 존재한다 [14, 15]. 이러한 데이터 부족 문제를 완화하기 위해 개별 성분 신호를 단순 선형 결합(linear combination)하여 가상의 혼합 신호를 생성하는 방식이 오랫동안 사용되어 왔다. 그러나 일반적인 혼합계에서는 구성 성분 간 상호작용, 매질 효과, 센서 비선형 응답 등으로 인해 피크 위치와 세기가 혼합 비율에 따라 비선형적으로 변화하는 경우가 많으며 단순 선형 결합으로는 이러한 비선형 상호작용을 반영할 수 없다. 이로 인해 선형 결합 기반으로 생성된 데이터는 실제 계측 신호와의 물리화학적 일관성이 떨어지고 이를 학습한 모델은 미측정 영역에서 일반화 성능이 급격히 저하될 위험을 갖게 된다.

이러한 한계를 극복하기 위해 본 논문에서는 두 가지 접근법을 제안한다.

첫 번째 접근법은 1차원 신호의 형태학적 특징, 특히 피크 구조를 명시적으로 고려한 피크 인지형(peak-aware) 적응적 잡음 제거 기법이다[16]. 이 기법은 잡음이 포함된 1차원 신호에서 피크를 자동으로 탐지한 뒤, 검출된 피크를 경계로 신호를 여러 구간으로 분할하고, 각 구간에 대해 기준 신호와의 유클리드 거리(Euclidean Distance, ED)가 최소가 되도록 하는 최적 SG 필터 윈도우 길이를 사전 분석 단계에서 추정한다. 이렇게 얻은 피크 간 거리-최적 윈도우 길이 쌍을 학습 데이터로 사용하여, 피크 간 거리를 입력으로 받고 해당 구간의 최적 윈도우 길이를 출력으로 하는 회귀 모델을 구축한다. 운용 단계에서는 각 구간의 피크 간 거리를 이 회귀 함수에 입력하여 SG 필터의 윈도우 길이를 자동으로 산출하므로 사용자가 영역별 윈도우 크기를 설정하지 않아도 데이터 기반으로 최적화된 파라미터가 적용된다. 그 결과 별도의 수동 규칙 없이도 피크 보존성과 잡음 제거 성능 사이의 균형이 달성된다. 실제 실험에서 제안 기법은 고정 윈도우 기반 기존 SG 필터 대비 ED를 약 28% 감소시키고, 데이터 분포 간 유사도를 나타내는 Fréchet Inception Distance(FID)를 약 48% 개선하는 결과를 보였다[17]. 이러한 결과는 피크 구조를 인지하는 방식으로 필터 윈도우를 적응적으로 제어하는 방식이 의미 있는 잡음 제거 성능 향상을 가져올 수 있음을 시사한다.

두 번째 접근법은 데이터 부족과 혼합 신호의 비선형성을 동시에 고려한 1차원 혼합 신호 생성 프레임워크이다. 이 프레임워크는 극히 제한된 수의 실측 혼합 신호와 혼합 비율 정보만으로 혼합 비율 변화에 따른 피크 이동, 피크 강도 및 폭 변화 등 비선형 혼합 상호작용을 반영한 고품질 1차원 혼합 신호를 생성하는 것을 목표로 한다. 핵심 구성 요소인 비선형 혼합 신호 생성 모델은 혼합 비율 조건 벡터를 입력으로 받는 조건부 변분 오토인코더(Conditional Variational Autoencoder, CVAE) 구조를 기반으로 하며 소수의 기준 혼합 신호를 연결하는 동적 보간 전략을 통해 잠재 공간 상에서 비선형 매니폴드(manifold)를 학습하도록 설계된다[18, 19]. 또한 평균 제곱 오차(Mean Squared Error, MSE)와 같은 전통적 재구성 손실만으로는 좁은 피크 정보를 정확히 복원하기 어렵다는 점을 고려하여 피크 위치와 강도 차이를 직접적으로 규제하는 피크 손실(peak loss)을 도입함으로써 생성 신호가

실제 계측 신호의 피크 구조를 더욱 충실히 재현하도록 유도한다. 실험 결과, 제안 프레임워크는 극소수의 기준 혼합 신호만을 참조로 사용하고도 선형 결합 기반 생성 방법 대비 MSE를 약 69.2% 감소시키고 FID를 약 84.6% 개선하였으며, 피어슨 상관계수(Pearson Correlation Coefficient, PCC)는 약 0.999 수준을 달성하여 실제 계측 신호와 매우 유사한 고품질 1차원 혼합 신호를 생성할 수 있음을 확인하였다.

요약하면, 본 논문의 기여는 피크 기반 1차원 신호의 잡음 특성과 비선형 혼합 특성을 동시에 고려하여 신호 전처리와 데이터 생성이라는 두 관점에서 신호 데이터셋의 품질을 향상시키는 통합적인 방법론을 제시하는 데 있다. 피크 간 거리와 같은 형태학적 특성을 활용해 필터 윈도우를 최적화하는 피크 인지형 적응적 잡음 제거 기법을 통해 기존 고정 윈도우 기반 방법보다 피크 보존 성능과 정량적 유사도 지표를 개선하였고 동적 보간 전략과 피크 손실 함수를 결합한 1차원 혼합 신호 생성 프레임워크를 통해 극히 제한된 수의 참조 신호만으로도 실제 데이터를 고충실도로 모사하는 1차원 혼합 신호 생성이 가능함을 보였다. 제안된 두 접근은 특정 데이터 도메인에 국한되지 않고 피크 구조와 비선형 상호작용이 중요한 일반적인 1차원 센서, 분광, 바이오 신호에까지 확장 적용이 가능하다는 점에서 의의를 가진다.

본 논문의 구성은 다음과 같다. II장에서는 1차원 신호 데이터의 일반적인 특성과 잡음 특성, 기존 1차원 잡음 제거 기법, 그리고 딥러닝 기반 1차원 생성 모델에 대한 선행연구를 정리한다. III장에서는 피크 인지형 적응적 잡음 제거 기법의 세부 절차를 제시하고 정성 및 정량 평가를 통해 성능을 검증한다. IV장에서는 혼합 비율 조건부 생성 프레임워크를 제시하고 다양한 실험을 통해 생성 데이터의 품질과 잠재 공간에서의 비선형 궤적 학습 여부를 분석한다. 마지막으로 V장에서는 전체 연구 결과를 요약하고 향후 과제를 논의한다.

## II. 관련 연구

본 장에서는 1차원 신호 데이터가 갖는 특성과 데이터 확보 과정에서의 현실적인 제약 사항들을 기술한다. 이어 이러한 데이터의 한계를 극복하기 위해 연구되어 온 기존의 잡음 제거 기법과 데이터 부족 문제를 해결하기 위한 생성 모델의 연구 동향 및 한계점을 분석한다.

### 2.1 1차원 신호 데이터의 특성

현대 데이터 분석 분야에서 다루어지는 1차원 신호는 분광 데이터, 전기 화학 센서 출력, 심전도 및 뇌파와 같은 생체 신호, 진동 및 음향 데이터 등을 포괄하며 이는 시간, 주파수, 파장 등의 독립 변수에 따른 신호의 세기나 전위 변화를 연속적인 벡터 형태로 기록한 것이다. 이미지나 자연어 데이터가 전역적인 패턴이나 문맥적 정보를 중시하는 것과 달리 1차원 신호는 국소적인 파형인 피크의 형태학적 특징에 정보가 집약되어 있다는 고유한 특성을 갖는다[20]. 따라서 이러한 1차원 신호 분석의 핵심은 대부분 피크 구조의 해석에 있다. 피크는 신호 내에서 급격한 변화가 발생하는 지점으로 도메인에 따라 특정 물질의 존재(화학), 심박의 주기(의료), 설비의 이상 진동(공학) 등 결정적인 이벤트나 상태 정보를 내포한다. 예를 들어, 피크의 위치는 신호원의 종류나 성분을 식별하는 정성적 지표가 되며, 피크의 높이와 면적은 농도, 반응 진행 정도, 진동 세기, 이상 징후의 심각도 등 도메인별로 상이한 물리적 상태를 정량적으로 나타내는 지표로 활용된다[21-23]. 따라서 피크의 위치 정확도와 형상 보존성은 데이터 분석의 신뢰도를 결정짓는 가장 중요한 요소이다. 그러나 실제 현장에서 수집되는 1차원 신호는 센서의 물리적 한계나 외부 환경 요인 등 다양한 원인으로 인해 불가피하게 잡음이 유입되어 이상적인 형태를 유지하기 어렵다[24-27]. 이러한 잡음은 신호 전반에 걸쳐 파

형을 왜곡시키거나 기저선을 변동시켜, 피크 검출의 정확도를 떨어뜨리고 정밀한 크기 측정을 방해하는 주된 요인으로 작용한다. 또한, 복합적인 소스에서 발생하는 신호들이 섞여 있는 혼합 신호의 경우 구성 요소 간의 상호작용이나 측정 시스템의 비선형 응답으로 인해 단순 선형 결합으로는 설명되지 않는 복잡한 파형 변화가 나타난다. 이러한 비선형성과 잡음 문제는 기존의 단순한 통계적 처리나 선형 모델링만으로는 정밀한 분석을 수행하는 데 한계로 작용하며 이에 따라 데이터의 형태학적 특성을 보존하면서 품질을 향상시킬 수 있는 고도화된 전처리 및 데이터 증강 기법이 필수적으로 요구된다.

## 2.2 1차원 신호 잡음 제거 선행연구

1차원 신호에 내재된 잡음을 제거하여 신호의 품질을 개선하는 기술은 분석의 정확도를 결정짓는 전처리 단계로 필수적이다. 이를 위해 전통적으로는 연산 비용이 낮고 구현이 용이한 SG 필터와 같은 신호 처리 기법이 널리 사용되어 왔다. SG 필터는 국소 구간 내의 데이터를 다항식으로 근사하여 잡음을 제거하는 방식으로 이동 평균 필터 등에 비해 피크의 모멘트 정보를 비교적 잘 보존하는 것으로 알려져 있다. 그러나 SG 필터는 데이터 전체 구간에 대해 고정된 윈도우 길이를 일괄 적용해야 한다는 구조적 한계를 갖는다. 이러한 방식은 윈도우 길이가 너무 길 경우 좁은 피크의 폭과 높이를 과도하게 평활화하여 피크 왜곡을 유발하고 반대로 너무 짧을 경우 잡음 제거 효과가 미미해지는 상충 관계를 야기한다[28, 29]. 더욱이, 측정 환경이나 신호의 상태가 변할 때마다 왜곡을 최소화하는 최적의 윈도우 파라미터가 무엇인지 사전에 알기 어렵다는 점 또한 실제 운용상의 큰 단점으로 지적된다.

이러한 전통적 기법의 한계를 극복하기 위해, 최근에는 딥러닝 모델을 활용한 연구가 활발히 진행되고 있다. Bryce 등은 U-Net 구조의 합성곱 신경망(Convolutional Neural Network, CNN)을 활용하여 저전력 유도 라만 산란 이미지의 SNR를 획기적으로 개선하였으며 학습된 모델이 좁이나 깊이 등 다양한 이미징 조건에서도 강건하게 동작함을 보였다[30]. 또한 Ciaran 등은 짝을 이룬(paired) 학습 데이터 확보의 어려움을 해소하기 위해 비지도 학습

모델인 CycleGAN(Cycle-Consistent Adversarial Networks)을 도입하였으며 이를 통해 잡음 제거를 스타일 변환(style transfer) 문제로 접근하여 고전적 기법 대비 우수한 성능을 달성하였다[31].

하지만 이러한 딥러닝 기반 접근법 역시 명확한 한계를 지닌다. 고성능 모델은 필연적으로 막대한 양의 학습 데이터와 높은 연산 비용을 요구하므로 휴대용 탐지기나 엷지 디바이스와 같이 하드웨어 자원이 제한된 환경에 탑재하기에는 부담이 크다. 또한 블랙박스 모델의 특성상 복원된 피크의 물리적 유효성을 보장하기 어렵다는 점도 문제로 남는다. 따라서 본 연구에서는 딥러닝 모델의 높은 연산 비용 문제와 기존 SG 필터의 고정 윈도우로 인한 피크 왜곡 문제를 동시에 해결하기 위해 피크 구조를 명시적으로 고려하여 윈도우를 적응적으로 제어하는 새로운 접근법을 제안한다.

### 2.3 딥러닝 기반 1차원 신호 생성 모델

데이터 부족 문제는 딥러닝 모델의 일반화 성능을 저하시키는 주요 원인 중 하나이며 이를 극복하기 위해 다양한 생성 모델 및 데이터 증강 기법이 연구되어 왔다. 특히 1차원 신호 분야에서는 적대적 생성 신경망(Generative Adversarial Networks, GAN), 오토인코더(Autoencoder), 확산 모델(Diffusion Model) 등을 활용하여 신호의 변동성을 모사하고 후속 분석 모델의 일반성을 높히려는 시도가 이어지고 있다[32-35]. Zhao 등은 임상 피부암 진단을 위한 데이터 증강 연구에서 잡음 주입, 신호 이동, 선형 결합과 같은 전통적 기법과 GAN을 결합한 하이브리드 전략을 제시하였다[36]. 이들은 생성된 데이터를 후속 분류기인 CNN 학습에 활용함으로써 원본 데이터만을 사용했을 때보다 ROC AUC 성능을 2~4% 향상시키는 성과를 거두었다. 그러나 해당 연구에서 사용된 선형 결합 방식은 동일 클래스 내의 샘플을 단순 혼합하는 수준에 그쳐 실제 물질 혼합 과정에서 발생하는 성분 간의 복잡한 상호작용이나 비선형적인 변화를 반영하지 못한다는 한계가 있다. 화학 작용제 탐지 분야에서 Kim 등은 GAN으로 초기 신호를 생성한 후 잡음 제거 오토인코더를 통해 생성된 신호의 품질을 개선하는 다단계 파이프라인을 제안하였다[37]. 이 방식 역시 분류 모델의 성능을 개선하였으나 주로 개별 클레

스의 식별 능력 향상에 초점을 맞추었으며 연속적인 혼합 비율 변화에 따른 신호 생성은 다루지 않았다. 최근에는 확산 모델의 뛰어난 생성 성능을 1차원 신호에 적용하려는 연구도 진행되었다. Yao 등은 1차원 라만 스펙트럼을 2차원 이미지 형태로 변환한 뒤 벡터 양자화 변분 오토인코더의 잠재 공간에서 조건부 확산 모델을 학습시키는 DiffRaman을 제안하였다[38]. 이 모델은 적은 샘플 데이터 환경에서도 고품질의 클래스 조건부 합성 스펙트럼을 생성하여 박테리아 식별 정확도를 높이는 데 기여하였다.

이러한 선행 연구들은 분류 과제에서 데이터 부족 문제를 완화하는 데에는 성공적이었으나 정량 분석이 요구되는 혼합 신호 생성에는 다음과 같은 근본적인 한계를 지닌다. 첫째, 기존 연구들은 대부분 이산적인 클래스 생성에 집중하고 있어 실제 현장에서 빈번하게 발생하는 혼합 비율에 따른 연속적인 변화와 이에 따른 비선형 상호작용을 모델링하지 못한다. 단순한 선형 결합이나 클래스 기반 생성은 혼합 비율에 따라 피크의 위치가 이동하거나 강도가 비선형적으로 변하는 물리화학적 현상을 모사할 수 없다[39]. 둘째, 기존 모델들이 사용하는 손실 함수는 주로 전체 데이터의 통계적 분포나 픽셀 단위의 오차(MSE 등)를 줄이는 데 최적화되어 있다. 이는 피크의 위치와 강도와 같이 분석에 중요한 핵심 특징을 보존하는 데에는 취약하다. 피크 구조의 미세한 왜곡은 정량 분석의 신뢰도를 크게 떨어뜨리므로 본 연구에서는 비선형 혼합 특성을 반영하는 동적 보간 전략과 함께, 생성된 신호의 물리적 사실성을 보장하기 위해 피크 정보를 직접적으로 고려하는 새로운 손실 함수 기반의 생성 프레임워크를 제안한다.

