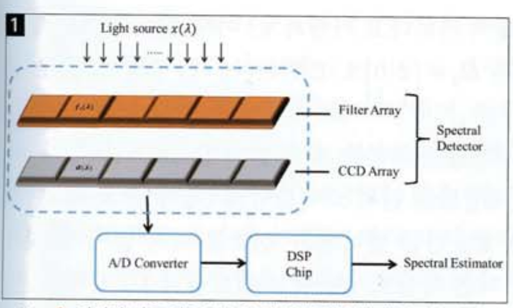
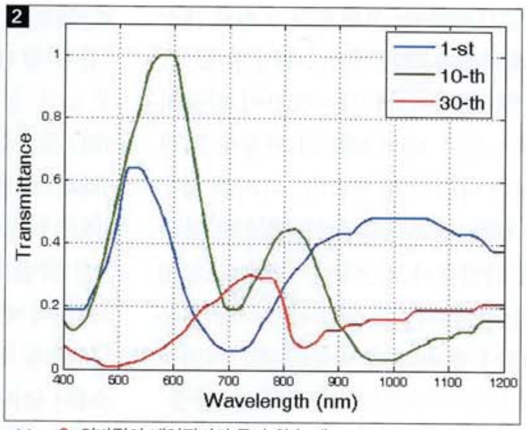
소형 분광계, 해상도의 한계를 뛰어넘다

분광계란 파장에 따른 빛의 세기를 측정할 수 있는 기구로, 현대 다양한 산업분야 전반에 걸쳐서 널리 사용되고 있다. 분광계는 현대 마이크로 전자기계 시스템(MEMS), 상보성 금속 산화반도체(CMOS), 미세 광학 전자 시스템, 광학 집적 기술 등의 발전으로 인해서 소형화가 가속되었는데, 소형 분광계의 등장은 광학, 화학, 해양공학 등 여러 산업분야의 발전에 큰 힘을 실어주고 있다. 예를 들어, 소형 분광계를 이용하여 광학분야에는 램프의 특성을 측정하고, 화학분야에서는 화학물질을 분석하고, 해양 공학에서는 기름 유출 검출 등의 일들을 수행할 수 있다. 근래 들어 이러한 소형 분광계의 해상도 한계를 뛰어넘기 위한 노력이 다양한 각도에서 이루어지고 있다.

분광계는 작동 원리에 의해 크게 그레이팅 기반, 푸리에 변환 기반, 필터 기반으로 나누어진다. 필자의 연구팀은 그 중에서도 주로 필터 기반의 소형 분광계에서 필터



▸▸ 1. 디지털 신호 처리 기술을 이용한 1차원의 배열필터 기반의 소형 분광계 시스템 구성도



▸▸ 2. 일반적인 배열필터의 투과 함수 예

의 개수에 의해 정해진 해상도의 한계를 뛰어넘을 수 있는 디지털 신호 처리 기술에 대해 다루고 있다.

휴대 가능한 배열필터 기반의 소형 분광계

배열필터란 필터를 배열해서 한 곳에 집약하여 생산하는 구조를 말한다. CMOS 혹은 나노공정기술을 이용하여 생산된 배열필터는 분광계의 해상도 증가 및 소형화를 가능하게 하고, 대량생산을 통해 생산가격을 크게 절감시키는 효과를 가져다준다. 이러한 공정으로 생산된 소형 분광계는 휴대가 가능해서 실험실 안팎, 특히 산업현장에서 물체의 스펙트럼을 측정하는데 큰 도움이 된다. 또한 컴퓨터 또는 다른 전자기기와도 쉽게 접목하여 함께 사용이 가능하다는 이점이 있다. 이밖에도 배열필터 기반의 분광계는 광원의 스펙트럼 정보를 단시간에 측정할 수 있다는 장점이 있다. 배열필터 기반의 소형 분광계의 이러한 특성은 생물학, 생화학, 생체의학 등 다양한 분야에 적용될 수 있다.

배열필터 기반의 소형 분광계는 크게 배열필터, 전하결합소자(CCD) 배열 및 디지털 신호 처리부로 구성되어 있다(그림 1 참조). 가장 위쪽에 위치하고 있는 배열필터는 서로 다른 투과 함수를 갖는 고정된 필터들의 집합으로 구성된다. 필터의 투과함수란 필터가 통과시키는 빛의 양을 파장과의 함수관계로 나타낸 것이다. 배열필터 바로 아래에는 CCD 배열이 위치하고 있는데, 각 필터는 각 CCD 센서 또는 CCD 센서군에 대응하게 된다. CCD 센서는 필터를 통과한 광 신호를 전하 신호로 변환시키는 역할을 한다. 배열필터 기반의 분광계에서 배열필터와 CCD 배열을 합쳐서 스펙트럼 검출부로 구성하게 된다. 스펙트럼 검출부의 출력 신호는 샘플링을 거쳐 디지털 신호 처리부에 보내지고, 디지털 신호 처리부는 물체의 스펙트럼 정보를 추정하게 된다.

