

DWT를 이용한 형광 X-선 스펙트럼의 Interval Threshold를 적용하기 위한 블록화 알고리즘

양상훈¹, 이재환¹, 박동선^{2*}

¹전북대학교 전자공학과, ²전북대학교 IT 융합연구센터

X-ray fluorescence spectrum of the block algorithm to apply the Interval threshold method using DWT.

Sanghoon Yang¹, Jaehwan Lee¹ and Dong Sun Park^{2*}

¹Department of Electronics Engineering, Chonbuk National University

²IT Convergence Research Center, Chonbuk National University

요 약 X-선 스펙트럼 데이터는 물질의 성분과 관련이 없는 신호(백그라운드, 노이즈)들을 포함 하고 있다. XRF는 스펙트럼에서 가우시안 형태의 피크 위치와 크기를 이용하여 시료의 성분을 분석하며, 시료의 성분을 정확히 분석하기 위해서는 노이즈와 백그라운드를 제거 하여야 한다. 백그라운드를 제거하기 위한 방법으로는 SNIP, Threshold, Morphology 방법 등을 적용하고 있으며, Threshold 기법을 중에서 블록별로 각기 다른 임계값을 적용하는 Interval Threshold 기법이 하나의 임계값을 적용하는 Level Threshold 방법보다 더 좋은 성능을 발휘한다. 본 논문에서는 Interval Threshold를 적용하기 위하여 웨이블릿을 이용하여 블록을 분리하는 알고리즘을 제안하였다.

Abstract X-ray fluorescence spectrum signal include the continuum. XRF analysis the components of material by the amplitude of peaks. XRF remove the noise and background. To remove the noise, we apply the smoothing filter. And background removal methods applied such as SNIP, Morphology, Threshold methods. In this paper, we applied Threshold using DWT. Interval threshold method divide the some blocks in particular levels. We propose the method that is divided the particular level.

Key Words : Spectroscopy, DWT, Threshold, Background Removal

1. 서론

유럽연합에서 시행되는 RoHS는 해로운 물질을 사용한 전자 제품이나 전자기기의 생산 및 유통을 제한하는 지침으로서 2003년 2월에 WEEE(Waste Electrical and Electronic Equipment)에 의해 제정 공포되었고 2006년 7월 1일에 발효되었다.[1]

RoHS(Restriction of the use of Hazardous Substances in EEE)는 6대 물질(Cd, Pb, Hg, PBB, PBDE, Cr 6+)에 대하여 규제하며 유럽, 중국, 미국 등 세계적으로 시행 되

고 있다. 그 규제 대상은 대소형 가전제품부터 IT 및 통신 장비, 조명기구, 의료 장비에 이르기까지 점차적으로 확대 되고 있다.

이러한 RoHS규제는 유해 중금속 함유 정도를 규제하는 것으로 물질의 정성·정량 분석을 통하여 이뤄지며, 원자 흡광도 분석(AAS)이나 발광분광분석(ICP-AES) 등을 이용한다.[2] 하지만 이러한 방법들은 분석 시료를 만들기 위해서 제품을 파괴하여야 하며, 분석시간이 많이 소요될 뿐만 아니라 분석자의 숙련도에 따라서 분석의 정확도가 달라질 수 있는 단점이 있다.[3]

본 논문은 2007년도 전북대학교 국외연구교수 연구비 지원에 의하여 연구되었으며, 교육과학기술부와 한국연구재단의 지역 혁신인력양성사업으로 수행된 연구결과임.

*Corresponding Author : Dong Sun Park

Tel: +82-63-270-2465 email: ykahoony@jbnu.ac.kr

접수일 12년 04월 02일

수정일 12년 05월 02일

게재확정일 12년 05월 10일

반면에 XRF는 기존의 방법과 달리 시료의 조제가 용이하고, 비 파괴적으로 검사가 가능하며, 분석 시간이 짧다. 뿐만 아니라 분석자의 숙련도가 분석의 정확도에 영향을 미치지 않는 장점을 가지고 있다.

