

해더마드 트랜스폼 스펙트로미터의 성능 증진 방법과 평가

박진배, 김현규*
연세대학교 전기공학과

Performance Enhancement and Evaluation in Hadamard Transform Spectrometers

Jin-Bae Park, Hyun-Kyu Kim*
Dept. of Electrical Engineering, Yonsei University

Abstract

When the noise is mainly caused by a detector and is statistically independent of the incident radiation, the multiplexing inherent in the Hadamard transform (HT) spectrometer can provide an improved spectrum-estimate. A spectrum-estimate can be further improved when any nonidealities in the system are compensated. In this research, three spectrum-estimation methods for an HT spectrometer having a nonideal mask are discussed in terms of computational efficiency, statistical bias, the sources of error, and the mean-square error associated with a given estimate. In addition, the results obtained from computer simulations are used to verify the theoretical foundation of each method.

1. 서론

분광측정의 목적은 주파수 스펙트럼을 정확하게 계산(estimate)하는 것인데 이를 달성하기 위해서는 측정잡음을 줄이거나 신호대 잡음비(SNR)를 높여야 한다. 만약 잡음이 주로 검파기(detector)에 의해 발생하고 검파기에 입사되는 빛의 크기와 무관하다면 해더마드 트랜스폼(HT) 스펙트로미터의 근본적인 특성인 multiplexing으로 인해 신호대 잡음비가 높아지므로 향상된 스펙트럼 계산을 얻을 수 있다[1].

종래에는 이동형 마스크(moving mask)가 HT 스펙트로미터에 사용되어 jamming과 misalignment 등의 기계적인 문제점을 야기했으나 최근에는 고정형 전자광학 마스크(stationary electro-optical mask)가 소개되어[2] 이러한 문제점은 해결되었다. 전자광학 마스크에서 각각의 셀은 빛을 차단하는 "off" 상태와 빛을 통과시키는 "on" 상태로 전기적인 스위칭이 가능하다. 마스크는 미리 정해진 패턴에 따라 빛을 통과시키는데 N개의 스펙트럼 성분을 위하여 N번의 측정이 필요하다. 이러한 측정값으로부터 각각의 스펙트럼 성분을 계산하기 위해서는 스펙트럼 회복방법이 필요하다. 그림 1은 스펙트로미터와 스펙트럼 회복을 보여주는 개요도이다.

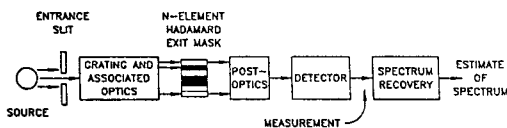


그림 1 해더마드 스펙트로미터의 개요도

전자광학 마스크는 기계적인 문제점을 해결했지만 마스크의 비이상적(nonideal) 투과율 특성때문에 다른 문제점을 야기한다.

이상적 마스크의 셀은 입사광의 파장에 관계없이 "on" 상태에서 100%의 투과율과 "off" 상태에서 0%의 투과율을 갖고 있

으나, 전자광학 마스크는 그림 2와 같이 파장에 따라 투과율이 변화하므로 바람직 하지 않다. 그러나 최근에 이러한 비이상적인 특성을 보상하는 방법이 개발되었다[3,4].

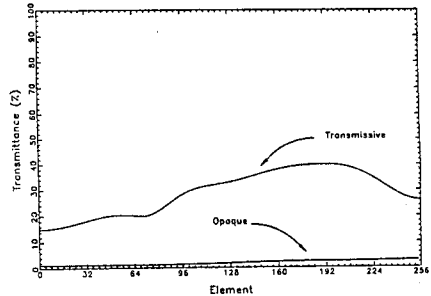


그림 2 전자광학 마스크의 투과율 특성

본 논문에서는 비이상적인 마스크를 장착한 HT 스펙트로미터에서의 스펙트럼 회복에 대한 3가지 방법을 논의하고, 각각의 방법을 계산상 효율, 통계적 편차(bias), 평균자승오차(MSE) 항목으로 분석하고, 또한 컴퓨터 시뮬레이션을 통하여 각각의 방법에 대한 이론적 기초를 뒷받침 하고자 한다.

2. 기본 시스템

본 논문에서 전개되는 스펙트럼 회복 기술은 다음과 같은 가정(assumption)하에 성립된다.