필터 개수가 해상도 결정

분광계의 성능을 평가하는 요인 중 하나인 해상도는 물체의 인접한 두 파장 성분을 검출하는 정도를 나타내는데, 배열필터 기반의 분광계가 현실적으로 도달 가능한 해상도 한계는 필터의 개수에 의해 결정된다. 즉, 필터의 개수를 늘리면, 해상도를 증가시킬 수 있다. 고정된 개수의 필터를 갖는 소형 분광계의 해상도가 필터의 개수에 의해 결정되는 해상도 한계까지 도달하기 위해서는 배열필터의 투과 함수가 이상적이어야 한다고 알려져 있다.

이상적인 투과 함수란 통과 대역 내에서 투과율이 일정하고, 통과 대역 이외의 파장에서는 모든 빛을 저지하는 투과 함수를 말한다. 하지만 저비용으로 이상적인 투과 함수를 갖는 소형의 필

글_이웅비 광주과학기술원 정보통신학과 박사과정
wblee@gist.ac.kr
글쓴이는 건국대학교 정보통신공학부 졸업 후 광주과학기술원에서 석사학위를 받았으며, 현재 동대학원에서 박사학위 과정 중에 있다.

글_이흥노 광주과학기술원 정보통신학과 교수
heungno@gist.ac.kr
글쓴이는 UCLA 졸업 후 동대학원에서 석사·박사학위(전자공학)를 받았다. 미국 HRL 연구소 연구원, 피츠버그대학교 전자컴퓨터공학과 조교수 등을 지냈다.

터를 구현하기는 매우 어렵기 때문에, 실제 필터는 전체 파장 대역에 걸쳐 선택적인 투과 함수를 갖게 된다(그림 2 참조).

그러므로 필터들의 통과 대역이 겹치는 현상이 발생하게 되고, 각 필터는 원하는 통과 대역 이외의 파장도 통과시키게 되어서 간섭에 의한 왜곡이 발생한다. 이러한 왜곡의 정도가 심하게 발생하여 인접한 두 파장 성분을 구분할 수 없게 되면, 분광계의 해상도가 감소되는 결과를 낳게 된다. 비이상적인 필터를 사용하는 소형 분광계 시스템을 수학적 접근 방법을 통해서 물체의 해상도를 증가시키는 방법에 대해 알아보자.

수학적으로 접근, 해상도 증가 방법 찾아

광 신호가 분광계의 배열필터와 CCD 배열을 통과해서 샘플링되는 일련의 과정들을 선형 방정식계로 나타내면 수학적으로 쉽게 접근이 가능하게 된다. 샘플링을 수행한 후, 측정하려는 물체의 실제 스펙트럼을 열벡터 $\boldsymbol{x}=[x_1\ x_2 \cdots x_N]^T$, M개의 필터의 투과 함수를 모아서 행렬 $D=\begin{bmatrix} D_{11} & \cdots & D_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ D_{M1} & \cdots & D_{MN} \end{bmatrix}$, 스펙트럼 검출부의 출력을 열벡터 $\boldsymbol{y}=[y_1\ y_2 \cdots y_M]^T$로 모델링하였을 때, 전체 소형 분광계의 시스템은 선형 방정식 y=D$\boldsymbol{x}$로 표현된다. 여기서 M은 필터의 개수, N은 전체 파장 대역을 N등분으로 균등 샘플링하여 얻은 샘플 수를 나타낸다. 디지털 신호 처리부는 배열필터의 투과 함수(D)를 알고 있을 때, 스펙트럼 검출부에서 관찰된 $\boldsymbol{y}$로부터 물체의 실제 스펙트럼 $\boldsymbol{x}$를 복원하는 일을 수행한다. 즉, M개의 연립 방정식을 풀어서 N개의 미지수를 갖는 $\boldsymbol{x}$를 찾아내는 문제를 수행한다.