## Ⅲ. 피크 인지형 적응적 잡음 제거

### 3.1 제안 방법

본 장에서는 피크 구조가 핵심 정보를 담고 있는 1차원 신호를 대상으로 인접 피크 간 거리 정보에 따라 SG 필터의 윈도우 길이를 국소적으로 조정하는 피크 인지형 적응적 잡음 제거 기법을 다룬다. SG 필터는 국소 다항 근사를 이용해 완만한 베이스라인 구간에서는 비교적 안정적인 평활화를 제공하지만, 2.2장에서 정리한 바와 같이 신호 전체에 하나의 고정된 윈도우 길이를 일괄 적용해야 한다는 구조적 제약 때문에 좁거나 밀집된 피크 영역에서는 피크 형상이 쉽게 왜곡되고 잡음 억제와 피크 보존 사이의 상충 관계를 동시에 만족시키기 어렵다.

피크 인지형 적응적 잡음 제거의 핵심 개념은 윈도우 길이 자체를 신호의 국소 구조에 반응하는 데이터 기반 파라미터로 치환하는 것이다. 구체적으로, 잡음이 포함된 1차원 신호에서 피크를 자동 검출하고 검출된 피크를 경계로 신호를 여러 국소 영역으로 분할 한 뒤 기준 신호와의 ED를 최소화하는 SG 윈도우 길이를 사전 분석 단계에서 영역별로 추정한다. 이렇게 얻은 피크 간 거리-최적 윈도우 길이 쌍을 이용해 회귀 모델 형태의 윈도우 결정 함수를 학습하고 운용 단계에서는 각 영역의 피크 간 거리를 이 함수에 입력함으로써 SG 필터의 윈도우 길이를 자동으로 산출한다. 이때 사용자는 신호 전체에 대해 하나의 고정 윈도우 길이를 수동으로 선택할 필요가 없으며 피크 간 거리라는 직관적인 형태학적 지표만으로 영역별 필터 강도가 데이터 기반으로 결정된다. 그 결과 피크를 기준으로 분할된 각 국소 영역에는 서로 다른 윈도우 길이가 할당되고 피크 형상 보존과 잡음 억제 사이의 균형을 신호의 지역적 특성에 맞게 제어할 수 있다.

#### 3.1.1 피크 검출 및 스펙트럼 영역 분할

피크 인지형 적응적 잡음 제거의 첫 단계는 입력 1차원 신호에서 의미 있는 피크 위치를 신뢰성 있게 검출하는 과정이다. 피크는 본 실험에서 활용된

라만 분광 신호뿐 아니라 다양한 1차원 계측 신호에서 특정 물질의 존재, 반응 이벤트, 임계 상태 등을 나타내는 지표 역할을 하며 본 방법에서는 이 피크를 기준으로 신호를 여러 영역으로 분할하고 각 영역의 피크 간 거리와 최적 윈도우 길이 사이의 관계를 분석한다. 피크 검출이 부정확할 경우 이후 상관관계 분석과 영역별 잡음 제거 단계 전반에 오차가 전파되므로 작은 잡음 요동에 의해 발생하는 가짜 피크를 억제하면서도 실제 주요 피크를 놓치지 않는 알고리즘이 요구된다.

이를 위해 본 연구에서는 avhn의 peakdetect 구현을 기반으로 하는 lookahead-delta 방식의 피크 검출 알고리즘을 활용하였으며 lookahead  $L$  과 delta  $d$ 라는 두 개의 하이퍼파라미터를 사용한다[40]. 이 알고리즘은 1차원 신호를 왼쪽에서 오른쪽으로 순차적으로 스캔하면서, 현재 위치를 잠정 피크 후보로 두고 두 단계로 검증하는 구조를 갖는다. 먼저 직전 확정 피크의 강도를  $y_{prev}$ , 현재 위치의 강도를  $y_{cur}$ 라 할 때,  $|y_{cur} - y_{prev}| < d$ 이면 작은 잡음 요동으로 간주하고 후보에서 제외한다. 반대로 이 차이가  $d$  이상이면 현재 위치를 잠정 피크로 등록한 뒤, 이후 lookahead 길이만큼의 데이터 포인트를 미리 관찰하면서 그 구간 안에  $y_{cur}$ 보다 큰 값이 존재하는지를 검사한다. 더 큰 값이 발견되면 해당 위치로 후보를 갱신하고 같은 절차를 반복하며, lookahead 구간에서 더 이상 더 큰 값이 등장하지 않을 때 해당 위치를 실제 피크로 확인한 뒤 탐색 인덱스를 그 이후로 이동한다. 이와 같이 직전 피크와의 강도 차이와 구간 내 국소 최대 여부를 동시에 검사함으로써, 작은 진동이 만들어 내는 가짜 피크는 효과적으로 억제하면서 신호 내 주요 피크를 안정적으로 탐지할 수 있다.  $L$ 과  $d$ 의 적절한 값은 신호의 샘플링 간격, 피크 폭, SNR 특성에 따라 달라질 수 있으므로, 특정 1차원 데이터에 대해서는 경험적 분석을 통해 범위를 탐색한 뒤 최종값을 결정하였다. 본 실험에서는 활용된 1차원 라만 스펙트럼 신호의 동작 범위를 고려하여  $L=10$ ,  $d=1000$ 으로 설정하였다. 이 값들은 피크를 과도하게 많이 검출하여 이후 피크 간 거리-윈도우 길이 상관관계 분석의 난이도를 높이는 것을 방지하면서도 화학적으로 중요한 주요 특징 피크가 누락되지 않도록 하는 것을 목표로 실험을 통해 선정하였다. 동일한 알고리즘은 라만 분광 신호 이외의

일반적인 1차원 계측 신호에도 적용 가능하며 이 경우에는 데이터의 스케일과 노이즈 특성에 맞추어  $L$ 과  $d$ 를 다시 튜닝하는 것이 바람직하다.

피크 검출 결과 예시는 그림 [3-1]과 같이 표현할 수 있다. 그림 [3-1]에서는 원 신호 곡선 위에 붉은 점으로 검출된 피크 위치를 표시하여 설정된 파라미터가 주요 피크를 안정적으로 포착하는 동시에 불필요한 국소 잡음 피크를 효과적으로 억제하고 있음을 시각적으로 확인할 수 있다.

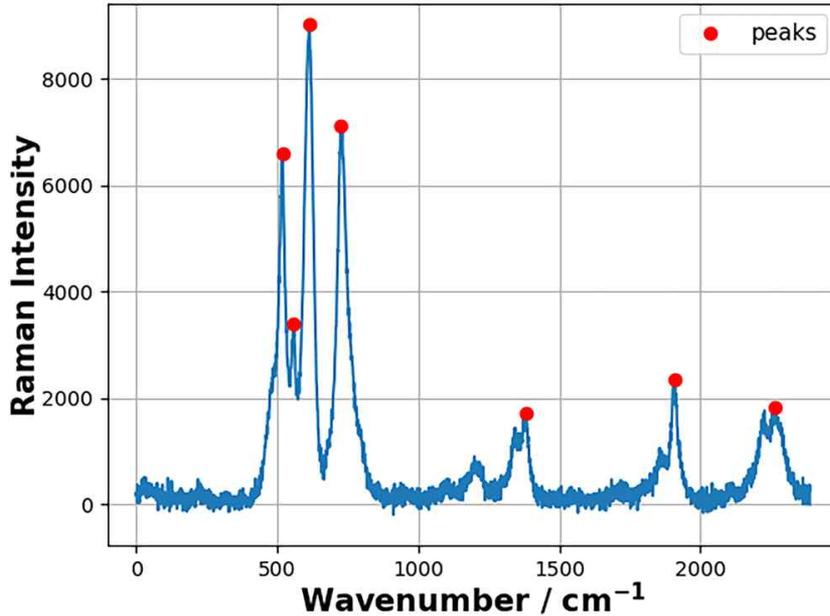


그림 [3-1] 1차원 신호 피크 검출 결과

피크 검출이 완료되면, 검출된 피크 인덱스를 기준으로 1차원 신호를 여러 영역(segment)으로 분할한다. 신호 길이를  $N$ , 검출된 피크 인덱스 집합을  $\{p_1, p_2, \dots, p_k\}$ 라 두고, 신호의 시작점과 끝점을 각  $p_0 = 0, p_{K+1} = N - 1$ 로 정의하면 전체 신호는  $K+1$ 개의 영역으로 나뉜다. 영역  $S_i$ 는  $p_i$ 에서  $p_{i+1}$ 까지의 구간으로 정의되며 이때 인접 피크 간 거리는  $d_i = p_{i+1} - p_i$ 로 나타낼 수 있다. 이후 3.1.2에서는 이러한 피크 간 거리  $d_i$ 와 각 영역에 대해 신호 왜곡을 최소화하는 최적 윈도우 길이 사이의 상관관계를 정량적으로 분석한다.

### 3.1.2 피크 간 거리와 최적 윈도우 길이의 상관관계 분석

피크 검출 및 영역 분할이 완료되면 각 영역에서 어떤 길이의 SG 필터 윈도우를 사용하는 것이 가장 적절한지 정량적으로 정의할 필요가 있다. 이를 위해 기준 신호와 잡음이 포함된 신호 사이의 차이를 나타내는 지표로 ED를 사용한다. 기준(잡음 없는)  $x = (x_1, \dots, x_n)$ 와 잡음이 포함된 신호  $y = (y_1, \dots, y_n)$  사이의 ED는 식 (3-1)과 같이 계산된다.

$$ED(x, y) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - x_i)^2}, \quad (3-1)$$

여기서 ED 값이 0에 가까울수록 두 신호가 유사하며 값이 커질수록 잡음 또는 잡음 제거에 의한 왜곡이 크다는 의미로 해석할 수 있다. 본 연구에서는 이 거리를 최소화하는 윈도우 길이를 각 영역의 최적 윈도우 길이로 정의하고, 그 패턴을 피크 간 거리의 함수로 모델링한다.

먼저, 대표적인 피크 기반 1차원 신호에 대해 다양한 수준의 잡음을 인위적으로 주입하고 3.1.1장에서 설명한 피크 검출 알고리즘으로 피크를 검출한 뒤 인접 피크 쌍을 기준으로 스펙트럼을 여러 영역  $S_i$ 로 분할한다. 영역  $S_i$ 에 대응하는 기준 신호 구간을  $x_i$ , 잡음이 포함된 신호 구간을  $z_i$ 라 두고 여러 후보 윈도우 길이 집합  $\{w^{(1)}, w^{(2)}, \dots\}$ 을 정의한다. 각 후보  $w^{(j)}$ 를 사용해 해당 영역에 SG 필터를 적용하여 잡음 제거 결과  $\tilde{z}_i^{(j)}$ 를 얻고 식 (3-1)을 사용해  $ED(x_i, \tilde{z}_i^{(j)})$ 를 계산한다. 이 가운데 ED 값이 최소가 되는 윈도우 길이  $w_i^*$ 를 영역  $S_i$ 에서의 최적 윈도우 길이로 정의한다. 이 과정을 여러 신호와 다양한 잡음 수준에 대해 반복하면 인접 피크 간 거리  $d_i = p_{i+1} - p_i$ 와 해당 영역의 최적 윈도우 길이  $w_i^*$ 로 구성된 데이터 쌍  $\{(d_i, w_i^*)\}$ 가 축적된다. 피크 간 거리-최적 윈도우 길이 관계를 시각화한 결과는 그림 [3-2]에 제시하였다. 그림 [3-2]에서 가로축은 인접 피크 간 거리  $d_i$ , 세로축은 해당 영역의 최적 윈도우 길이  $w_i^*$ 를 나타낸다. 붉은 점들은 여러 신호와 잡음 조건에서 얻은 개별 영역의  $(d_i, w_i^*)$  샘플을 의미한다.

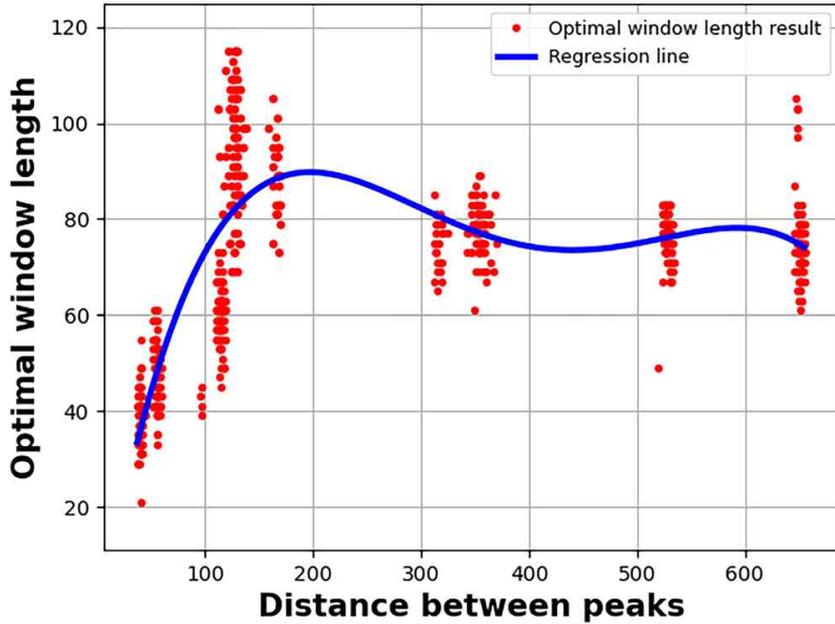


그림 [3-2] 피크 간 거리와 최적 SG 윈도우 길이 사이의 관계

피크 간 거리-최적 윈도우 길이 관계를 실용적인 형태로 활용하기 위해 피크 간 거리  $d$ 를 입력으로 하고 최적 윈도우 길이  $w$ 를 출력으로 하는 회귀 함수를 그림 [3-2]의 파란 실선처럼 도입하였다. 다양한 다항식 차수를 검토한 결과, 4차 다항 회귀가 관측된 산점도의 추세를 가장 안정적으로 근사하는 것으로 나타났으며 회귀 함수  $\hat{w}(d)$ 는 식 (3-2)와 같이 표현된다.

$$\hat{w}(d) = a_0 + a_1d + a_2d^2 + a_3d^3 + a_4d^4, \quad (3-2)$$

여기서  $a_0, \dots, a_4$ 는 최소자승법을 통해 추정된 회귀 계수이다. 식 (3-2)로 정의된 회귀 곡선을 그림 [3-2]의 산점도 위에 중첩하여 피크 간 거리-윈도우 길이 사이의 전반적인 추세를 잘 근사하고 있음을 확인하였다. 그림 [3-2]와 식 (3-2)를 함께 해석하면 피크 간 거리가 짧은 구간에서는 거리가 증가함에 따라 최적 윈도우 길이가 비교적 빠르게 증가하지만 일정 거리 이상에서는 약 70-90 윈도우 길이 부근에서 완만하게 변화하며 포화되는 관계가 나타난다. 이는 피크 간 길이가 긴 영역이라고 해서 무한히 긴 윈도우가 필요한 것은 아니고 일정 수준 이상의 잡음 정도 강도만 확보되면 그 이후에는 유사한

길이의 윈도우를 사용하는 것이 충분하다는 점을 시사한다. 동시에 피크가 밀집된 좁은 영역에서는 지나치게 긴 윈도우가 선택될 경우 피크 형상이 쉽게 평탄화되므로 피크 간 거리가 작은 구간에서는 상대적으로 짧은 윈도우가 선택되도록 회귀 함수가 설계되어야 함을 의미한다. 이러한 관찰은 피크 간 거리를 설명 변수로 사용하는 회귀 함수를 통해 각 영역의 최적 윈도우 길이를 자동으로 적응적 산출하는 피크 인지형 적응적 잡음 제거의 설계가 타당하다는 근거를 제공한다.