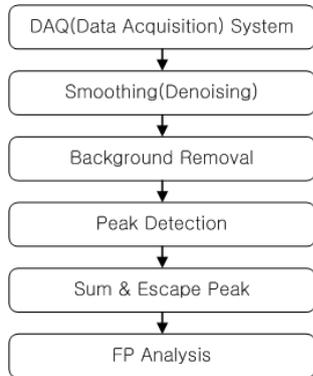
이러한 XRF 스펙트럼 신호는 그림 1의 순서를 따라서 성분을 분석 하며 DAQ 시스템을 통하여 획득된다.[4] 이러한 신호는 성분 분석에 필요한 피크 신호뿐만 아니라 노이즈나 백그라운드 같은 Continuum이 포함되며, 각각의 채널별로 크기가 다르게 반영된다.

백그라운드를 제거하기 위한 알고리즘으로는 각 채널의 가우시안 곡선에서 반치 폭 크기만큼 좌우 평균을 비교하여 반복적으로 추정하는 SNIP 알고리즘[5], 스펙트럼에서 피크 부분을 제거하는 모폴로지 방법[6], 피크영역과 피크가 없는 영역을 분리하는 피크분리 방법[7], 웨이블릿을 이용하여 시간과 주파수 영역으로 분석하여 임계값을 적용하는 Threshold 방법[8] 등이 있다.

본 논문에서는 웨이블릿을 이용하여 Threshold를 적용하는 방법 중에서, 특정 레벨에서 블록을 나누어 각기 다른 임계값을 적용하는 Interval Threshold를 적용하기 위한 블록을 나누는 알고리즘을 제안하였다.

2. 형광 X-선 스펙트럼의 특징

형광 X-선 스펙트럼은 그림1과 같은 단계로 성분을 분석한다.



[그림 1] XRF 처리 순서
[Fig. 1] XRF processing steps.

스펙트럼 데이터는 DAQ 시스템에서 1차 X-ray 에 의하여 발생하는 2차 형광 X-선이 실리콘 Detector를 통하여 검출하게 된다. 형광 X-선은 지수 함수 형태로 입력되며, 사다리꼴 필터의 최대값의 검출 횟수를 누적하여 스

펙트럼 데이터를 얻을 수 있다.

Smoothing은 고주파 성분으로 구성된 스펙트럼 데이터의 잡음은 채널의 위치와 피크의 크기에 따라 각기 다른 푸아송 분포를 갖는다. 잡음은 주변 값들의 평균을 이용하여 고주파 성분을 제거하여 완만하게 변화하는 데이터를 얻을 수 있다.

백그라운드는 실제 원소의 형광 에너지를 제외한 Continuum 부분을 의미하며, 원래 피크에 크기가 더해져 성분 분석에 영향을 준다. 검출기의 종류와 필터의 따라서 백그라운드의 다르게 검출되지만, 피크와 달리 이웃한 채널에서는 서로 유사한 크기를 가지며, 이러한 특성을 이용하여 백그라운드를 제거할 수 있다.

스펙트럼 데이터는 형광 X-선의 에너지의 분포이며, 원소의 포함도를 분석하기 위해서는 피크의 위치가 중요한 변수가 된다. 피크의 위치는 가우시안 곡선의 반치 폭에 해당하는 피크들만을 남기는 탐헛 필터 등을 적용하여 스펙트럼의 피크를 찾을 수 있다.

Escape 피크는 검출기 자체의 특성으로 필터의 종류에 따라 전체 스펙트럼 채널 중에서 특정 채널에서만 발생되며, 검출기에서 미리 정해진 변수이므로 제거 가능하다. Sum 피크는 다른 원소의 스펙트럼이 같은 에너지 대역에서 발생되어 중첩되는 현상으로써, 각 원소의 주 에너지 채널들을 이용하여 비율적으로 제거된다.