이제, 수학적 표현을 통해 측정하려는 물체의 해상도를 증가시키는 방법을 간단한 예를 들어보자. 먼저 두개의 필터가 단위 스펙트럼을 네 개의 파장 구간으로 나눠서 빛을 투과한다고 가정하자. 이때, 배열필터의 투과 함수는 각각 (1, 1, 0, 0), (0, 1, 0, 1)이라고 하자. 이를 행렬로 나타내면, $\boldsymbol{D}_1=\begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$이 된다. 이때의 최대 해상도는 단위 스펙트럼의 1/4이 되고, 이는 최대 단위 스펙트럼의 1/4 만큼 떨어진 두 신호를 잘 구분해 낼 수 있다는 것이다. 이에 반하여, 이제, 동일한 배열필터가 두개의 파장 구간으로만 나눠서 빛을 투과한다고 가정하자. 이때에는, 필터의 투과 함수 행렬은 $\boldsymbol{D}_2=\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$로 표현된다. 즉, 행렬 D1으로 부터 두 1/4 구간을 통과하는 빛의 양의 합으로 나타난다. 이때의 최대 해상도는 단위 스펙트럼의 1/2이 된다. 즉, 단위 스펙트럼의 1/2 만큼 떨어진 두 신호를 왜곡 없이 잘 찾아낼 수 있게 되면 해상도가 단위 스펙트럼의 1/2이 된다. 앞의 1/4 예와 비교해, 최대 해상도가 반으로 감소했음을 유의하며, 이제 이렇게 2개의 필터로 구성된 배열필터 환경에서 스펙트럼을 복구하는 성능을 비교함으로써 해상도의 향상이 가능한지 알아보자.

먼저 해상도가 1/2일 때 측정하는 물체의 스펙트럼 값들이 $\boldsymbol{x}=(1.5,0.5)^T$이라고 하자. 이 스펙트럼 값이 투과함수 행렬 $\boldsymbol{D}_2=\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$을 통과해서 얻은 스펙트럼 검출부의 출력은 $\boldsymbol{y}=(3,2)^T$이 된다. 디지털 신호 처리부에서는 $\boldsymbol{y}=(3,2)^T$의 정보를 가지고 미지수가 2개인 원래의 스펙트럼 정보를 복원하게 되는데, 이를 선형 방정식으로 나타내면 아래와 같다.

$$\begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

위의 식은 2개의 연립방정식으로 2개의 미지수를 구하는 문제로, 연립방정식을 풀면 쉽게 x_1=1.5, x_2=0.5를 구할 수 있다. 하지만, 해상도를 증가시키기 위해서는 두 개의 인접한 스펙트럼 사이의 거리를 감소시켜야 하는데, 이로 인해서 선형 방정식에 더 많은 미지수 성분이 존재하게 된다. 위의 예에서 보인바 같이, 최대 해상도를 2배 증가시키게 되면 2개의 연립방정식에, 4개의 미지수가 존재하는 문제가 된다. 이때의 물체의 스펙트럼이 x_1=1, x_2=2, x_3=0, x_4=0이라고 했을 때, $\boldsymbol{D}_1=\begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$을 투과 함수로 갖는 스펙트럼 검출부의 출력 $V_{\boldsymbol{y}}$는 y_1=3, y_2=2가 된다. 디지털 신호 처리부에서 D1과 $V_{\boldsymbol{y}}$로부터 미지수 x_1~x_4의 값을 복구하는 과정을 행렬식으로 나타내면 아래와 같다.

$$\begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix}$$

이 경우는 필터의 개수보다 복구하고자 하는 신호의 샘플 수가 더 많다. 다시 말해서 미지수의 개수가 연립방정식의 수보다 많은 경우(M⟨N)를 나타내며, 이러한 식을 불충분 선형 방정식이라고 한다. 불충분 선형 방정식을 만족하는 해는 무수히 많이 존재하는데, 많은 해 중에서 고유한 하나의 해를 찾아낼 수 있는 여러 가지 방법들이 있다. 그 중에 1795년에 가우스에 의해 개발된 최소 제곱법이 일반적으로 널리 알려져 있는데, 최소 제곱법은 근사적으로 구하려는 해($\tilde{\boldsymbol{x}}$)와 실제 해($\boldsymbol{x}$)의 오차의 제곱의 합($\| D_1(\boldsymbol{x}-\tilde{\boldsymbol{x}}) \|_2^2$)이 최소가 되는 해를 구하는 방법이다. 최소 제곱법을 불충분한 선형 방정식에 적용하면 해는 간단히 $\tilde{\boldsymbol{x}} = D_1^T(D_1 D_1^T)^{-1}\boldsymbol{y}$으로 나타낼 수 있는 데, 이를 이용해서 위의 불충분 선형 방정식을 풀어보면, $x_1 = \frac{4}{3}$, $x_2 = \frac{5}{3}$, $x_3 = 0$, $x_4 = \frac{1}{3}$ 을 얻을 수 있다. 이는 실제 물체의 스펙트럼 값과는 매우 상이한 값임을 알 수 있다. 이는 최소 제곱법을 이용해서 해상도 한계를 증가시키기 어렵다는 것을 보여주는 하나의 예이다.