회귀 계수는 오프라인 단계에서 한 번 학습해 두고, 실제 운용 단계에서는 각 영역의 피크 간 거리  $d_i$ 만 계산한 뒤  $\hat{w}(d_i)$ 를 사용하여 실수값 윈도우 길이  $\hat{w}_i$ 를 얻는다. SG 필터가 홀수 길이의 윈도우를 사용하는 점을 감안하여  $\hat{w}_i$ 는 가장 가까운 홀수 정수로 반올림하고 사전에 정의한 최소, 최대 윈도우 범위  $[w_{\min}, w_{\max}]$ 로 클리핑하여 실제 적용할 윈도우 길이  $w_i$ 를 결정한다.

### 3.1.3 피크 인지 메커니즘을 이용한 영역별 적응적 잡음 제거

앞에서 도출한 피크 간 거리-최적 윈도우 길이 회귀 함수  $\hat{w}(d)$ 를 잡음 제거 과정에 통합하면 신호 전체에 하나의 고정 윈도우를 적용하는 대신 피크를 기준으로 분할된 각 영역에 서로 다른 윈도우 길이를 자동으로 부여하는 피크 인지형 적응적 잡음 제거 파이프라인을 구성할 수 있다. 핵심은 SG 필터의 구조와 연산 방식은 그대로 유지하되, 윈도우 길이 결정 규칙만을 피크 간 거리의 함수로 치환하여 영역별로 다르게 적용한다는 점이다.

처리 흐름은 그림 [3-3]과 같이 정리된다. 먼저 잡음이 포함된 1차원 입력 신호에 대해 피크 검출 및 영역 분할을 수행하여 피크 위치와 경계를 기준으로 한 영역 집합  $\{S_i\}$ 와 각 영역의 길이(또는 인접 피크 간 거리)  $d_i$ 를 얻는다. 이어서 각  $d_i$ 를 학습된 회귀 함수  $\hat{w}(\cdot)$ 에 입력하여 실수값 윈도우 길이 후보  $\hat{w}(d_i)$ 를 계산하고 SG 필터가 홀수 길이의 윈도우를 사용하는 점을 반영하여 가장 가까운 홀수 정수로 반올림한다. 다항 회귀  $\hat{w}(d)$ 는 학습에 사용된 거리 범위를 벗어난 입력에 대해 비현실적으로 큰 값이나 지나치게 작은 값을 출력할 수 있으므로 구현 단계에서는 정의한 최소, 최대 윈도우 길이

$[w_{\min}, w_{\max}]$ 를 적용해 범위를 제한한 뒤 실제 영역별 윈도우 길이  $w_i$ 로 사용한다. 영역별 윈도우 길이  $w_i$ 가 결정되면 각 영역  $S_i$ 에 대해 윈도우 길이  $w_i$ 를 갖는 SG 필터를 국소적으로 적용하여 잡음을 제거하고 필터링된 영역들을 원래 순서대로 이어 붙여 피크 인지형 적응적 잡음 제거가 적용된 최종 1차원 신호를 복원한다.

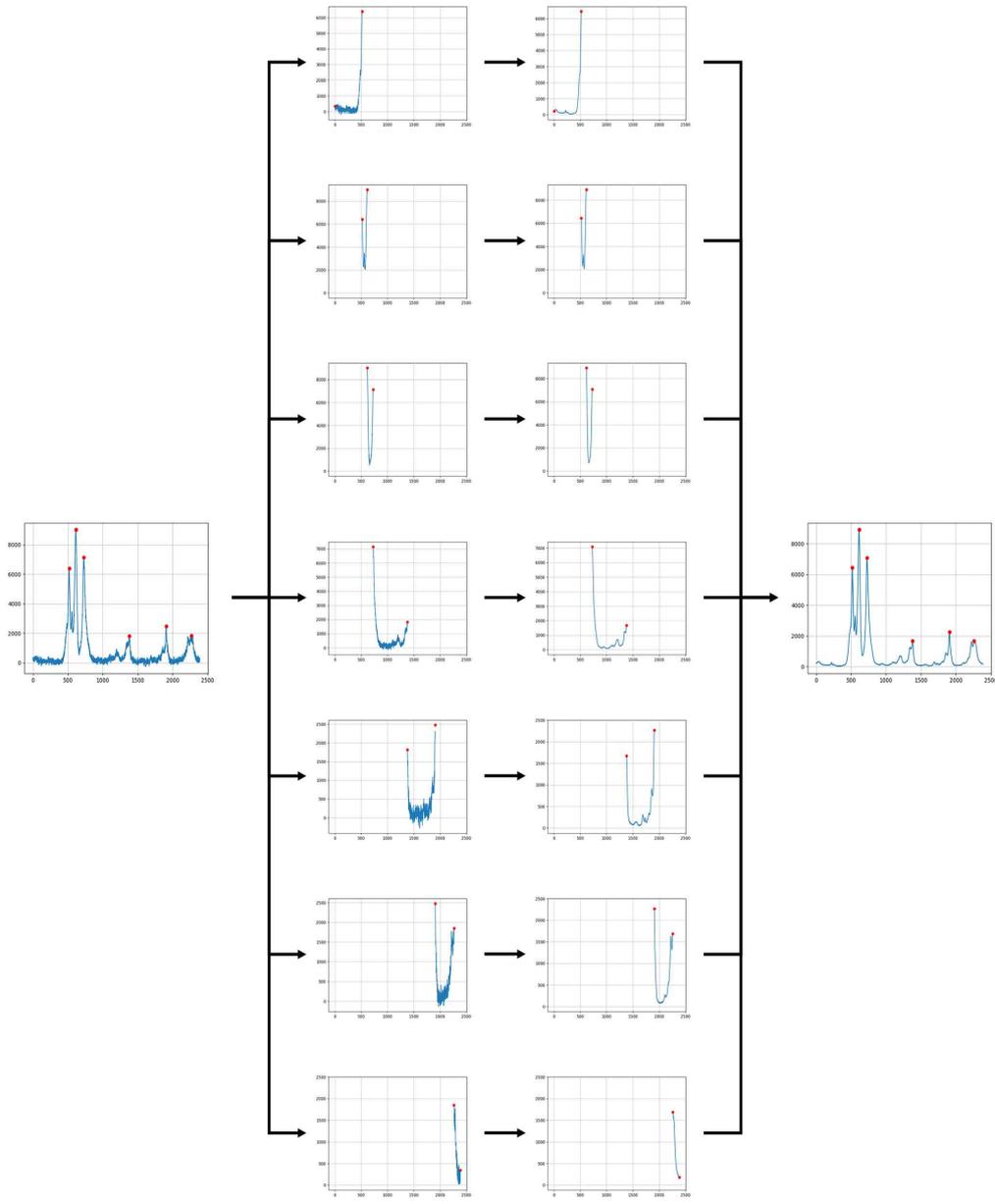


그림 [3-3] 피크 기반 분할과 피크 인지형 적응적 잡음 제거 파이프라인

이때 윈도우 길이는 사용자가 영역마다 수동으로 설계한 규칙이 아니라 피크 간 거리-최적 윈도우 길이 관계를 학습한 회귀 함수  $\hat{w}(\cdot)$ 에 의해 자동으로 산출된 값이므로 피크를 기반으로 분할된 각 영역마다 동일한 윈도우를 적용하는 대신 해당 영역의 피크 간 거리 정보에 따라 필터 강도가 달라지며 그 결과 피크 형상 보존과 잡음 억제 사이의 균형이 신호의 지역적 특성에 맞게 조정된다. 결과적으로 동일한 SG 필터 구조 하에서 피크 형상 보존과 잡음 억제 수준을 신호의 지역적 특성에 맞추어 데이터 기반으로 조정하는 피크 인지형 적응적 잡음 제거 기법이 완성된다.

### 3.2 성능평가

본 장에서는 제안한 피크 인지형 적응적 잡음 제거 기법의 성능을 정성적 관점과 정량적 관점에서 평가한다. 실험은 피크 구조가 뚜렷한 라만 분광 기반 화학 신호를 사용하여 진행하였다.

#### 3.2.1 실험 설계

성능 평가는 잡음이 없는 기준 1차원 신호와 이에 인위적으로 잡음을 주입한 신호 쌍을 기반으로 수행하였다. 기준 신호는 파수 축을 따라 여러 개의 피크가 서로 다른 높이와 폭을 가지며 분포하는 형태를 갖는다. 여기에 측정 과정에서 빈번히 관측되는 불규칙한 고주파 잡음을 모사하기 위해 신호 전체에 백색 잡음을 더해 저 SNR 조건을 구성하였다. 이러한 방식으로 생성된 기준-잡음 포함 신호 쌍을 다수 준비한 뒤 동일한 입력에 대해 잡음 제거를 수행하지 않은 경우와 신호 전체에 고정된 하나의 윈도우 길이를 사용하는 전통적인 SG 필터, 그리고 제안하는 피크 인지형 적응적 잡음 제거를 각각 적용하여 결과를 비교하였다. 잡음 제거를 하지 않은 경우는 잡음이 신호 파형과 분포에 미치는 영향을 확인하기 위한 기준선 역할을 한다. 고정 윈도우 SG 필터에서는 신호 전체에 대해 하나의 윈도우 길이만을 사용하며 이 값은 기준 신호와의 ED가 최소가 되도록 사전에 탐색하여 설정하되 모든 신호에 일괄 적용되도록 하였다. 제안 피크 인지형 적응적 잡음 제거 기법은 앞서 설명한 대로 피크 검출을 통해 신호를 여러 영역으로 분할 한 뒤 각 영역의 길

이를 입력으로 하는 회귀 함수  $\hat{w}(d)$ 에서 최적 윈도우 길이를 자동 산출하여 SG 필터를 국소적으로 적용하는 구조를 갖는다. 상기 모든 실험은 Python 환경에서 Intel i7-11800H CPU, 32GB RAM, NVIDIA GeForce RTX 3070 Laptop GPU(4GB VRAM)로 구성된 시스템에서 진행하였다.

정량 평가 지표는 기준 신호와 잡음 제거 결과 간 파형 차이를 측정하기 위해 ED를 사용하고, 잡음 제거 전후의 신호 집합이 생성하는 분포가 얼마나 유사한지를 평가하기 위해 Fréchet Inception Distance(FID)를 사용하였다. ED는 식 (3-1)에서 정의한 것처럼 두 1차원 벡터 간 유클리드 거리로 값이 작을수록 잡음 제거 결과가 기준 신호에 더 가깝다는 것을 의미한다. FID는 기준 신호 집합과 잡음 제거 결과 신호 집합을 어떤 특징 공간 상의 다변량 가우시안 분포  $(m, C)$ ,  $(m_w, C_w)$ 로 각각 근사했을 때 두 분포 사이의 거리를 나타내며, 식 (3-3)과 같이 정의된다.

$$d^2((m, C), (m_w, C_w)) = \|m - m_w\|_2^2 + \text{Tr}(C + C_w - 2(CC_w)^{\frac{1}{2}}), \quad (3-3)$$

여기서  $m, C$ 는 기준 신호 집합에서 얻은 평균과 공분산,  $m_w, C_w$ 는 잡음 제거 결과 신호 집합에서 얻은 평균과 공분산을 의미한다. FID 값이 0에 가까울수록 두 집합의 분포가 서로 유사하며 값이 클수록 분포 간 차이가 크다는 것을 의미하므로 잡음 제거 후 FID가 감소할수록 원래 데이터 분포를 더 잘 보존하는 것으로 해석할 수 있다.

### 3.2.2 정성 평가

피크 인지형 적응적 잡음 제거의 주요 목표는 단순히 잡음의 분산을 줄이는 것에 그치지 않고 피크의 위치, 높이, 폭과 같은 형태학적 특징을 가능한 변형 없이 보존하는 데 있다. 이를 확인하기 위해 잡음이 포함된 신호, 고정 윈도우 SG 필터 결과, 제안 피크 인지형 적응적 잡음 제거 결과를 그림 [3-4]과 같이 시각적으로 비교하였다. 그림 [3-4]에서 고정 윈도우 SG 잡음 제거를 적용한 경우 잡음 자체는 상당 부분 감소하지만 파수 약  $550\text{cm}^{-1}$  부근의 피크 및 다른 피크의 높이가 전체적으로 과도하게 줄어드는 경우가 확인된다.

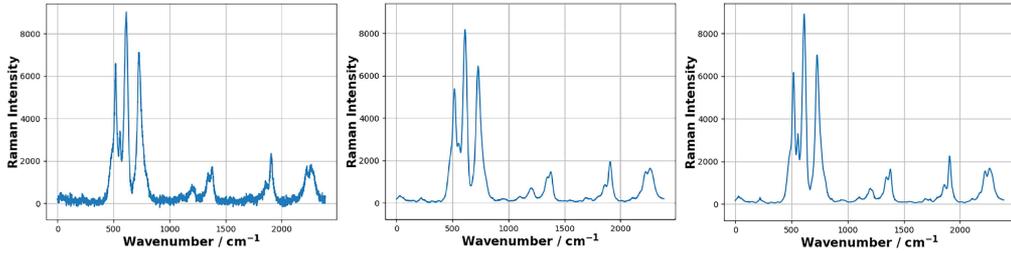


그림 [3-4] 잡음이 포함된 신호(왼쪽), 고정 윈도우 SG 잡음 제거 결과(가운데), 피크 인지형 적응적 잡음 제거(오른쪽)

이는 신호 전체에 동일한 윈도우 길이를 적용하는 구조 때문에 피크 밀도가 높은 구간에서는 윈도우가 지나치게 길게 작용하여 세부 구조를 지워 버리는 결과로 해석할 수 있다. 반면, 제안 피크 인지형 적응적 잡음 제거를 적용한 결과에서는 잡음이 효과적으로 억제되면서도 피크의 위치와 높이가 기준 신호와 매우 유사한 형태로 유지되는 것이 확인된다. 이러한 시각적 비교는 피크 간 거리 정보를 이용해 영역별 잡음 제거 강도를 조절하는 제안 기법의 설계가 단순한 잡음 감소를 넘어 도메인적으로 중요한 피크 구조 보존에 유리함을 직관적으로 보여준다.

### 3.2.3 정량 평가

정성적 비교만으로는 신호 품질 향상 정도를 정량적으로 평가하기 어렵기 때문에 ED와 FID를 중심으로 성능을 측정하였다. 표 [3-1]은 잡음 제거를 수행하지 않은 경우, 고정 윈도우 SG 필터, 제안 피크 인지형 적응적 잡음 제거에 대해 ED와 FID를 비교한 결과를 정리한 것이다. 표 [3-1]에 따르면 우선 어떠한 잡음 제거도 수행하지 않은 경우 기준 신호와의 ED 및 FID가 가장 크게 나타나 잡음이 신호 파형과 신호 분포를 모두 크게 왜곡하고 있음을 확인할 수 있다. 고정 윈도우 SG 잡음 제거를 적용하면 두 지표 모두 상당 폭 감소하지만 여전히 피크 왜곡과 잔여 잡음으로 인해 기준 신호와의 차이가 완전히 해소되지는 않는다. 제안하는 피크 인지형 적응적 잡음 제거를 적용한 경우, ED 관점에서 기존 고정 윈도우 SG 필터 대비 약 28% 감소, FID 관점에서는 약 48% 감소가 관찰되었다.

Method	ED	FID
잡음 제거 이전	4930.20	$7569.15 \times 10^3$
고정 윈도우 SG	$2090.81(\times 1)$	$1377.84 \times 10^3(\times 1)$
피크 인지형 적응적 잡음 제거	$1519.49(\times 0.72)$	$721.96 \times 10^3(\times 0.52)$

표 [3-1] 잡음 제거 이전, 고정 윈도우 SG 잡음 제거 이후,  
피크 인지형 적응적 잡음 이후 성능 비교

이는 동일한 SG 필터 구조를 사용하면서도 피크 간 거리 정보를 이용해 영역별 윈도우 길이를 자동으로 조정하는 것만으로 신호 파형 수준의 오차와 분포 수준의 차이를 동시에 의미 있게 줄일 수 있음을 의미한다.