1. 측정값 η_i 에 연관된 오차 ϵ_i 는 랜덤변수(random variable)이고 검파기에 입사된 빛의 양에 무관하다.
2. 측정오차의 평균값은 영(zero)이다.
3. 각각 다른 측정에서의 오차는 상호관련이 없다.

또한 스펙트럼 회복 기술을 적용하기 위하여 스펙트럼 공간(coaddition)을 정의하자. 공간은 여러개의 랜덤변수를 평균하여 감소된 분산(variance)을 갖는 새로운 랜덤변수를 얻기 위한 기술이다. 평균값 μ_x 와 분산 σ_x^2 를 갖는 L개의 독립, 동일분포(independent, identically distributed) 랜덤변수 $x_i(i=1, \dots, L)$ 로부터 새로운 랜덤변수 y 를 공간산을 통해 얻을 수 있다. 이때 y 의 평균값은 $\mu_y = \mu_x$, 분산은 $\sigma_y^2 = \sigma_x^2/L$ 이다.

2.1 비이상적 마스크

비이상적 마스크의 투과율 특성을 N-정방행렬(N-square matrix) \tilde{W} 으로 표시하고 각각의 마스크 요소(element)의 투과율을 다음과 같이 \tilde{w}_{ij} 로 정의하자.

$$\tilde{w}_{ij} = \begin{cases} \tau_{oi}, & i\text{번째 측정에서 } j\text{번째 마스크 요소가 불투명 할때} \\ \tau_{oi}, & i\text{번째 측정에서 } j\text{번째 마스크 요소가 투명 할때} \end{cases}$$

그러면 \tilde{W} 는 다음과 같이 표현된다.

$$\tilde{W} = WT \quad (1)$$

여기서 W 의 요소는 "on"일 때는 1이고, "off"일 때는 0이며, 전달행렬 T 는 마스크의 특성에 따라 달라진다. 이상적인 마스크에서 T 는 identity matrix I 와 같고, 전자광학 마스크에서는 I 와 다른 값을 갖는다.

다음을 정의해 보자.

$$\begin{aligned} D &= \text{diag}(d_1, d_2, \dots, d_N) \\ &= \text{diag}(\tau_{o1} - \tau_{oi}, \tau_{o2} - \tau_{oi}, \dots, \tau_{oN} - \tau_{oi}) \\ 1 &= [1 \ 1 \ \dots \ 1]^T \\ \tau_o &= [\tau_{o1} \ \tau_{o2} \ \dots \ \tau_{oN}]^T \end{aligned}$$

식 (1)는 다음과 같이 표현된다.

$$\tilde{W} = WD + 1\tau_o^T = W [D + W^{-1} 1 \tau_o^T] \quad (2)$$

2.2 기본 시스템 모델

그림 3의 블록 다이어그램 (block diagram)은 HT 스펙트로미터의 기본동작을 보여준다. 실제 스펙트럼은 N -벡터 Ψ 로 표시되고, 마스크 인코딩(encoding)은 N -정방행렬 \tilde{W} 로 표시된다. 또한 측정벡터 η 는 검파기에서 측정된 강도(intensity)이며 N -벡터 e 로 표현되는 검파기 잡음을 포함하고있다. 이를 수식으로 표현하면 다음과 같다.

$$\eta = \tilde{W} \Psi + e \quad (3)$$

실제 스펙트럼 Ψ 에 대한 개산치 $\hat{\Psi}$ 는 다음과 같이 얻는다.

$$\hat{\Psi} = \tilde{W}^{-1} \eta \quad (4)$$

만약 $\hat{\Psi}$ 가 식 (4)에서 얻어진다면, 이는 Ψ 에 대한 최적 무편차 선형 개산치(optimal unbiased linear estimate)가 된다. 이때 개산치 $\hat{\Psi}$ 에 대한 average MSE는 다음식과 같다.

$$e = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E[(\hat{\Psi}_i - \Psi_i)^2] = \frac{\sigma^2}{N} \text{tr}((\tilde{W}^T \tilde{W})^{-1}) \quad (5)$$

여기서 $\text{tr}(\)$ 는 "trace"를, superscript T 는 "transpose"를 뜻한다.