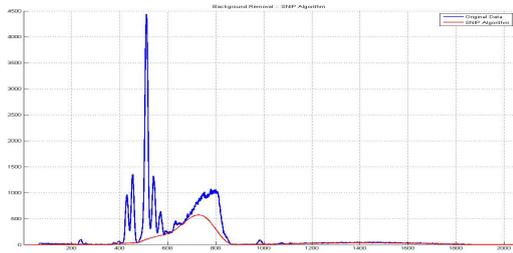
DAQ 시스템에서 획득한 스펙트럼 데이터를 각 단계별로 Continuum을 제거하여 피크를 찾을 수 있다. 이러한 피크들을 기반으로 하여 채널별 강도를 분석하여 스펙트럼의 원소별 정량정성 분석한다.

3. 기존의 백그라운드 분석 및 제거방법

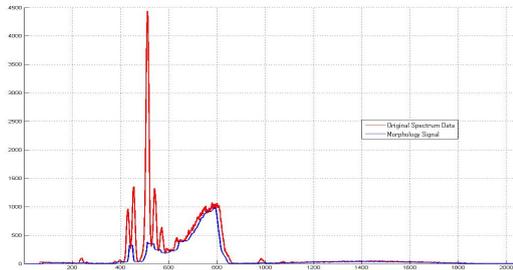
스펙트럼 데이터에서 원소의 에너지는 해당 채널에서 가우시안 형태로 이뤄져 있고, 백그라운드는 여러 채널에 넓게 분포되어 있다. 이러한 백그라운드를 제거하기 위한 알고리즘으로는 모폴로지, SNIP, 웨이블릿 등이 있다.

3.1 Morphology 알고리즘

모폴로지 연산은 침식과 팽창의 기본 연산의 조합으로 객체에서 뾰족하게 나온 부분을 깎는 열림 연산과 객체에서 움푹 패인 곳을 채워주는 닫힘 연산을 수행한다. 스펙트럼에서 백그라운드를 추정하기 위해 열림 연산만을 수행하여 추정함으로써 연산 속도가 빠르지만, 피크가 중첩되어 있는 채널에서는 각 피크의 최소값보다 큰 값을 잘라내어 왜곡을 발생시키는 문제점이 있다. 그림 3은 모폴로지를 이용하여 추정된 백그라운드이다.



[그림 2] SINP 알고리즘 결과
[Fig. 2] Result of SINP Algorithm



[그림 3] 모폴로지 알고리즘 결과
[Fig. 3] Result of Morphology Algorithm

3.2 SNIP 알고리즘

SNIP 알고리즘은 가우시안 곡선에서 반치 폭 만큼 좌우 값의 평균과 비교한 후 평균값이 더 작은 경우 해당 값을 백그라운드로 지정하는 작업을 반복적으로 적용하여 백그라운드를 추정하는 방법이다.

하지만, SNIP 알고리즘은 시스템의 정확도를 높이기 위해서는 기본단위 연산의 반복 횟수, 윈도우 크기 등과 같은 변수들을 예비 실험을 통해서 미리 관찰하여 설정해야 되는 단점이 있다. 그림 2는 SNIP 알고리즘을 이용하여 추정한 백그라운드 성분이다.

3.3 Wavelet

SNIP 알고리즘의 문제점을 해결하기 위해서 웨이블릿을 이용하여 백그라운드를 제거하는 방법이 제안되었다.