정량 평가 결과를 종합하면 피크 인지형 적응적 잡음 제거 기법은 신호 전체에 하나의 고정 윈도우를 사용하는 기존 SG 필터에 비해 기존 신호와의 파형 차이를 줄이는 동시에 신호 집합의 통계적 분포까지 더 유사하게 유지한다는 점에서 우수한 성능을 보인다. 이는 피크 구조와 배경 구간의 특성을 구분하지 않는 기존 기법보다 피크 간 거리-최적 윈도우 길이 관계를 학습한 회귀 함수를 통해 영역별로 서로 다른 윈도우 길이를 데이터 기반으로 부여하는 설계가 피크 기반 1차원 신호에서 잡음 제거와 특징 보존 사이의 균형을 정량적으로도 더 적절히 맞춘다는 것을 보여준다.

### 3.3 소결

Ⅲ장에서는 피크 구조가 중요한 1차원 신호를 대상으로 신호 전체에 하나의 고정 윈도우를 사용하는 기존 SG 필터의 한계를 보완하기 위해 피크 인지형 적응적 잡음 제거 기법을 제안하였다. 먼저, lookahead-delta 기반 피크 검출 알고리즘을 이용해 의미 있는 피크만 안정적으로 선별하고 검출된 피크 인덱스를 기준으로 신호를 다수의 영역으로 분할하여 피크 간 거리를 명시적으로 표현하였다. 이어서 기존 신호와 잡음 포함 신호 간의 ED를 이용해 각 영역의 최적 윈도우 길이를 정의하고 인접 피크 간 거리와 최적 윈도우 길이 사이의 관계를 4차 다항 회귀 함수로 근사함으로써 피크 간 거리만으로 영역별 윈도우 길이를 예측할 수 있는 설계를 제안하였다. 이 회귀 함수를 피크

기반 영역 분할 결과와 결합하여 영역 길이에 따라 최적 윈도우 길이가 자동으로 도출되는 파이프라인을 구축하였다. 성능 평가 결과, 제안 기법은 고정 윈도우 SG 잡음 제거에 비해 주요 피크의 형상을 더 잘 보존하면서도 배경 잡음을 효과적으로 억제하는 특성을 보였으며 ED와 FID 관점에서도 기준 신호와의 파형 차이와 분포 차이를 동시에 유의하게 감소시키는 것으로 나타났다.

## IV. 비선형성을 고려한 1차원 혼합 신호 생성

### 프레임워크

#### 4.1 제안 방법

본 장에서는 극소수의 실측 혼합 신호로부터 비선형 혼합 상호작용을 반영한 고품질 1차원 혼합 신호를 생성하기 위한 프레임워크를 제안한다. 대상 신호는 Ⅲ장과 동일하게 라만 분광 신호를 대표 사례로 삼지만 혼합 비율 변화에 따라 피크 위치와 강도, 베이스라인이 함께 변화하는 일반적인 1차원 신호를 포괄하도록 설계하였다.

제안 프레임워크는 입력 신호의 스케일과 길이를 정규화하는 데이터 전처리, 제한된 실측 혼합 신호와 순수 성분 신호를 이용해 혼합 비율 조건 공간 전역에 걸친 학습용 조건-신호 쌍을 구성하는 신호 증강 전략, 비선형 혼합 상호작용을 모사하는 CVAE 기반 생성 모델, 그리고 재구성 정확도와 피크 구조 보존을 동시에 제어하는 복합 손실 함수로 구성된다. 전처리 단계에서는 입력 신호를 공통 스케일과 길이로 맞추어 모델 학습의 안정성을 확보하고 학습용 신호 증강 전략 단계에서는 순수 성분 신호와 일부 혼합 신호를 이용해 학습에 사용할 다양한 가상 학습 샘플을 구성한다. 생성 모델은 증강된 입력 신호와 조건 벡터를 인코더에 입력하여 잠재 분포의 파라미터를 추정하고 여기서 샘플링한 잠재 벡터와 동일한 조건 벡터를 디코더에 재입력하여 해당 조건에서 관측될 법한 혼합 신호를 복원하도록 학습된다. 학습이 완료된 후에는 임의의 조건에 대해 잠재 벡터를 샘플링하고 디코더를 통해 다수의 후보 신호를 생성함으로써 실제로 측정되지 않은 혼합 비율 조건 영역에서도 데이터 부족 문제를 완화할 수 있다.

전체 프레임워크는 그림 [4-1]과 같이 정리할 수 있다. 그림 [4-1]에서는 데이터 전처리 모듈을 통해 입력 1차원 신호가 전역 정규화와 길이 표준화를 거쳐 모델 입력 형식으로 변환되고 신호 생성 전략 모듈에서 학습용 조건-신호 쌍이 구성된 뒤 CVAE 기반 생성 모델과 복합 손실 함수에 의해 비선형 혼합 매니폴드가 학습되는 과정을 단계적으로 나타낸다.

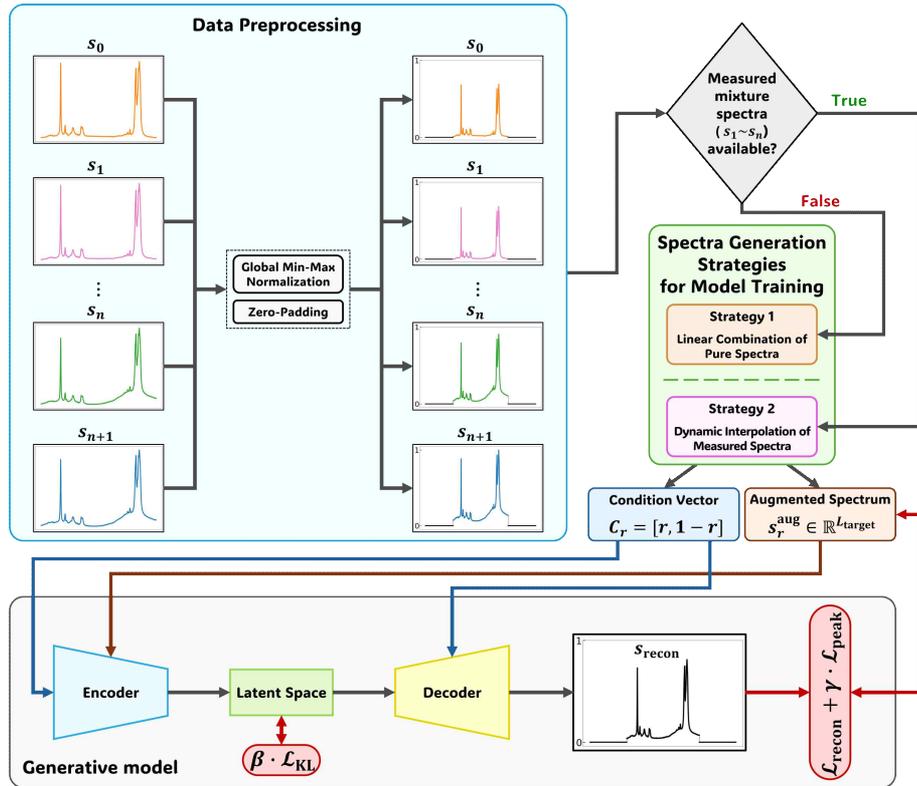


그림 [4-1] 비선형 혼합 1차원 신호 생성 프레임워크 개요

#### 4.1.1 데이터 전처리

제안 프레임워크에서 생성 모델은 두 종류의 1차원 신호를 학습 데이터로 사용한다. 하나는 각 성분에 대한 순수 신호이고 다른 하나는 선택된 몇 개의 혼합 비율에서 실험적으로 측정된 혼합 신호이다. 각 신호는 측정 축(파수, 시간, 주파수 등)에 따라 정렬된 스칼라 값의 1차원 벡터로 주어지며 측정 조건과 장비 설정, 환경 요인에 따라 전체 세기 스케일과 길이가 크게 달라질 수 있다. 이러한 이질성을 그대로 모델에 입력하면 학습이 불안정해지고 조건과 신호 형상 사이의 관계를 학습하기 어렵다. 따라서 본 연구에서는 모든 입력 신호를 공통 스케일과 길이로 변환하는 전처리 파이프라인을 구성하였다. 전처리 파이프라인은 전역 Min-Max 정규화와 2의 거듭제곱 길이의 제로 패딩 두 단계로 구성된다.

첫 번째 단계인 전역 Min-Max 정규화는 서로 다른 측정 조건에서 얻어

진 신호들 간의 세기 스케일을 맞추면서도 혼합 비율에 따라 변하는 상대적인 피크 강도 정보를 보존하는 것을 목표로 한다. 전통적인 개별 신호 정규화는 신호마다 독립적으로 최댓값과 최솟값을 이용해  $[0, 1]$  구간으로 스케일링 하기 때문에 혼합 비율이 변함에 따라 나타나는 피크 강도 차이가 부분적으로 상쇄되거나 왜곡될 수 있다. 반면, 전역 정규화는 데이터셋 전체의 최소, 최댓값을 공통 기준으로 사용함으로써 서로 다른 조건에서 측정된 신호 간의 상대적인 강도 관계를 유지한다. 전체 데이터셋을  $S = \{s_1, s_2, \dots, s_N\}$ 이라 할 때, 각 신호  $s_i$ 에 대한 전역 Min-Max 정규화된 신호  $s_i^{\text{norm}}$ 는 다음과 같이 식 (4-1)과 같이 정의된다.

$$s_i^{\text{norm}} = \frac{s_i - \min(S)}{\max(S) - \min(S)}, \quad (4-1)$$

여기서  $\min(S)$ 와  $\max(S)$ 는 데이터셋 전체에서의 최소 및 최대 세기 값을 의미한다. 이와 같이 정의된  $s_i^{\text{norm}}$ 은 모든 신호가 공통 스케일  $[0, 1]$  상에 배치 되도록 하면서도, 서로 다른 혼합 비율에 따른 피크 강도 차이는 그대로 유지 되도록 한다. 이는 조건 벡터와 신호 강도 패턴 사이의 물리적 관계를 생성 모델이 안정적으로 학습하는 데 중요하다.

두 번째 단계는 신호 길이의 표준화이다. 제안하는 프레임워크의 CVAE 기반 생성 모델의 인코더는 스트라이드(stride)가 2인 1차원 합성곱 층을 반복적으로 적용하여 특성 맵(feature map)의 길이를 단계적으로 절반씩 감소시키고 디코더는 이에 상응하는 업샘플링을 통해 원래 길이의 신호를 복원한다. 이때 입력 길이가 적절하게 설정되지 않으면 인코더-디코더 사이에서 길이 불일치가 발생하여 경계부 왜곡이나 차원 불일치가 생길 수 있다. 이러한 문제를 근본적으로 방지하기 위해, 모든 입력 신호 길이를 2의 거듭제곱 형태가 되도록 제로 패딩(zero-padding)으로 확장한다. 원래 신호의 길이를  $L$ 이라 할 때, 대상 길이  $L_{\text{target}}$ 은 식 (4-2)와 같이 정의한다.

$$L_{\text{target}} = 2^{\lceil \log_2 L \rceil}, \quad (4-2)$$

여기서  $\lceil \cdot \rceil$ 은 천장 함수(ceiling function)로  $L$  이상인 가장 작은 2의 거듭제곱을 선택한다. 신호 길이 표준화는 신호의 주요 구조가 중앙 부근에 유

지되도록 하기 위해 좌우 대칭 방식으로 수행된다. 즉, 기존 신호의 앞쪽과 뒤쪽에 추가할 제로 패딩 길이  $p_{\text{left}}, p_{\text{right}}$  를 식 (4-3)과 같이 정의하고 원 신호의 좌우에 각각  $p_{\text{left}}, p_{\text{right}}$  개의 0을 추가한다.

$$p_{\text{left}} = \lfloor \frac{L_{\text{target}} - L}{2} \rfloor, p_{\text{right}} = L_{\text{target}} - L - p_{\text{left}} \quad (4-3)$$

이를 통해 신호의 중심부에 위치한 주요 피크와 패턴은 그대로 유지되면서 인코더-디코더 구조가 요구하는 2의 거듭제곱 길이를 만족하게 된다. 최종적으로 전역 Min-Max 정규화와 제로 패딩을 거친 신호는 길이가 동일한  $[0, 1]$  범위의 1차원 벡터로 정규화되며 생성 모델의 입력으로 사용된다. 데이터 전처리 단계의 전체 흐름은 그림 [4-1]의 좌측 상단의 전처리 블록으로 표현할 수 있으며 이후 신호 생성 전략과 CVAE 기반 비선형 혼합 신호 생성 모델은 이러한 정규화된 신호를 기반으로 학습된다.

#### 4.1.2 모델 학습을 위한 데이터 증강 전략

제안 프레임워크는 극히 제한된 수의 실측 신호 데이터셋만으로는 혼합 비율 조건 공간 전체를 충분히 커버하기 어렵다는 점을 고려하여 전처리된 순수 성분 신호와 소수의 혼합 신호로부터 학습용 가상 샘플을 구성하는 증강 전략을 포함한다. 이를 위해 상황에 따라 다른 두 가지 전략을 사용한다. 하나는 순수 성분 신호를 선형 결합하여 이상적인 선형 혼합 가정을 따르는 베이스라인 데이터를 구성하는 Strategy 1이고 다른 하나는 실제 측정된 혼합 신호를 앵커로 삼아 목표 혼합 비율 주변에서 동적 보간을 수행함으로써 비선형 혼합 상호작용을 반영한 가상 신호를 생성하는 Strategy 2이다. 혼합 비율  $a_i \in [0, 1]$ 에서 측정된 실측 혼합 신호를 포함하는 집합을  $D_{\text{meas}} = \{(a_i, s_i)\}_{i=0}^{n+1}$ 로 표기 한다. 여기서  $a_0 = 0$ 과  $a_{n+1} = 1$ 은 두 순수 성분 신호에 대응하고  $a_1, \dots, a_n$ 은 서로 다른 혼합 비율에서 측정된 실측 혼합 신호의 혼합 비율을 의미한다. 실측 혼합 신호가 전혀 존재하지 않는 경우에는  $D_{\text{meas}}$ 가  $\{(a_0, s_a), (a_{n+1}, s_b)\}$ 에만 해당하므로 이때는 Strategy 1에 의해 생성된 선형 혼합 신호만을 이용해 모델을 학습하게 된다. 반대로 두 순수 성분

이외에 혼합 비율이 서로 다른 실측 혼합 신호가 하나 이상 확보된 경우에는 Strategy 2를 사용해 학습 데이터를 구성한다.

두 전략으로부터 얻어진 증강 신호-조건 벡터 쌍  $(s_r^{\text{aug}}, C_r)$ 은 모두 동일한 조건 표현  $C_r = [r, 1-r]$ 을 사용하여 4.1.3장에서 설명할 CVAE 기반 생성 모델의 입력으로 사용된다.

#### 4.1.2.1 Strategy 1: 순수 성분 신호의 선형 결합

Strategy 1은 순수 성분 신호만 존재하는 상황에서도 혼합 비율 측 전체에 대한 학습용 데이터를 구성하기 위한 선형 결합 기반 증강 전략이다. 전처리된 두 순수 성분 신호를  $s_a \in \mathbb{R}^{L_{\text{target}}}$ ,  $s_b \in \mathbb{R}^{L_{\text{target}}}$ 이라 두고 구간  $[0, 1]$ 에서 성분  $a$ 의 혼합 비율을 나타내는 스칼라  $r$ 을 샘플링한다. Strategy 1에서는  $r$ 을 성분  $a$ 의 비율,  $1-r$ 을  $b$ 의 비율로 정의하여 두 순수 신호를 비율 가중 합 형태로 결합함으로써 선형 혼합 신호  $s_r^{\text{aug}}$ 을 구성한다. 이 과정을 다양한  $r$ 값에 대해 반복 수행하면 두 개의 순수 성분 신호만으로도 혼합 비율 측 전역에 걸친 연속적인 가상신호와 그에 상응하는 조건 벡터를 생성할 수 있다. 혼합 비율 측 상에서 보면  $r=0$ 과  $r=1$ 에 각각  $s_a, s_b$ 가 위치하고  $0 < r < 1$ 에 대해서는 이 둘을 잇는 직성 경로 상에 선형 혼합 신호들이 배치되는 구조를 이룬다. Strategy 1의 전체 절차는 Algorithm 1과 같다.