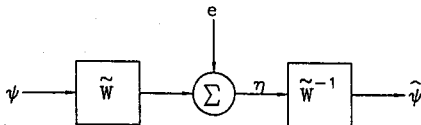


그림 3 HT 스펙트로미터의 기본 동작

3. 스펙트럼 회복방법

HT 스펙트로미터에서 최적 인코딩 마스크 설계는 다음 조건이 만족 될때 성립된다.

$$W = S \quad (6)$$

여기서 S 는 N -정방 심플렉스(simplex) 행렬[1]이다.

3.1 S^{-1} 방법

S^{-1} 방법은 가장 오래된 방법으로 주로 이동 마스크에 사용되어 왔다. 이상적 마스크($T=I$)에서는 식 (1), (3), (4), (6)으로부터 측정벡터 η 와 스펙트럼 개산치 $\hat{\Psi}$ 를 다음과 같이 얻을 수 있다.

$$\eta = S\Psi + e, \quad \hat{\Psi} = S^{-1}\eta$$

이러한 개산치는 fast Hadamard transform(FHT)[5]을 사용하여 계산할수 있는데, 보통방법을 사용하면 $N(N-1)$ 연산(주로 가감산)이 요구되나 FHT를 사용하면 단지 $(N+1)\log_2(N+1)$ 연산이 요구된다.

비이상적 마스크($T \neq I$)에 대한 스펙트럼 개산치는 다음과 같이 얻을 수 있다(그림 4 참조).

$$\hat{\Psi} = S^{-1} [ST\Psi + e] = T\Psi + S^{-1}e \quad (7)$$

$E[\hat{\Psi}] = T\Psi \neq \Psi$ 이므로 이러한 개산치는 편차를 갖고 있다. 만약 L 번의 스펙트럼 공가산이 사용되면 average MSE는 다음과 같다.

$$\begin{aligned} e(L) &= \frac{4N\sigma^2}{L(N+1)^2} + \frac{1}{N} \text{tr}((T-I)\Psi\Psi^T(T-I)^T) \\ &= \frac{4N\sigma^2}{L(N+1)^2} + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N ((d_i-1)\psi_i + \frac{2}{N+1} \sum_{i=1}^N \tau_{oi}\psi_i)^2 \end{aligned} \quad (8)$$

식 (8)의 두번째 항은 systematic error로 스펙트럼과 마스크에 따라 변한다.

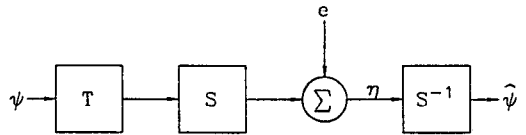


그림 4 S^{-1} 방법을 사용한 HT 스펙트로미터

3.2 D^{-1} 방법

그림 5는 D^{-1} 방법에 대한 블록 다이어그램이다. 그림 5와 식 (2)를 참조하여 다음과 같이 스펙트럼 개산치를 얻을 수 있다.

$$\begin{aligned} \hat{\Psi} &= D^{-1}S^{-1}\eta' \\ &= D^{-1}S^{-1}(\eta - b) \\ &= D^{-1}S^{-1}(SD\Psi + e) \\ &= \Psi + D^{-1}S^{-1}e \end{aligned} \quad (9)$$

여기서 η' 은 변형된 측정 벡터이고 b 는 각 성분이 다음과 같이 정의된 상수 벡터이다.

$$b_i = b = \sum_{j=1}^N \tau_{oj}\Psi_j \quad (10)$$

$E[\hat{\Psi}] = \Psi$ 이므로 식 (9)로 얻어지는 개산치는 편차가 없다.

여기서 b 는 상수벡터이므로 식 (10)을 이용하여 수학적으로 구할 수 있고, 실제적으로는 모든 마스크 셀을 "off"하고 측정하여 b 의 개산치를 얻을 수 있다. 만약 이와 같이 N_0 번 측정을 하고 평균값을 계산하면 b 에 대한 average MSE는 다음과 같다.

$$e_b = \frac{\sigma^2}{N_0} \quad (11)$$

D^{-1} 방법을 사용하여 $\hat{\Psi}$ 를 계산하는데 필요한 전체 연산수는 약 $N(\log_2 N + 2)$ 이므로 S^{-1} 방법에 비해 단지 $2N$ 연산이 추가된다. 만약 L 번의 스펙트럼 공간산이 사용되면 average MSE는 다음과 같다.

$$e(L) = \frac{4\sigma^2}{(N+1)^2} \left[1 + \frac{1}{N_0} \right] \sum_{i=1}^N \frac{1}{d_i^2} \quad (12)$$

이 D^{-1} 방법에는 본질적으로 systematic error가 없다. 즉, average MSE는 샘플의 스펙트럼과 무관하다. 이러한 스펙트럼 계산은 N 이 커지면 최적(optimal)하게 되고, L 과 N_0 가 모두 큰 값이 되면 average MSE는 영(zero)에 수렴한다.