위의 예제가 보여주는 것을 요약하면, 보다 정확한 필터의 투과함수를 이용하여 선형방정식을 세우면, 즉 행렬 D1을 사용하면, 최대 해상도를 높일 수 있다. 그러나 일반적으로 알려진 최소 제곱법을 사용하여 D1 선형방정식을 풀면, 복구성능이 좋지 않아서 최종적인 해상도 향상을 얻을 수 없다.

왜 이런 결과가 빚어졌을까? 좋은 방법이 없을까? 이러한 질문은 스펙트럼에 관한 사전정보를 이용하는 연구방향으로 나아가게 하였다.

이제 불충분 선형 방정식의 고유한 해를 풀기 위해서 신호 $\boldsymbol{x}$가 희소한 신호라고 가정을 해보자. 희소하다는 것은 $\boldsymbol{x}$의 많은 수의 성분들이 0의 값을 갖고, 상대적으로 적은 수의 성분들이 0이 아닌 값을 갖는다는 것을 말한다. 이때, 불충분한 선형 방정식의 희소한 해를 찾는데 적합하다고 알려진 $\mathcal{L}_1$ 최소화 방법을 사용할 수 있다. $\mathcal{L}_1$ 최소화 방법은 를 만족하는 $\boldsymbol{x}$ 중에서 0의 값을 갖지 않는 성분들의 합이 최소인 $\boldsymbol{x}$를 구하는 방법 중 하나이다. 위의 예제에 $\mathcal{L}_1$ 최소화 방법을 사용하여 얻은 불충분 선형 방정식의 해는 x_1 =1, x_2=2, x_3=0, x_4=0 이 되고, 이 결과는 곧 고유의 해와 동일하게 된다. 이렇게 $\mathcal{L}_1$ 최소화 방법이 불충분 선형 방정식의 고유한 해를 찾을 수 있었던 것은, 신호가 희소하다는 가정을 하였기 때문이다.

디지털신호 처리 알고리듬 개발, 해상도 크게 높여

모든 자연 발생 신호는 어떤 특정한 영역에서 희소 신호로 표현될 수 있다. 희소 신호란 벡터로 표현하면 적은 수의 0이 아닌 성분들과 나머지 상대적으로 많은 수의 0 성분들로 이루어진 신호를 말한다. 예를 들면 시간영역에서 두 개의 서로 다른 주파수 성분을 갖고 있는 정현파는 주파수 영역에서 두 개의 주파수 성분만 0이 아닌 값을 갖게 되고, 나머지 주파수 성분들은 0이 된다. 이렇게 모든 자연 신호가 희소하게 표현될 수 있다는 성질을 전제로, 소형 분광계 시스템에서 측정하려는 물체의 스펙트럼은 자체로 희소한 신호일 수 있고 또는 어떤 특정한 영역에서 희소하게 표현될 수도 있다.

광주과학기술원 인포넷 연구팀은 물체의 스펙트럼 정보가 희소하게 표현될 수 있다는 성질을 이용하여 $\mathcal{L}_1$ 최소화 방법을 사용하는 디지털 신호 처리 알고리듬을 개발하였다. 이 알고리듬은 비이상적인 투과함수를 갖는 배열필터의 성질을 적극 이용하여 왜곡된 스펙트럼으로부터 광 신호 본래의 스펙트럼을 복구하는 동시에 실제로 얻을 수 있는 해상도가 필터의 개수에 의해 정해진 해상도 한계보다 몇 배 증가시킬 수 있다는 것을 보였다.

필자의 연구팀이 개발한 디지털 신호 처리 기술은 기존의 배열필터 기반의 소형 분광계에 새로운 하드웨어의 추가 또는 신소재의 개발 없이 기존의 분광계에 저렴한 소형 소프트웨어를 간단히 추가하여 기존의 분광계 해상도를 크게 높일 수 있기 때문에 매우 매력적이다. 또한, 고가의 이상적인 투과 함수를 갖는 배열필터를 생산하지 않고, 저가로 생산이 가능한 전체 파장 대역에 선택적인 투과함수를 갖는 배열필터로도 더 높은 해상도를 얻을 수가 있다. 따라서 새롭게 개발된 방법은 저비용으로 기존의 소형 분광계에 쉽게 적용되어서 초정밀 측정이 가능한 다양한 연구 및 산업분야에 응용될 수 있을 것으로 기대된다. ST