---

#### Algorithm 1 Signal generation by linear combination.

---

**Input:** Preprocessed pure-component signals  $s_a, s_b$

**Output:** Augmented signal  $s_r^{\text{aug}}$ , condition vector  $C_r$

---

- 1:   ▷ 1. Sampling target mixture ratio
  - 2:    $r \leftarrow U(0, 1)$
  
  - 3:   ▷ 2. Computing the final signal and condition vector
  - 4:    $s_r^{\text{aug}} \leftarrow r \cdot s_a + (1-r) \cdot s_b$
  - 5:    $C_r \leftarrow [r, 1-r]$
  - 6:   return  $s_r^{\text{aug}}, C_r$
- 

표 [4-1] 선형 조합을 통한 신호 생성 의사 코드

---

**Algorithm 2** Signal generation by dynamic interpolation.

---

Input: Dictionary of preprocessed measured signals  $D_{\text{meas}} = \{(a_i, s_i)\}_{i=0}^{n+1}$

▷ where  $a_0 = 0, a_{n+1} = 1$ ;  $s_i$  denotes the signal at mixture ratio  $a_i$

Output: Augmented signal  $s_r^{\text{aug}}$ , condition vector  $C_r$

---

```
1:  ▷ 1. Sampling target mixture ratio and initializing variables
2:   $r \leftarrow U(0, 1)$ 
3:   $s_{\text{sum}} \leftarrow \vec{0}$ 
4:   $N \leftarrow 0$ 

5:  ▷ 2. Partitioning measured data based on the target ratio
6:  LowerSet  $\leftarrow \{(a_l, s_l) \in D_{\text{meas}} \mid a_l < r\}$ 
7:  UpperSet  $\leftarrow \{(a_u, s_u) \in D_{\text{meas}} \mid a_u > r\}$ 

8:  ▷ 3. Interpolating for all pairs and accumulating the results
9:  for  $(a_l, s_l) \in \text{LowerSet}$  do
10:   for  $(a_u, s_u) \in \text{UpperSet}$  do
11:     $w \leftarrow (r - a_l) / (a_u - a_l)$ 
12:     $s_{\text{int}} \leftarrow w \cdot s_u + (1 - w) \cdot s_l$ 
13:     $s_{\text{sum}} \leftarrow s_{\text{sum}} + s_{\text{int}}$ 
14:     $N \leftarrow N + 1$ 
15:   end for
16: end for

17: ▷ 4. Reinforcing fidelity with measured data if available
18: if  $r \in \text{Keys}(D_{\text{meas}})$  then
19:    $s_{\text{sum}} \leftarrow s_{\text{sum}} + D_{\text{meas}}[r]$ 
20:    $N \leftarrow N + 1$ 
21: end if

22: ▷ 5. Computing the final spectrum and condition vector
23:  $s_r^{\text{aug}} \leftarrow s_{\text{sum}} / N$ 
24:  $C_r \leftarrow [r, 1 - r]$ 
25: return  $s_r^{\text{aug}}, C_r$ 
```

---

표 [4-2] 동적 보간을 통한 신호 생성 의사 코드

#### 4.1.2.2 Strategy 2: 실측 혼합 신호의 동적 보간

Strategy 2는 소수의 실측 혼합 신호가 이미 비선형 혼합 상호작용의 정보

를 포함하고 있다는 점에 착안하여 앞에서 정의한 전처리된 실측 혼합 신호를 포함하는 집합  $D_{\text{meas}} = \{(a_i, s_i)\}_{i=0}^{n+1}$  전체를 사용하는 동적 보간 기반 증강 전략이다. Strategy 2에서는 이 집합에서 목표 비율  $r$ 보다 작은 혼합 비율을 갖는 신호들과 더 큰 혼합 비율을 갖는 신호들을 각각 하한 집합과 상한 집합으로 분할한 뒤 두 집합에서 각각 선택된 모든 쌍에 대해 선형 보간을 수행하여  $r$ 에 대응하는 여러 가상 신호를 생성한다. 이렇게 생성된 보간 신호는 모두 동일한 목표 혼합 비율  $r$ 을 만족하므로 이들을 평균하여 최종 증강 신호  $s_r^{\text{aug}}$ 를 얻고 조건 벡터는 Strategy 1에서와 동일하게  $C_r = [r, 1-r]$ 로 반환한다. Strategy 2의 전체 절차는 Algorithm 2와 같다. Strategy 2는 동적 보간 절차를 통해 순수 성분 신호와 소수의 실측 혼합 신호를 활용해 혼합 비율 축 전역에 걸쳐 비선형 혼합 상호작용을 반영한 가상 신호를 구성한다는 점에서 Strategy 1과 구별된다. Strategy 1이 두 순수 성분을 잇는 단일 직선 경로 상에서 가상 신호를 생성하는 반면 Strategy 2는 여러 혼합 비율에서 측정된 실측 신호들을 앵커로 사용하는 다수의 보간 경로를 통해 실제 데이터가 그리는 비선형 궤적을 학습 데이터에 주입한다.

#### 4.1.3 비선형성을 고려한 1차원 혼합 신호 생성 모델 아키텍처

앞서 정의한 증강 신호-조건 쌍  $(s_r^{\text{aug}}, C_r)$ 을 입력으로 받아 비선형 혼합 상호작용을 반영한 1차원 혼합 신호를 생성하는 제안 모델은 CVAE 구조를 기반으로 하며 인코더-잠재 공간-디코더의 세 부분으로 구성된다. 인코더는 증강 신호와 조건 벡터를 결합하여 저차원 잠재 벡터  $z$ 로 압축하고, 디코더는  $z$ 와 동일한 조건 벡터  $C_r$ 를 다시 주입받아 해당 조건에서 관측될 법한 혼합 신호  $s_r^{\text{recon}}$ 를 복원한다. 구체적인 아키텍처는 그림 [4-5]와 같이 정리할 수 있다. 인코더는 1차원 증강 신호  $s_r^{\text{aug}} \in \mathbb{R}^{L_{\text{target}}}$ 와 혼합 비율 정보를 담은 조건 벡터  $C_r \in \mathbb{R}^2$ 를 동시에 입력으로 받는다. 먼저 조건 벡터  $C_r$ 를 인코더 전용 임베딩 층  $E_c$ 에 통과시켜 신호 길이와 동일한 차원의 임베딩  $E_c(C_r) \in \mathbb{R}^{L_{\text{target}}}$ 로 변환한다.

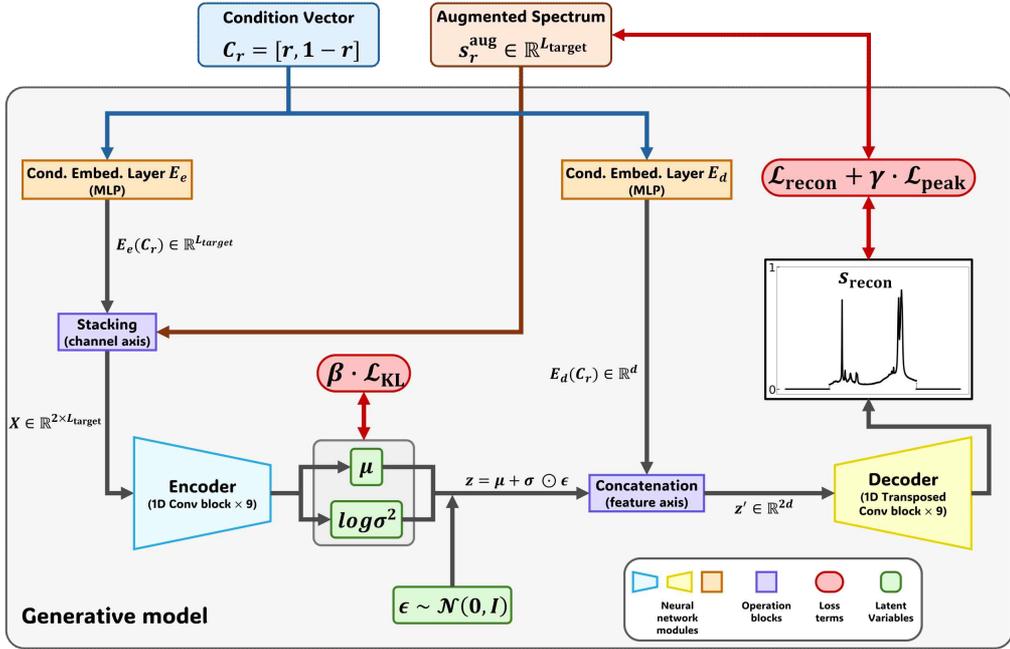


그림 [4-2] CVAE 기반 1차원 혼합 신호 생성 모델 아키텍처

이후  $s_r^{\text{aug}}$ 와 임베딩된 조건  $E_e(C_r)$ 를 채널 축 방향으로 쌓아  $X \in \mathbb{R}^{2 \times L_{\text{target}}}$  형태의 2채널 1차원 신호로 구성한다. 이 텐서는 여러 단계의 1차원 합성곱 (convolution) 블록과 점진적인 다운샘플링을 통해 차원이 점차 축소되고, 마지막 합성곱 블록의 출력을 펼친 뒤 완전연결층에 통과시키면 평균 벡터  $\mu \in \mathbb{R}^d$ 와 로그 분산 벡터  $\log \sigma^2 \in \mathbb{R}^d$ 가 산출된다. 이는 잠재 공간에서의 근사 사후분포  $q_{\Phi}(z | s_r^{\text{aug}}, C_r) = \mathcal{N}(z | \mu, \text{diag}(\sigma^2))$ 를 매개변수화하는 역할을 하며, 여기서  $\Phi$ 는 인코더 파라미터 집합이다. 학습 단계에서는 재매개변수화 기법 (reparameterization trick)을 사용하여 식 (4-4)와 같이 와 같이 표준 정규분포에서 샘플링한 노이즈  $\epsilon$ 를 이용해 잠재 벡터  $z \in \mathbb{R}^d$ 를 생성함으로써 역전파를 가능하게 한다.

$$\sigma = \exp(0.5 \log \sigma^2), \epsilon \sim \mathcal{N}(0, I), z = \mu + \sigma \odot \epsilon \quad (4-3)$$

디코더는 이렇게 얻어진 잠재 벡터  $z$ 와 동일한 조건 벡터  $C_r$ 를 다시 입력으로 받아 목표 조건에 맞는 1차원 신호를 복원한다. 조건 정보가 잠재 공

간에서 소실되지 않도록 디코더 측에서도 조건 벡터  $C_r$ 를 별도의 임베딩 층  $E_d$ 를 통해  $E_d(C_r) \in \mathbb{R}^d$ 로 사상하고 잠재 벡터와 조건 임베딩을 특성 축 방향으로 연결하여  $z' = \text{concat}(z, E_d(C_r)) \in \mathbb{R}^{2d}$  형태의 확장된 잠재 표현을 구성한다. 이  $z'$ 는 여러 단계의 1차원 전치 합성곱(transposed convolution) 블록의 업샘플링 과정을 통해 점차 길이가 늘어나 최종적으로 입력과 동일한 길이의 복원 신호  $s_r^{\text{recon}} \in \mathbb{R}^{L_{\text{target}}}$ 을 생성한다. 인코더와 디코더 양쪽에서 조건 정보를 명시적으로 재주입하는 구조를 채택함으로써 모델은 다운샘플링과 업샘플링 전 과정에서 목표 혼합 비율 정보를 유지하면서 해당 조건에 부합하는 비선형 혼합 패턴을 학습할 수 있다.

학습이 충분히 진행된 후 추론 단계에서는 주어진 조건 벡터  $C_r$ 를 고정한 상태에서 잠재 벡터  $z$ 를 사전분포  $p(z) = N(0, I)$ 로부터 반복적으로 샘플링하고 하여 디코더에 통과시켜 동일한 혼합 비율을 갖는 다수의 1차원 혼합 신호를 얻을 수 있다. 이는 제한된 수의 실측 혼합 신호에서 출발하여 조건 공간 전역에 대해 다양한 국소 변동성을 갖는 고품질 신호를 생성하는 데 핵심적인 역할을 한다.

#### 4.1.4 손실 함수

기본적으로 제안 모델의 학습은 변분 오토인코더(Variational Autoencoder, VAE)의 표준 목적 함수에 따라 재구성 손실(reconstruction loss)과 Kullback-Leibler(KL) 발산 손실을 동시에 최소화하는 방향으로 진행된다. 재구성 손실  $L_{\text{recon}}$ 은 입력 증강 신호  $s_r^{\text{aug}}$ 와 재구성 신호  $s_r^{\text{recon}}$  사이의 MSE를 사용하며 식 (4-4)와 같이 정의한다.

$$L_{\text{recon}} = \frac{1}{L_{\text{target}}} \|s_r^{\text{aug}} - s_r^{\text{recon}}\|_2^2 \quad (4-4)$$

KL 발산 손실  $L_{\text{KL}}$ 은 인코더가 출력하는 잠재 변수 분포  $q_{\phi}(z | s_r^{\text{aug}}, C_r)$ 가 표준 정규분포  $p(z) = N(0, I)$ 에 가깝도록 유도하는 정규화 항이다. 배치 크기를  $N$ , 잠재 공간의 차원을  $d$ , 인코더가 산출한 평균과 분산을 각각  $\mu_{ij}, \sigma_{ij}^2$ 라

하면 한 배치에 대한 KL 발산 손실은 식 (4-5)와 같이 정의할 수 있다.

$$L_{\text{KL}} = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^d (\mu_{ij}^2 + \sigma_{ij}^2 - \log \sigma_{ij}^2 - 1) \quad (4-5)$$

그러나 1차원 혼합 신호에서 도메인적으로 중요한 정보는 국소적인 다수의 피크 형태에 집중되어 있는 경우가 많으며 평균 오차에 기반한 재구성 손실 기반의 VAE 표준 목적 함수만으로는 폭이 좁고 진폭이 큰 피크의 위치와 강도를 정밀하게 복원하기 어렵다는 한계가 있다. 신호 전체 구간에 걸친 MSE는 넓은 베이스라인 구간에서의 작은 오차가 누적되어 좁은 피크 구간의 상대적인 기여도가 희석되기 때문에 전체 파형 형태는 유사해 보이더라도 혼합 비율 조건에 민감하게 반응하는 피크의 위치와 강도가 부정확하게 생성되는 문제가 발생한다. 이에 본 연구에서는 피크 정보의 재현성을 직접적인 최적화 변수로 고려하기 위한 피크 손실  $L_{\text{peak}}$ 을 추가한다.

제안하는 피크 손실은 원본 증강 신호  $s_r^{\text{aug}}$ 에서 의미 있는 피크 후보를 검출하고 두 단계의 필터링 과정을 통해 잡음에 의한 가짜 피크나 중요도가 낮은 국소 최대를 제거한 뒤, 최종적으로 선택된 상위  $N_{\text{topK}}$ 개 피크 위치에서 원본과 재구성 신호의 진폭 차이를 MSE 형태로 계산한다. 피크 손실의 계산 절차는 Algorithm 3과 같이 정리할 수 있으며 여기서  $d_{\text{min}}$ 은 피크 간 최소 거리,  $h_{\text{min}}$ 은 피크 최소 높이,  $N_{\text{topK}}$ 는 최종적으로 검출할 피크 개수에 대한 하이퍼파라미터를 의미한다. 본 연구에서는 대표적인 1차원 혼합 신호의 피크 폭과 SNR, 전체 피크 개수를 사전 분석한 결과, 너무 많은 미세 피크를 포함해 손실이 불안정해지지 않으면서도 주요 피크는 제외되지 않도록 하기 위해  $d_{\text{min}} = 10$ ,  $h_{\text{min}} = 0.1$ ,  $N_{\text{topK}} = 10$ 으로 설정하였으며 이는 여러 예비 실험을 통해 경험적으로 조정된 값이다.