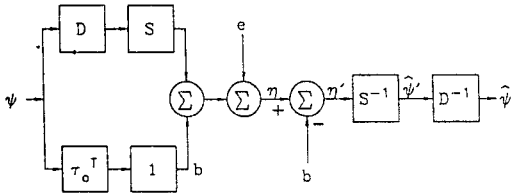


그림 5 D^{-1} 방법을 사용한 스펙트로미터

3.3 T^{-1} 방법

T^{-1} 방법을 사용하면 최적 무편차 선형 스펙트럼 계산치를 추가 측정없이 효과적으로 구할 수 있다. 그림 6은 이러한 방법을 나타내는 블록 다이어그램이다. 그림 6에 나타난 T 와 T^{-1} 를[6] 다음과 같이 적을 수 있다.

$$T = D + \frac{2}{N+1} 1 \tau_0^T \quad (13)$$

$$T^{-1} = D^{-1} + qD 1 \tau_0^T D^{-1}$$

$$q = \frac{2}{(N+1) + 2 \sum_{i=1}^N \frac{\tau_{0i}}{d_i}}$$

큰 N 값에 대하여 q 는 영(zero)으로 수렴하므로 다음과 같이 적을 수 있다.

$$T^{-1} \approx D^{-1} \quad (14)$$

스펙트럼 계산치는 다음과 같이 얻을 수 있다.

$$\begin{aligned} \hat{\Psi} &= T^{-1} S^{-1} \eta \\ &= T^{-1} S^{-1} (ST\Psi + e) \\ &= \Psi + T^{-1} S^{-1} e \end{aligned} \quad (15)$$

$E[\hat{\Psi}] = \Psi$ 이므로 이러한 스펙트럼 계산치는 편차가 없다.

이러한 스펙트럼 회복 방법으로 스펙트럼 계산치를 구하는 데에는 약 $N(\log_2 N + 4)$ 의 연산이 필요하다[4]. 즉 D^{-1} 방법보다는 $2N$, S^{-1} 방법보다는 $4N$ 의 연산이 더 필요하다. 그러나 T^{-1} 방법은 추가 측정이 필요없다는 점에서 D^{-1} 방법보다 우수하고, 마스크의 비이상적인 특성을 보상할수 있다는 점에서 systematic error를 야기하는 S^{-1} 방법보다 우수하다. 큰 값의 N 과 L 번의 스펙트럼 공간산을 사용할때 average MSE는 다음과 같이 얻을 수 있다[7].

$$e(L) = \frac{4\sigma^2}{L(N+1)^2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{d_i^2}$$

이러한 T^{-1} 방법은 systematic error를 야기하지 않는다.

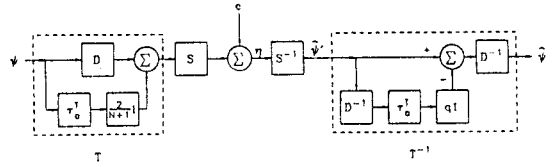


그림 6 T^{-1} 방법을 사용한 스펙트로미터

4. 컴퓨터 시뮬레이션

그림 7은 측정샘플의 입력 스펙트럼(input spectrum) Ψ 를 보여준다. 4개의 피크(peak)중 중앙에 있는 Lorentzian band 형태의 doublet는 높이가 0.8이고, 왼쪽과 오른쪽에 있는 singlet는 높이가 각각 1.0과 0.8이다. 시뮬레이션에 사용된 전자광학 마스크는 그림 2의 부가울 특성과 $N=255$ 개의 마스크셀을 갖고 있다. 또한 검파기 잡음 e 의 평균은 영(zero)이고 잡음분산은(variance)은 0.1 이었다.