최종적으로 제안 모델의 학습 목적 함수는 재구성 손실, KL 발산 손실, 피크 손실을 가중합 형태로 결합한 식 (4-6)과 같은 형태를 갖는다.

$$L_{\text{total}} = L_{\text{recon}} + \beta \cdot L_{\text{KL}} + \gamma \cdot L_{\text{peak}} \quad (4-6)$$

여기서  $\beta$ 와  $\gamma$ 는 각 손실 항의 상대적 중요도를 조절하는 가중 계수이며 본 연구에서는 여러 예비 실험을 통해  $\beta = 0.2$ ,  $\gamma = 1.0$ 으로 경험적으로 튜닝하였

다. 이와 같은 손실 설계는 1차원 혼합 신호 전 구간에 대한 평균적 복원 성능을 확보하는 동시에 피크를 정밀하게 재현하도록 모델을 유도한다는 점에서 의미가 있다.

---

**Algorithm 3 peak loss calculation.**

---

**Input:** Augmented signal  $s_r^{\text{aug}}$ , reconstructed signal  $s_r^{\text{recon}}$   
**Parameters:** Minimum distance  $d_{\min}$ , minimum height  $h_{\min}$ ,  
number of peaks  $N_{\text{topK}}$   
**Output:** peak loss  $L_{\text{peak}}$

---

```

1:  ▷ 1. Detecting local maxima
2:   $M_{\text{local}} \leftarrow (s_r^{\text{aug}}[1:-1] > s_r^{\text{aug}}[0:-2]) \wedge (s_r^{\text{aug}}[1:-1] > s_r^{\text{aug}}[2:])$ 

3:  ▷ 2. Filtering by minimum height (height filtering)
4:   $M_{\text{height}} \leftarrow s_r^{\text{aug}} > h_{\min}$ 

5:  ▷ 3. Removing adjacent peaks via max-pooling
6:   $s_{\text{regionalMax}} \leftarrow \text{MaxPool1D}(s_r^{\text{aug}}, \text{kernelSize} = 2d_{\min} + 1)$ 
7:   $M_{\text{dist}} \leftarrow s_r^{\text{aug}} == s_{\text{regionalMax}}$ 

8:  ▷ 4. Generating the final peak mask and selecting top-K peaks
9:   $M_{\text{final}} \leftarrow M_{\text{local}} \wedge M_{\text{height}} \wedge M_{\text{dist}}$ 
10:  $s_{\text{filtered}} \leftarrow s_r^{\text{aug}} \odot M_{\text{final}}$ 
11:  $\text{idx}_{\text{peak}} \leftarrow \text{TopK} - \in \text{dices}(s_{\text{filtered}}, N_{\text{TK}})$ 

12: ▷ 5. Computing the peak loss
13:  $V_{\text{aug}} \leftarrow s_r^{\text{aug}}[\text{idx}_{\text{peak}}]$ 
14:  $V_{\text{recon}} \leftarrow s_r^{\text{recon}}[\text{idx}_{\text{peak}}]$ 
15:  $L_{\text{peak}} \leftarrow \text{MSE}(V_{\text{aug}}, V_{\text{recon}})$ 
16: return  $L_{\text{peak}}$ 

```

---

표 [4-3] 피크 손실 계산 의사 코드

## 4.2 성능평가

### 4.2.1 실험 설계

본 연구의 실험은 이성분 화학 혼합계에서 측정한 1차원 라만 신호를 대상으로 수행하였다. 데이터셋은 dimethyl methylphosphonate(DMMP)와

2-chloroethyl ethyl sulfide(2-CEES) 두 순수 성분의 라만 스펙트럼과 두 물질을 총 부피를 고정한 상태에서 혼합 비율 9:1, 7:3, 5:5, 3:7, 1:9로 조합하여 측정된 이성분 혼합 신호로 구성된다.

모델 학습과 비교 실험에서는 4.1.2장의 Strategy 1, Strategy 2를 기반으로 네 가지 방법을 고려한다. 첫째, 순수 성분 신호만을 선형 결합하여 혼합 신호를 근사하는 선형 결합 방법으로 제안 프레임워크를 사용하지 않는 이론적 하한선(baseline) 역할을 한다. 둘째, Strategy 1에 의해 생성된 선형 결합 기반 증강 신호만을 사용하여 CVAE 기반 생성 모델을 학습하되 피크 손실을 사용하지 않는 구성(Strategy 1 w/o  $L_{\text{peak}}$ )이다. 셋째, 동일하게 Strategy 1 기반 증강 신호를 사용하지만 4.1.4장에서 정의한 피크 손실을 포함하여 학습하는 구성(Strategy 1 w/  $L_{\text{peak}}$ )이다. 마지막으로 실측 혼합 신호를 앵커로 활용하는 동적 보간 기반 증강 전략인 Strategy 2와 피크 손실을 함께 사용하는 구성이 제안 프레임워크의 전체 모델(Strategy 2)이며 제안하는 비선형 혼합 신호 생성 모델의 완전한 형태에 해당한다. 네 방법 모두 동일한 데이터 전처리 설정을 공유한다.

생성 신호의 품질 평가는 개별 신호 수준과 신호 집합 수준을 아우르는 여러 지표를 병행하여 수행한다. 우선, 혼합 비율 집합을  $R = \{0, 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9, 1\}$ 라 두고 각 혼합 비율  $r \in R$ 에 대해 길이  $L$ 을 갖는 측정 신호를  $s_r^{\text{meas}} \in \mathbb{R}^L$ , 제안 프레임워크가 생성한 신호를  $s_r^{\sim \text{recon}} \in \mathbb{R}^L$ 로 표기한다. 여기서  $s_r^{\sim \text{recon}} \in \mathbb{R}^L$ 는 4.1.1장의 전처리 과정에서 제로 패딩된 재구성 신호 중 실제 유효 구간만을 잘라낸 신호이다.

각 혼합 비율  $r$ 에 대해 MSE와 ED는 식 (4-7)과 같이 정의된다.

$$\text{MSE}(r) = \frac{1}{L} \| s_r^{\sim \text{recon}} - s_r^{\text{meas}} \|_2^2, \quad \text{ED}(r) = \| s_r^{\sim \text{recon}} - s_r^{\text{meas}} \|_2 \quad (4-7)$$

혼합 비율 전체에 대한 평균 MSE와 ED는 식 (4-8)과 같이 계산한다.

$$\overline{\text{MSE}} = \frac{1}{|R|} \sum_{r \in R} \text{MSE}(r), \quad \overline{\text{ED}} = \frac{1}{|R|} \sum_{r \in R} \text{ED}(r) \quad (4-8)$$

신호의 전반적인 형태학적 유사도와 상관성을 평가하기 위해 코사인 유사도(Cosine Similarity, CS)와 PCC를 추가로 사용한다. 각 혼합 비율  $r$ 에 대해

CS와 PCC는 각각 식 (4-9), 식 (4-10)와 같다.

$$\text{CS}(r) = \frac{s_r^{\sim \text{recon}} \cdot s_r^{\text{meas}}}{\|s_r^{\sim \text{recon}}\|_2 \|s_r^{\text{meas}}\|_2}, \quad (4-9)$$

$$\text{PCC}(r) = \frac{\sum_{i=1}^L (s_{r,i}^{\sim \text{recon}} - \mu_r^{\text{recon}})(s_{r,i}^{\text{meas}} - \mu_r^{\text{meas}})}{\sqrt{\sum_{i=1}^L (s_{r,i}^{\sim \text{recon}} - \mu_r^{\text{recon}})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^L (s_{r,i}^{\text{meas}} - \mu_r^{\text{meas}})^2}}, \quad (4-10)$$

여기서  $\mu_r^{\text{recon}}$ ,  $\mu_r^{\text{meas}}$ 는 각각  $s_r^{\sim \text{recon}}$ ,  $s_r^{\text{meas}}$ 의 평균값이다. 혼합 비율 전체에 대한 평균 CS와 PCC는 식 (4-11)과 같이 계산한다.

$$\overline{\text{CS}} = \frac{1}{|R|} \sum_{r \in R} \text{CS}(r), \quad \overline{\text{PCC}} = \frac{1}{|R|} \sum_{r \in R} \text{PCC}(r) \quad (4-11)$$

개별 신호 수준의 오차와 상관도뿐 아니라 측정 신호 집합과 생성 신호 집합이 이루는 분포 전체의 유사성을 평가하기 위해 FID를 사용한다. 측정 신호 집합 임베딩의 평균과 공분산을  $\mu_{\text{meas}}$ ,  $\Sigma_{\text{meas}}$ , 생성 신호 집합 임베딩의 평균과 공분산을  $\mu_{\text{recon}}$ ,  $\Sigma_{\text{recon}}$ 이라 할 때 두 분포 간 FID는 식 (4-12)와 같다.

$$\text{FID} = \|\mu_{\text{meas}} - \mu_{\text{recon}}\|_2^2 + \text{Tr}(\Sigma_{\text{meas}} + \Sigma_{\text{recon}} - 2(\Sigma_{\text{meas}}\Sigma_{\text{recon}})^{\frac{1}{2}}) \quad (4-12)$$

비교 실험에서는 학습에 사용되는 참조 혼합 신호의 개수를  $k$ 로 두고  $k \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$ 와 같이 변화시키면서 성능 변화를 분석한다. 예를 들어  $k=3$ 인 경우 5개 참조 혼합 비율 중 3개를 선택하는 모든 가능한 조합에 대해 독립적으로 훈련 및 평가되었으며 이러한 결과의 평균을 최종 성능으로 평가한다. 또한 모든 정량적 결과는 동일한 조건에서 잠재 벡터  $z$ 를 새로 샘플링하여 1,000회의 생성-평가를 반복한 뒤 평균값을 사용하였다.

모델의 학습 및 평가는 다음과 같은 컴퓨팅 환경에서 수행되었다. 하드웨어는 Intel(R) Xeon(R) w5-3435X CPU, NVIDIA RTX A6000 GPU(46GB VRAM), 256 RAM으로 구성되었다. 소프트웨어 환경은 Ubuntu 22.04 LTS 운영 체제를 기반으로 Python 3.12.11, PyTorch 2.7.1, CUDA 12.6을 활용했다. 입력 신호의 최종 길이  $L_{\text{target}}$ 은 4096으로 표준화되었고 모델의 잠재 공간의 차원( $d$ )은 20으로 설정되었다. 모델 학습에는 Adam 옵티마이저

(optimizer)가 사용되었으며 학습률은  $1 \times 10^{-4}$ , 배치 크기는 16, 총 50,000 에포크(epoch)가 적용되었다.

#### 4.2.2 정성 평가

제안된 프레임워크의 각 핵심 구성 요소가 신호 생성 품질에 미치는 영향을 시각적으로 확인하기 위해 그림 [4-3]과 같이 생성 결과와 실험적으로 측정된 신호를 직접 비교한다. Strategy 1 w/o  $L_{\text{peak}}$ , Strategy 1 w/  $L_{\text{peak}}$ , Strategy 2의 생성 결과 모두 실험적으로 측정된 신호와 중첩되어 있다. 마지막 All Residuals 열은 오차를 보여주는 잔차 플롯으로 0에 가까울수록 오차가 적고 성능이 우수함을 나타낸다. 첫 번째 열에서 Strategy 1 w/o  $L_{\text{peak}}$ 은 측정된 신호의 전체적인 모양만 모방하며 다양한 혼합비에서 주요 피크 세기를 정확하게 재현하지 못한다는 명확한 한계를 보인다. 이 오차는 네 번째 열의 잔차 플롯에서 명확하게 드러난다. 파란색 선은 특히 약  $3000\text{cm}^{-1}$  라만 시프트(Raman shift) 부근에서 큰 값의 차이를 보인다. 두 번째 열에서 Strategy 1 w/o  $L_{\text{peak}}$ 은 피크 손실이 적용되면서 이전 결과의 가장 큰 문제였던 부정확한 피크 세기 문제를 효과적으로 해결한다. 잔차 플롯에서 녹색 선의 오차가 현저히 감소했다는 사실은 제안된 피크 손실이 데이터의 중요한 특성을 보존하는 데 결정적인 역할을 한다는 것을 보여준다. 그러나 훈련 데이터의 한계로 인해 전체 신호 강도를 완벽하게 재현하지는 못하며 이는 잔차 플롯 기준선 근처에 남아있는 오차로 나타난다. 마지막으로 세 번째 열의 최종 제안 기법 Strategy 2는 측정된 신호와 높은 수준의 시각적 일관성을 보이며 모든 혼합 비율에서 거의 구별할 수 없다. 가장 중요한 점은 잔차 플롯에서 빨간색 선이 다른 두 기법에 비해 현저히 작다는 점이다. 이는 제안 기법이 주요 피크뿐만 아니라 신호 간 상호작용으로 발생하는 미묘한 비선형성까지 가장 정확하게 포착한다는 것을 시각적으로 증명한다.

#### 4.2.3 정량 평가

정량적 성능 비교는 표 [4-1]에 요약되어 있다. 전반적으로 선형 조합 기

법은 측정 스펙트럼과 가장 큰 차이를 보이는 반면 제안된 Strategy 2는 기준 혼합 스펙트럼 수  $k$ 가 증가함에 따라 모든 평가 지표에서 일관되게 가장 우수한 성능을 보인다. 먼저, 실측 혼합 스펙트럼 없이 생성 모델만을 사용했을 때의 효과를 살펴본다. 선형 결합 기법과 비교하면 선형 결합된 스펙트럼만으로 학습된 기본 생성 모델(Strategy 1 w/o  $L_{\text{peak}}$ )은 FID 점수를 358.43에서 338.89로 소폭 개선하여 모델이 학습 데이터의 전체 분포를 어느 정도 모사하고 있음을 시사한다.

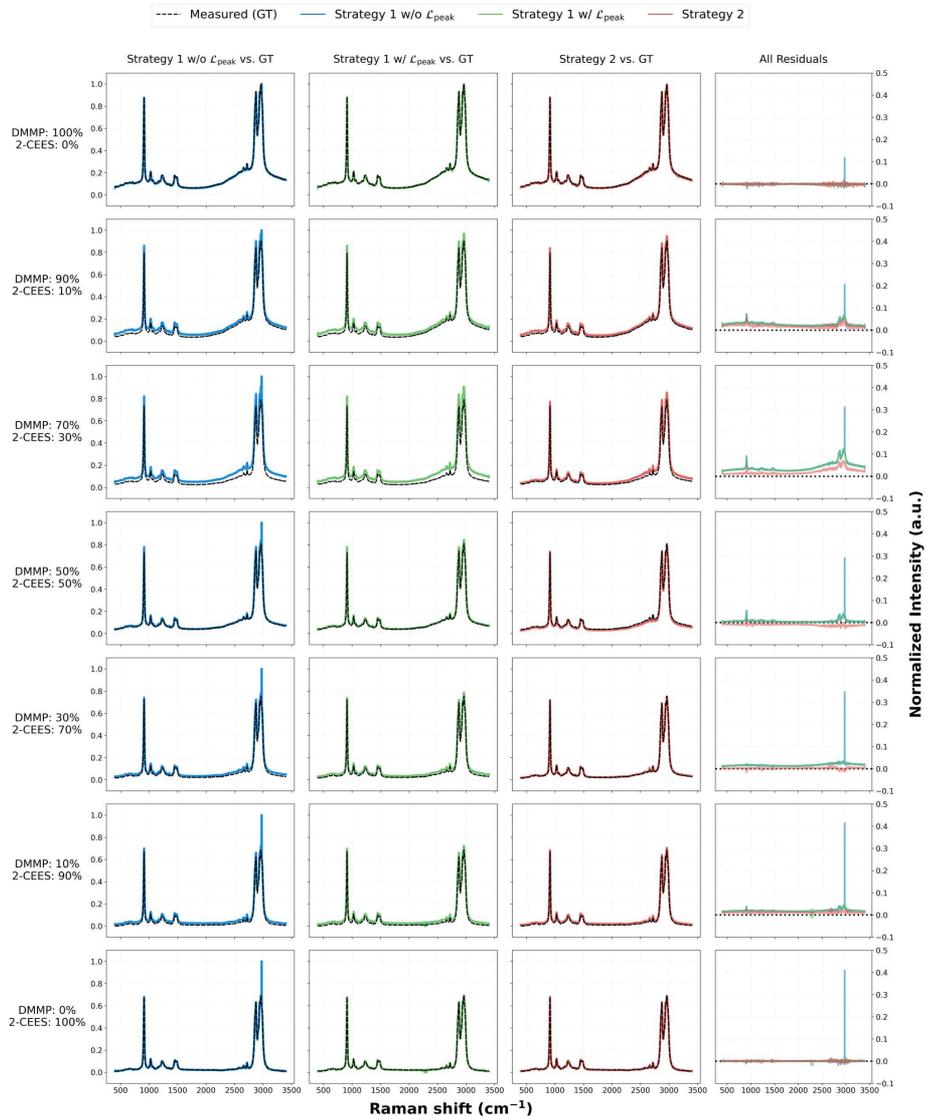


그림 [4-3] 제안 기법 적용 여부에 따른 생성 신호의 정성적 비교

Method	# Reference Samples ( $k$ )	MSE (↓)	ED (↓)	CS (↑)	PCC (↑)	FID (↓)
Linear Combination	-	0.00026	0.77981	0.99793	0.99734	358.431
Strategy 1 w/o $L_{\text{peak}}$	0	0.00025	0.78427	0.99798	0.99733	338.889
Strategy 1 w/ $L_{\text{peak}}$	0	0.00026	0.81111	0.99794	0.99728	340.831
Strategy 2	1	0.00017	0.64341	0.99851	0.99806	194.107
	2	0.00013	0.57722	0.99875	0.99838	130.535
	3	0.00011	0.53409	0.99891	0.99860	94.946
	4	0.00009	0.50686	0.99902	0.99876	70.814
	5	0.00008	0.48421	0.99912	0.99889	55.120

표 [4-4] 피크 손실 적용 여부와 기준 스펙트럼 수( $k$ )에 따른 신호 생성 전략 간 정량적 성능 비교

그러나 개별 샘플 수준에서 재구성 정확도를 측정하는 MSE나 ED와 같은 지표의 개선은 미미하다. 이러한 결과는 이 모델의 학습 데이터가 두 순수 성분 사이를 잇는 순수하게 선형적인 궤적 상에만 존재한다는 사실과 상응한다. 즉, 순수 성분 신호 자체에는 비선형 상호작용 정보가 포함되어 있지 않기 때문에 모델 역시 존재하지 않는 비선형성을 복원할 수 없다. 다시 말해, 생성 모델을 도입하는 것만으로는 근본적인 비선형성 문제를 해결할 수 없다.

정성 평가에서는 피크 손실이 신호의 중요한 피크에서 세기 오차를 눈에 띄게 줄여 준다는 사실을 시각적으로 확인하였다. 그러나 표 [4-1]에서 볼 수 있듯이 Strategy 1 w/  $L_{\text{peak}}$ 는 전역적인 평가 지표인 MSE나 FID 관점에서 Strategy 1 w/o  $L_{\text{peak}}$  대비 수치상 개선을 거의 보이지 않는다. 이러한 불일치는 해당 지표들이 스펙트럼 전체 구간에 걸친 오차를 평균하는 방식으로 정의되어 있기 때문이다. 피크 손실이 폭이 좁은 피크 주변의 국소적인 오차를 상당 부분 보정하더라도 여전히 선형적인 학습 데이터로 인해 발생하는 베이스라인 불일치가 전체 평균값을 지배하게 된다. 따라서 피크 손실은 국소적인 피크를 보존하는 데에는 효과적이지만 학습 데이터가 선형 영역에 한정되어 있을 때 스펙트럼 전체 수준의 정량 지표에는 거의 영향을 미치지 못한다. 이는 피크 손실을 단독으로 사용하는 접근의 근본적인 한계를 보여 주며

진정한 비선형 학습 예제를 제공할 수 있는 추가 메커니즘의 필요성을 뒷받침한다.

동적 보간을 통해 실측 혼합 신호를 학습 데이터에 주입하는 Strategy 2는 이러한 한계를 효과적으로 해소한다. 주목할 점은 실측 혼합 신호가 단 하나만 추가되더라도( $k=1$ ) 성능이 크게 개선된다는 사실이다.  $k=0$ 인 경우와 비교했을 때 MSE는 약 32.0% 감소하고, FID는 42.7% 개선된다. 나아가  $k$ 가 증가함에 따라 성능이 지속적으로 향상되는 양상은 제안 모델이 단순히 데이터 양 증가의 효과를 보는 수준을 넘어 각 참조 샘플을 비선형 매니폴드의 구조를 정교하게 규정하는 앵커로 활용하고 있음을 보여 준다. 결국 다섯 개의 참조 혼합 스펙트럼을 사용할 경우( $k=5$ ) 선형 결합 기법 대비 MSE를 약 69.2% 감소시키고 FID를 84.6% 개선하며 PCC는 0.999에 근접하는 값을 달성한다. 이러한 관찰은 두 핵심 구성 요소의 역할을 일관되게 해석할 수 있는 근거를 제공한다. 피크 손실은 정성 평가에서 확인한 것처럼 국소적인 피크 수준의 정보를 보존하는 데 매우 효과적이지만 학습 데이터가 선형 영역에 머무르는 한 전역적인 정량 지표에 미치는 영향은 제한적이다. 반면 동적 보간은 물리적으로 더 현실적인 비선형 혼합 예제를 학습 과정에 주입함으로써 모델이 실제 혼합계가 따르는 비선형 매니폴드를 학습하도록 돕는다.

#### 4.2.4 잠재 공간 시각화를 통한 비선형 궤적 학습 검증

제안 프레임워크의 모델이 혼합계의 비선형 관계를 어떤 방식으로 학습했는지 보다 깊은 이해를 위해 최종 학습된 모델의 잠재 공간을 그림 [4-4]와 같이 시각화하여 분석하였다. 이를 위해 다양한 혼합 비율 조건에 따라 생성된 잠재 벡터  $z$ 를 2차원 주성분 공간(principal component space)으로 투영하였다. 잠재 벡터는 두 개의 순수 성분 신호와 다섯 개의 실측 혼합 신호를 모두 사용하여 학습된 모델의 인코더를 통해 얻었으며 투영 결과는 혼합 비율에 따라 구조화된 잠재 표현의 분포를 보여준다. 이 시각화 결과가 주는 통찰은 다음과 같다. 첫째, 모델이 생성한 잠재 벡터들은 잠재 공간상에 무작위로 흩어져 있지 않고 혼합 비율의 변화에 따라 연속적이고 매끄러운 하나의 궤적을 형성한다.

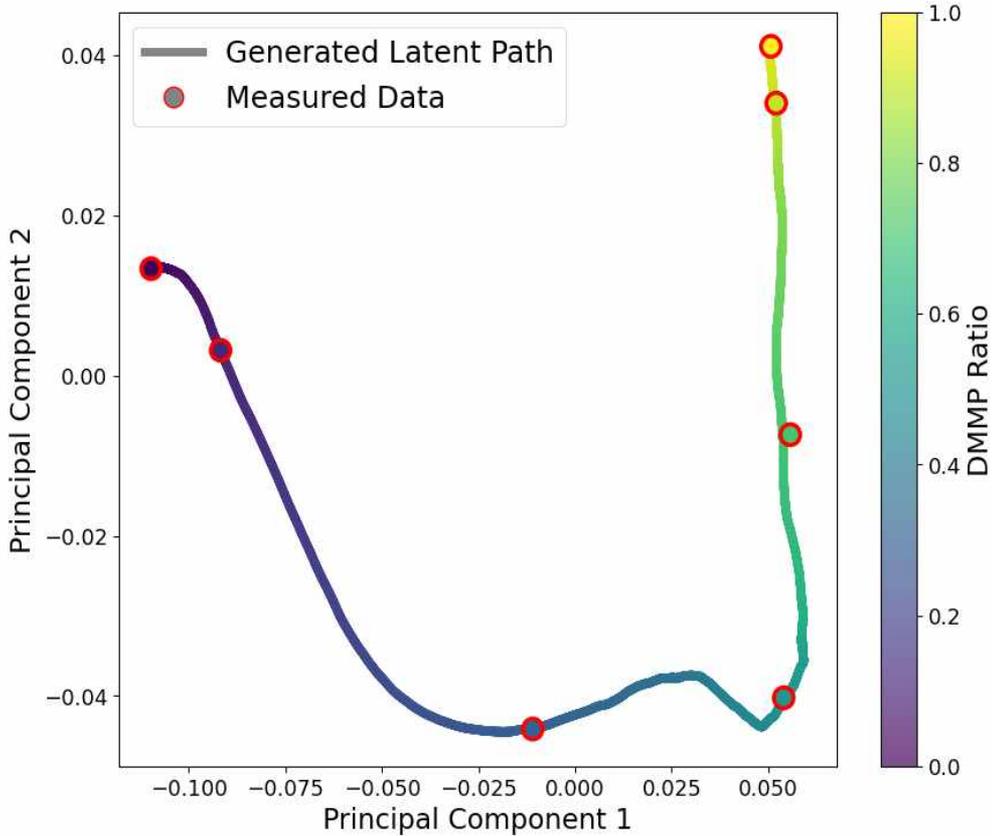


그림 [4-4] 혼합 비율에 따른 학습된 잠재 공간의 비선형 궤적

이는 모델이 개별 데이터 포인트를 단순히 암기한 것이 아니라 두 순수 성분 사이에서 혼합 비율이 변화할 때 나타나는 점진적인 변화 관계라는 데이터의 내재적 구조를 성공적으로 학습했음을 의미한다. 둘째, 보다 중요한 점은 이렇게 형성된 잠재 궤적이 실험적으로 측정된 혼합 신호들에 해당하는 잠재 벡터를 거의 정확하게 관통한다는 사실이다. 그림 [4-4]에서 붉은 테두리로 표시된 점들이 실측 혼합 신호의 잠재 표현이다. 제안 프레임워크의 모델이 학습한 잠재 매니폴드는 임의로 형성된 곡선이 아니라 실제 측정 신호들이 위치한 비선형 궤적을 밀접하게 따르고 있다. 이와 같이 잘 구조화된 조건부 잠재 공간은 임의의 혼합 비율에서 물리적으로 의미 있는 혼합 신호를 생성할 수 있게 해주는 핵심 기반을 형성한다.

### 4.3 소결

IV장에서는 제한된 수의 실측 혼합 신호만으로도 비선형 혼합 상호작용을 반영한 고품질 1차원 혼합 신호를 생성하기 위한 프레임워크를 제안하고 데이터 전처리, 신호 증강, 조건부 생성 모델, 복합 손실 함수로 구성된 전체 파이프라인을 정립하였다. 전처리 단계에서는 서로 다른 계측 조건에서 측정된 1차원 신호를 공통 스케일과 길이로 정규화함으로써 이후 CVAE 기반 생성 모델이 혼합 비율 조건에 따른 비선형 변화를 학습할 수 있는 기반을 마련하였다. 모델 학습을 위한 데이터 증강 측면에서는 순수 성분 신호만을 이용해 혼합 비율 축 전역을 채우는 Strategy 1과 극소수라도 확보된 실측 혼합 신호를 앵커로 삼아 목표 혼합 비율 주변에서 동적 보간을 수행하는 Strategy 2를 도입하였다. Strategy 1은 두 성분 신호의 단순 선형 결합을 통해 조건-신호 쌍을 대량으로 생성함으로써 기본적인 혼합 비율-신호 대응 관계를 학습하게 하고 Strategy 2는 실측 혼합 신호가 놓여 있는 비선형 궤적을 따라 국소적으로 샘플링된 가상 신호를 추가로 제공함으로써 모델이 실제 혼합계의 비선형 매니폴드 구조를 보다 정확히 복원하도록 돕는다. 실험 결과 Strategy 1만으로 학습한 경우에는 선형 결합 베이스라인 대비 FID의 일부 개선 효과는 있으나 MSE나 ED와 같은 전역 재구성 지표 개선은 제한적이었다. 반면, Strategy 2를 도입하면 실측 혼합 신호가 단 한 개 추가되는 경우에도 MSE, FID가 큰 폭으로 감소하고 참조 혼합 신호 수가 증가할수록 성능이 점진적으로 개선되면서 다섯 개의 참조 혼합 신호를 학습에 활용할 경우 단순 선형 결합 대비 MSE 약 69.2%, FID 약 84.6% 개선 및 PCC 약 0.999 수준의 고충실도 신호 생성이 가능함을 확인하였다. 손실 함수 관점에서는 재구성 손실과 정규화 항에 더해 혼합 신호에서 물리화학적으로 중요한 피크 구조를 직접적으로 보존하기 위한 피크 손실을 도입하였다. 피크 손실은 사전 정의된 피크 간 최소 거리, 피크 최소 높이, 검출 피크 개수와 같은 하이퍼파라미터를 기반으로 생성 신호의 피크 위치와 강도 차이를 규제함으로써 전역 지표에서는 잘 드러나지 않는 좁은 피크 영역의 국소 오류를 효과적으로 억제한다. 정량 지표는 주로 신호 전체의 오차를 하나의 평균값으로 요약하는 특성이 있어 피크 손실의 효과가 수치상으로는 크게 반영되지는 않았

지만 정성 평가 결과에서는 주요 피크 근방의 강도 재현성이 눈에 띄게 향상되는 것을 확인하였다. 또한 잠재 공간 분석을 통해 혼합 비율 조건에 따라 생성된 잠재 벡터가 연속적이면서도 비선형적인 궤적을 형성하고 이 궤적이 실측 혼합 신호의 잠재 벡터를 높은 정확도로 통과함을 보였다. 이는 제안 프레임워크가 단순히 개별 신호를 암기하는 수준을 넘어 혼합 비율에 따른 비선형 변화를 내재적으로 모델링하고 있음을 시사한다.

종합하면, IV장에서 제안한 비선형성을 고려한 1차원 혼합 신호 생성 프레임워크는 CVAE 기반 생성 모델, 동적 보간 기반 스펙트럼 증강, 피크 손실을 결합함으로써 극히 제한된 수의 실측 혼합 신호만으로도 물리화학적으로 일관된 고품질 신호를 생성할 수 있음을 보였다. 이는 III장에서 제안한 피크 인지형 적응적 잡음 제거 기법이 계측 신호의 품질을 향상시키는 역할을 수행하고, IV장의 혼합 신호 생성 프레임워크가 데이터 부족 문제를 완화하는 역할을 수행함으로써 피크 기반 1차원 계측 신호 분석의 신뢰성과 활용성을 동시에 높이는 상호 보완적인 구성 요소로 기능할 수 있음을 의미한다.