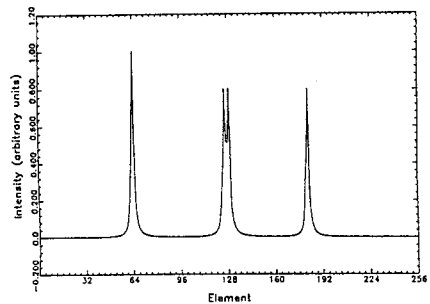


그림 7 입력 스펙트럼

그림 8은 이상적인 monochromator에 의하여 얻은 출력 스펙트럼으로 잡음이 매우 심하고 여러개의 피크가 나타나서 그림 7의 입력 스펙트럼과는 차이가 심하다. 그림 9-그림 12는 전자광학 마스크를 장착한 HT 스펙트로미터 시스템에 3장에서 언급한 스펙트럼 회복 방법을 적용하여 얻은 결과를 보여 주고, 표 1은 각각의 스펙트럼 회복방법에 대한 average MSE를 보여주고 있다.

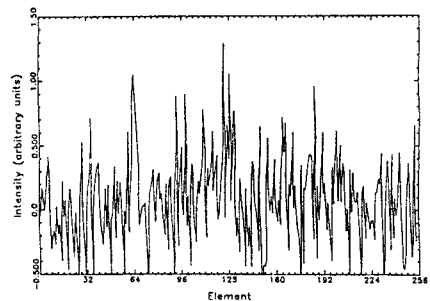


그림 8 monochromator의 출력 스펙트럼

그림 9는 S^{-1} 방법을 사용하여 얻은 출력 스펙트럼으로 그림 7의 입력 스펙트럼에 비하여 피크가 훨씬 작고, 상대적인 높이가 매우 달라졌다. 한 예로 오른쪽 singlet가 중앙의 doublet보다 더 커졌다. 그림 9와 그림 2를 비교하여 볼 때, 마스크의 투명("on")과 불투명("off")상태의 부가울 차이가 가장 큰 부분에 위치한 오른쪽 singlet가 가장 스펙트럼 회복이 잘 되었다.

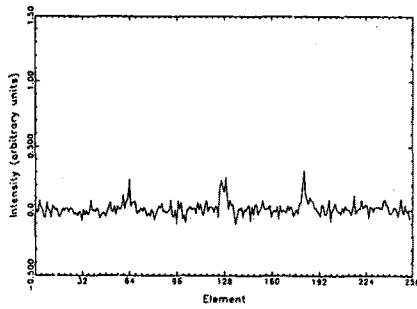


그림 9 S^{-1} 방법으로 얻은 출력 스펙트럼

그림 10은 D^{-1} 방법 또는 T^{-1} 방법을 통하여 얻은 출력 스펙트럼을 보여준다. 큰 $N=255$ 값에 대하여 D^{-1} 방법과 T^{-1} 방법이 거의 동일한 결과를 가지므로 단지 하나의 그림만 사용했다. 잡음의 영향이 크게 감소되고 입력 스펙트럼의 피크가 비교적 정확하게 회복되었다.

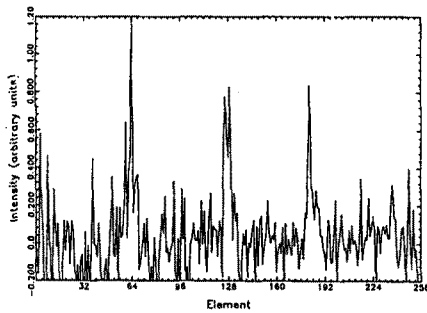


그림 10 T^{-1} 방법으로 얻은 출력 스펙트럼

그림 11은 S^{-1} 방법과 100번의 스펙트럼 공가산을 통하여 얻은 출력 스펙트럼을 보여준다. 잡음이 거의 영에 가까워졌으나 아직도 실제 입력 스펙트럼의 피크값 상대적인 크기와의 차이가 크다. 이런 원인은 표 1에 나타난 바와 같이 systematic error가 스펙트럼 공가산에 관계없이 상수를 유지하기 때문이다.