## V. 결론

본 논문에서는 피크 구조를 핵심 정보로 활용하는 1차원 계측 신호에 대해 잡음과 고품질 데이터 부족이라는 두 가지 구조적 문제를 동시에 완화하기 위한 통합적인 방법론을 제안하였다. 먼저, Ⅲ장에서는 피크 간 거리와 국소 신호 형태에 기반하여 SG 필터의 윈도우 길이를 영역별로 자동 조정하는 피크 인지형 적응적 잡음 제거 기법을 제시하였다. 잡음이 포함된 신호에서 피크를 자동 검출한 뒤 이를 경계로 신호를 여러 영역으로 분할하고 기준 신호와의 ED를 최소화하는 최적 윈도우 길이를 사전 분석으로 추정하여 피크 간 거리의 함수 형태로 회귀 모델로 학습하였다. 운용 단계에서는 각 영역의 피크 간 거리를 회귀 함수에 입력함으로써 사용자가 별도로 영역별 파라미터를 설계하지 않아도 데이터 기반으로 최적화된 윈도우 길이가 자동 산출되도록 하였다. 실험 결과, 제안 기법은 고정 윈도우 SG 필터 대비 ED 약 28% 감소, FID 약 48% 개선을 달성하여 피크 보존성과 잡음 제거 성능을 동시에 향상시킬 수 있음을 보였다. 이어서 Ⅳ장에서는 혼합 비율 변화에 따라 피크의 위치, 강도 및 베이스라인이 비선형적으로 변화하는 1차원 혼합 신호에 대해 극히 제한된 수의 실측 혼합 신호만으로 비선형 혼합 상호작용을 반영한 고품질 신호를 생성하기 위한 비선형 혼합 신호 생성 프레임워크를 제안하였다. 전처리 단계에서 서로 다른 조건에서 측정된 신호를 공통 스케일과 길이로 정규화한 뒤 데이터 증강 단계에서는 순수 성분의 선형 결합만을 사용하는 기본 전략(Strategy 1)과 여기에 실측 혼합 신호 기반 동적 보간을 추가로 결합한 확장 전략(Strategy 2)을 통해 조건-신호 쌍을 구성하였다. 생성 모델은 CVAE 기반 구조를 채택하여 혼합 비율 조건을 포함하는 조건 벡터와 잠재 변수를 입력으로 받아 해당 조건에서 관측될 법한 혼합 신호를 출력하도록 학습되며 재구성 손실, 정규화 항과 더불어 피크의 위치와 강도 차이를 직접 규제하는 피크 손실을 도입하였다. 실험 결과, 단순 선형 결합 기반 생성 방식 대비 MSE 약 69.2%, FID 약 84.6% 개선, PCC 약 0.999 수준의 높은 상관도를 달성함으로써 제안 프레임워크가 비선형 혼합 특성을 충실히 재현

하는 고품질 1차원 혼합 신호를 생성할 수 있음을 확인하였다. 잠재 공간 시각화 결과 역시 혼합 비율에 따른 잠재 벡터가 연속적이면서도 비선형적인 궤적을 형성하고 이 궤적이 실측 신호의 잠재 표현을 정확히 관통함을 보여주어 제안 모델이 혼합계의 비선형 매니폴드를 내재적으로 학습하고 있음을 뒷받침하였다. 제안한 피크 인지형 적응적 잡음 제거와 비선형 혼합 신호 생성 프레임워크는 각각 신호 품질 저하와 데이터 부족이라는 상이한 문제를 대상으로 하지만 피크 구조를 중심으로 한 도메인 지식을 명시적으로 활용한다는 공통점을 지닌다. 피크 인지형 적응적 잡음 제거는 피크 간 거리와 국소 형태를 기반으로 영역별 평활화 강도를 자동 조절함으로써 후속 분석 모델의 입력 신호 품질을 개선하고 비선형 혼합 신호 생성 프레임워크는 제한된 실측 데이터를 바탕으로 조건 공간 전역에 걸친 고충실도 가상 신호를 제공함으로써 학습 데이터 부족 문제를 완화한다. 결과적으로, 두 방법을 연계하면 잡음이 제거된 고품질 1차원 신호를 충분한 양으로 확보한 상태를 가정하지 않고도 실제 계측 환경에 가까운 조건에서 딥러닝 기반 분석 모델을 설계 및 평가할 수 있는 기반을 제공한다는 점에서 학술적, 실용적 의의가 있다.

향후 연구에서는 다음과 같은 방향으로 본 연구를 확장할 수 있다. 우선 혼합 신호 생성 프레임워크를 현재의 이성분 혼합계에서 다성분 혼합계로 확장하는 것이 필요하다. 혼합 비율 조건 벡터를 고차원으로 확장하고 다성분 혼합에서 발생하는 피크 중첩, 새로운 피크의 출현, 비선형 상호작용을 더 정교하게 모델링하기 위한 잠재 공간 구조 및 조건부 디코더 설계가 요구된다. 한편, 제안된 두 기법을 후속 분석 모델과 보다 밀접하게 연계하는 것도 중요한 과제이다. 피크 인지형 적응적 잡음 제거와 비선형 혼합 신호 생성을 통해 생성된 데이터셋을 기반으로 분류, 회귀 등 다양한 딥러닝 모델을 학습시키고 실제 현장 데이터에 대한 일반화 성능을 체계적으로 분석함으로써 제안 프레임워크가 다운스트림 태스크 수준에서 어느 정도의 이득을 제공하는지 정량적으로 평가할 수 있다. 마지막으로, 잡음 제거와 데이터 생성 단계를 하나의 통합 네트워크로 결합하거나, 물리화학적 제약식을 손실 함수 또는 정규화 항의 형태로 직접 도입하는 등, 도메인 지식과 데이터 기반 학습을 더 긴밀하게 융합하는 방향의 연구가 이루어진다면 피크 기반 1차원 계측 신호 분석의 신

뢰성과 활용 범위는 더욱 확대될 것으로 기대된다.

## 참 고 문 헌

### 1. 국외문헌

Han, R., Ketkaew, R., & Lubber, S. (2022). A concise review on recent developments of machine learning for the prediction of vibrational spectra. *The Journal of Physical Chemistry A*, 126(6), 801–812.

Lun, Z., Wu, X., Dong, J., & Wu, B. (2025). Deep learning-enhanced spectroscopic technologies for food quality assessment: Convergence and emerging frontiers. *Foods*, 14(13), 2350.

Westermayr, J., & Marquetand, P. (2025). Machine learning spectroscopy to advance computation and analysis. *Chemical Science*.

Yang, J., Xu, J., Zhang, X., Wu, C., Lin, T., & Ying, Y. (2019). Deep learning for vibrational spectral analysis: Recent progress and a practical guide. *Analytica Chimica Acta*, 1081, 6–17.

Zamanzadeh Darban, Z., Webb, G. I., Pan, S., et al. (2024). Deep learning for time series anomaly detection: A survey. *ACM Computing Surveys*, 57(1), 1–42.

Savitzky, A., & Golay, M. J. E. (1964). Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures. *Analytical Chemistry*, 36(8), 1627–1639.

Zhao, X. Y., Liu, G. Y., Sui, Y. T., Xu, M., & Tong, L. (2021). Denoising method for Raman spectra with low signal-to-noise ratio based on feature extraction. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 250, 119374.

Barton, S., Alakkari, S., O'Dwyer, K., Ward, T., & Hennelly, B. (2021). Convolution network with custom loss function for the denoising of low SNR Raman spectra. *Sensors*, 21(14), 4623.

Loc, I., Kecoglu, I., Unlu, M. B., & Parlatan, U. (2022). Raman signal denoising using fully convolutional encoder decoder network. *bioRxiv*.

Horgan, C. C., Jensen, M., Nagelkerke, A., St-Pierre, J.-P., Vercauteren, T., Stevens, M. M., & Bergholt, M. S. (2021). High-throughput molecular imaging via deep-learning-enabled Raman spectroscopy. *Analytical Chemistry*, 93(48), 15850–15860.

Matera, M., Polenta, L., & Napoli, C. (2025). Deep residual neural networks for robust denoising in Raman spectroscopy. *CEUR Workshop Proceedings*.

Gulyanon, S., Deepaisarn, S., Chokphantavee, S., Chokphantavee, S., Prathipasen, P., & Laitrakun, S. (2024). Denoising Raman spectra using autoencoder for improved analysis of contamination in HDD. *IEEE Access*.

Westermayr, J., & Marquetand, P. (2025). Machine learning spectroscopy to advance computation and analysis. *Chemical Science*.

Flanagan, A. R., Dalal, D., & Glavin, F. G. (2025). Exploring generative artificial intelligence and data augmentation techniques for spectroscopy analysis. *Chemical Reviews*, 125(13).

Lee, J., & Lee, W. (2024). Peak-aware adaptive denoising for Raman spectroscopy based on machine learning approach. *Journal of Raman Spectroscopy*, 55(4), 525–533.

Heusel, M., Ramsauer, H., Unterthiner, T., Nessler, B., & Hochreiter, S. (2017). GANs trained by a two time-scale update rule converge to a local Nash equilibrium. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 30.

Kingma, D. P., & Welling, M. (2013). Auto-encoding variational Bayes. *arXiv preprint arXiv:1312.6114*.

Sohn, K., Lee, H., & Yan, X. (2015). Learning structured output representation using deep conditional generative models. *Advances in*

Neural Information Processing Systems, 28.

Li, H., Jia, R., & Wan, X. (2022). Time series classification based on complex network. *Expert Systems with Applications*, 194, 116502.

Xie, L., Li, Z., Zhou, Y., He, Y., & Zhu, J. (2020). Computational diagnostic techniques for electrocardiogram signal analysis. *Sensors*, 20(21), 6318.

Talukder, M. A., Talaat, A. S., Muna, N. J., Alazab, A., Kazi, M., & Das, U. K. (2025). An explainable deep learning framework for trustworthy arrhythmia detection from ECG signals. *Scientific Reports*, 15(1), 39496.

Dogan, H., & Dogan, R. O. (2023). A comprehensive review of computer-based techniques for R-peaks/QRS complex detection in ECG signal. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 30(6), 3703–3721.

Blanco-Velasco, M., Weng, B., & Barner, K. E. (2008). ECG signal denoising and baseline wander correction based on the empirical mode decomposition. *Computers in Biology and Medicine*, 38(1), 1–13.

Lenis, G., Pilia, N., Loewe, A., et al. (2017). Comparison of baseline wander removal techniques considering the preservation of ST changes in the ischemic ECG: a simulation study. *Computational and Mathematical Methods in Medicine*, 2017(1), 9295029.

Chatterjee, S., Thakur, R. S., Yadav, R. N., et al. (2020). Review of noise removal techniques in ECG signals. *IET Signal Processing*, 14(9), 569–590.

Chen, S., Lin, X., Yuen, C., Padmanabhan, S., Beuerman, R. W., & Liu, Q. (2014). Recovery of Raman spectra with low signal-to-noise ratio using Wiener estimation. *Optics Express*, 22(10), 12102–12114.

Li, P., & Laleg-Kirati, T.-M. (2021). Signal denoising based on the Schrödinger operator's eigenspectrum and a curvature constraint. *IET*

Signal Processing, 15(3), 195–206.

Manifold, B., Thomas, E., Francis, A. T., Hill, A. H., & Fu, D. (2019). Denoising of stimulated Raman scattering microscopy images via deep learning. *Biomedical Optics Express*, 10(8), 3860–3874.

Bench, C., Bergholt, M. S., & al-Badri, M. A. (2023). Unsupervised denoising of Raman spectra with cycle-consistent generative adversarial networks. arXiv preprint arXiv:2307.00513.

Chakraborty, S., Kochhar, P., Patil, S., Kotecha, K., Gite, S., Selvachandran, G., & Das, S. (2025). Generative adversarial network augmented data for improved heart sound abnormality detection. *Computers in Biology and Medicine*, 195, 110623.

Kiyasseh, D., Tadesse, G. A., Nhan, L. N. T., Tan, L. V., Thwaites, L., & Zhu, T. (2020). PlethAugment: GAN-based PPG augmentation for medical diagnosis in low-resource settings. *IEEE Journal of Biomedical and Health Informatics*, 24(11), 3226–3235.

Wen, Q., Sun, L., Yang, F., Song, X., Gao, J., Wang, X., & Xu, H. (2020). Time series data augmentation for deep learning: A survey. arXiv preprint arXiv:2002.12478.

Zhao, J., Lui, H., Kalia, S., Lee, T. K., & Zeng, H. (2024). Improving skin cancer detection by Raman spectroscopy using convolutional neural networks and data augmentation. *Frontiers in Oncology*, 14, 1320220.

Kim, Y., & Lee, W. (2022). Distributed Raman spectrum data augmentation system using federated learning with deep generative models. *Sensors*, 22(24), 9900.

Yao, H., Luo, W., Gao, A., Zhou, T., & Wang, X. (2024). DiffRaman: A conditional latent denoising diffusion probabilistic model for bacterial Raman spectroscopy identification under limited data conditions. arXiv preprint arXiv:2412.08131.

Workman Jr., J. (2024). Beyond linearity: Identifying and managing

nonlinear effects in spectroscopic data. Spectroscopy.

Avhn. (n.d.). Peakdetect. GitHub. <https://github.com/avhn/peakdetect>

# ABSTRACT

## Artificial Intelligence Based Preprocessing and Data Augmentation Methods for Reliable One Dimensional Signal Analysis

Lee, Ju-Hyung

Major in Applied Artificial Intelligence

Dept. of Applied Artificial Intelligence

The Graduate School

Hansung University

One-dimensional (1D) signals are widely used as key information sources for determining material composition, reaction states, and the presence of anomalies across diverse application domains. However, in real-world acquisition environments, low signal-to-noise ratio (SNR) and constraints on measurement conditions often lead to severely contaminated signals and make it difficult to construct high-quality training datasets that fully cover the entire range of operating conditions. Although morphological peak features such as peak position, height, and width serve as central indicators for quantitative analysis, conventional denoising and data augmentation methods either fail to sufficiently preserve peak structures or do not adequately capture waveform characteristics that change nonlinearly with respect to condition variations and component interactions, thereby limiting the reliability and generalization performance of downstream deep learning-based analysis models. To address these limitations, this thesis proposes two methodologies that jointly aim to improve signal quality and alleviate data scarcity for peak-based 1D signals. First, a peak-aware adaptive denoising method that explicitly

accounts for peak structures is introduced. Starting from noisy 1D signals, the method automatically detects peaks and learns, in the form of a regression model, the optimal Savitzky–Golay (SG) filter window length for each segment based on inter-peak distances and the Euclidean Distance (ED) between noisy and reference signals, thereby overcoming the inherent limitation of conventional approaches that apply a single fixed window length to the entire signal. Experiments on Raman spectroscopy data show that the proposed method reduces ED by approximately 28% and improves the Fréchet Inception Distance (FID) by about 48% compared to a fixed-window SG filter, simultaneously enhancing peak-shape preservation and noise suppression. Second, this thesis proposes a nonlinear mixed-signal generation framework that can synthesize high-fidelity 1D mixture signals reflecting nonlinear mixing interactions even when only a very limited number of measured mixture signals are available. The core idea is to employ a Conditional Variational Autoencoder (CVAE) that takes a mixture-ratio condition vector as input and uses a small set of measured mixture signals acquired at different mixture ratios as anchors, performing dynamic interpolation around target mixture ratios so that the model can learn nonlinear mixing trajectories that cannot be captured by simple linear combinations of pure-component signals. In addition, a peak loss term is introduced to directly constrain discrepancies in peak positions and intensities, effectively suppressing local errors around narrow peaks that are not sufficiently penalized by Mean Squared Error (MSE) alone. In experiments on a binary Raman mixture system, the proposed framework reduces MSE by about 69.2% and FID by about 84.6% relative to a linear-combination baseline, while achieving a Pearson Correlation Coefficient (PCC) of approximately 0.999, indicating that the generated signals are almost indistinguishable from real measurements. Taken together, the peak-aware adaptive denoising method and nonlinear mixed-signal generation framework proposed in this thesis provide an integrated solution for simultaneously mitigating signal degradation and data scarcity by explicitly embedding peak-centric domain knowledge into model design.

**[Keywords]** Generative Artificial Intelligence, Signal Processing, Chemical Signal Analysis, Data Augmentation, Denoising