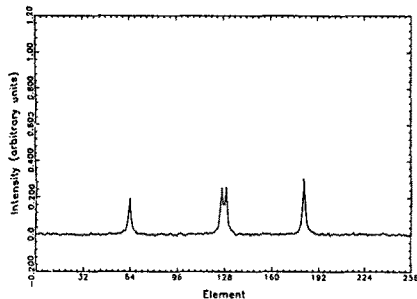


그림 11 S^{-1} 방법과 스펙트럼 공가산($L=100$)으로 얻은 출력 스펙트럼

그림 12는 T^{-1} 방법과 100번의 스펙트럼 공가산을 통하여 얻은 출력 스펙트럼을 보여준다. 실제 스펙트럼을 매우 정확하게 회복했을뿐 아니라 잡음도 현저하게 감소되었다.

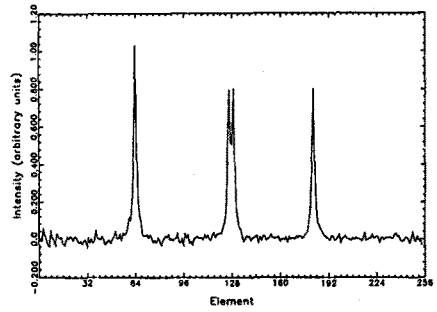


그림 12 T^{-1} 방법과 스펙트럼 공가산($L=100$)으로 얻은 출력 스펙트럼

표 1 스펙트럼 회복방법의 average MSE 비교. 겹따기 잡음은 분산 $\sigma^2 = 0.1$ 의 랜덤변수

Number of Coadditions	Average Mean-Square Error				
	S^{-1} Method			D^{-1} Method	T^{-1} Method
	Stochastic	Systematic	Total		
$L = 1$	0.001556	0.009924	0.011480	0.034615 ($N_0 = 5$)	0.028845
$L = 5$	0.000311	0.009924	0.010235	0.011538 ($N_0 = 5$)	0.005769
$L = 25$	0.000062	0.009924	0.009986	0.002308 ($N_0 = 25$)	0.001154
$L = 100$	0.000016	0.009924	0.009940	0.000577 ($N_0 = 100$)	0.000288

5. 결론

S^{-1} 방법은 가장 오래된 방법이지만 전자광학 마스크의 비이상적인 투과율 특성을 보상하지 못하므로 systematic error를 야기한다. 그러나 D^{-1} 방법과 T^{-1} 방법은 S^{-1} 방법보다 약간 더 많은 계산이 요구되나 마스크의 비이상적 특성을 보상하여 무편차 선형 개산치를 제공한다. 특별히 T^{-1} 방법은 최적무편차 선형개산치를 제공하므로 계산상의 효율, 통계적 편차, 정확성을 고려해 볼때 가장 바람직하다.

참고문헌

- [1] M. Harwit and M.J.A. Sloane, *Hadamard Transform Optics*, Academic Press, New York, pp. 59-107.
- [2] D.C. Tilotta, R.M. Hammaker, and W.G. Fateley, "A visible New-Infrared Hadamard Transform Spectrometer Based on a Liquid Crystal Light Modulator Array", *Appl. Spectroscopy*, vol. 41, pp. 727-734, 1987.
- [3] S.A. Dyer, B.K. Harms, J.B. Park, T.W. Johnson, and R.A. Dyer, "A Fast Spectrum-Recovery Method for Hadamard Transform Spectrometers Having Nonideal Masks", *Appl. Spectroscopy*, vol. 43, pp. 435-440, 1989.
- [4] T.W. Johnson, J.B. Park, S.A. Dyer, B.K. Harms, and R.A. Dyer, "An Efficient Method for Recovering the Optimal unbiased Linear Spectrometers Having Nonideal Masks", *Appl. Spectroscopy*, vol. 43, pp. 746-750, 1989.
- [5] E.D. Nelson and M.L. Fredman, "Hadamard Spectroscopy", *J. Opt. Soc. Amer.*, vol. 60, pp. 1664-1669, 1970.
- [6] G.H. Golub and C.F. Van Loan, *Matrix computations*, Baltimore, Johns Hopkins Univ., p. 3, 1983.
- [7] J.B. Park, et. al., "On the Mean-Square Error of Various Spectrum-Recovery techniques in Hadamard Transform spectrometry", *Appl. Spectroscopy*, vol. 44, pp. 219-228, 1990.