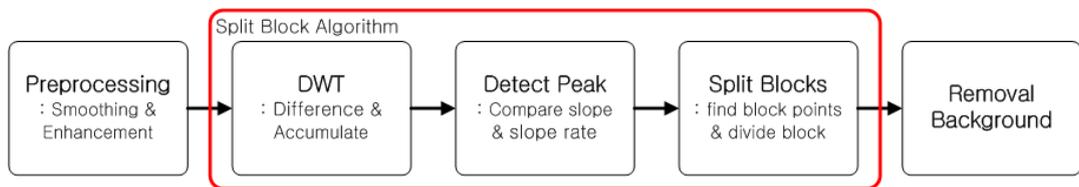
웨이블릿은 백그라운드뿐만 아니라 노이즈의 제거, 피크의 위치를 검출하는데 사용되어 진다.[9] Pan Du 등은 피크의 위치를 검출하는데 CWT(continuous wavelet transform)를 백그라운드와 노이즈를 제거하기 위해서 DWT(discrete wavelet transform)를 사용하였다.[8] 웨이블릿 변환은 시간과 주파수 정보를 모두 포함하는 변환 계수의 특성으로 신호 및 영상처리 분야뿐만 아니라 Spectroscopy 분야에서도 Continuum 제거에 관련된 연구에 많이 적용 되고 있다. 웨이블릿을 이용한 잡음 제거는 신호와 잡음과의 관계를 두 가지로 가정 하였다.

1. 잡음의 세기는 신호의 세기보다 작다.
2. 잡음은 대부분 고주파 성분으로 구성되어 있다.

즉 신호의 대부분 저주파 성분으로 구성되어 있다. 웨이블릿 기반 잡음 제거 기법들은 신호와 잡음을 구별하기 위해 웨이블릿의 다중해상도 분석 특성을 이용한다. 고주파 성분 값들 중에서 잡음 성분을 구별하는 임계값(Threshold)을 정의한다. 임계값을 이용하여 스펙트럼을 분석 할 경우 실제 잡음의 양을 추정하기 어렵고, 잡음 분산의 크기가 같은 경우 다른 신호에 대해서도 동일하게 적용하는 문제가 제기 되었다.[11,12] 이러한 문제를 해결하고자 임계값을 정의하는 방법에 대한 연구가 많이 진행되었으며, 웨이블릿의 각각의 레벨에서 임계값을 적용하는 Level threshold와 각 레벨 별로 블록을 나눈 뒤 각 블록별로 임계값을 정하는 interval threshold를 사용한다.[11]

4. 레벨 블록화 알고리즘

웨이블릿을 이용한 Threshold 기법은 임계값의 연산 방식에 따라 Hard Threshold와 Soft Threshold 방법[9]과 적용 방법으로 Level, Interval Threshold가 있다. Gang Li 등은 백그라운드를 제거하기 위해서 Interval Threshold 방법이 매우 효과적임을 증명하였다.[12]



[그림 4] 제안하는 방법의 처리 순서
[Fig. 4] Processing step of propose method

기존의 방법들은 스펙트럼의 블록을 나눌 때, 반복 실험 결과를 이용하여 직관적이고 임의적으로 블록을 나눠 적용하였다. 이는 라만 스펙트럼에서 피크가 발생하는 파장을 미리 알고 있기 때문에 직관적으로 블록을 나누는 것이 가능하였으나, XRF는 물질의 구성 성분에 따라서 피크의 위치와 크기가 다르게 형성되기 때문에 직관적 혹은 실험적으로 블록을 나누기 어렵다.

본 논문에서는 Interval Threshold를 적용하기 위해 특정 레벨에서 블록을 나누는 알고리즘을 제안하며, 그림 4는 DWT를 이용하여 블록별로 임계값을 적용하여 백그라운드를 제거하기 위한 블록화 알고리즘 순서이다.

4.1 Preprocessing

잡음은 고주파 성분으로 구성되어 있으며, Moving average, Savitzky-Golay smoothing filter 등을 이용하여 잡음을 제거하였다. 본 논문에서는 전처리 과정에서 스펙트럼의 잡음을 줄이고(smoothing) 피크로 추정 되는 위치의 신호를 확장(enhancement) 하여 백그라운드와 피크 영역 구분을 용이하게 하였다.

4.2 DWT : Difference & Accumulate

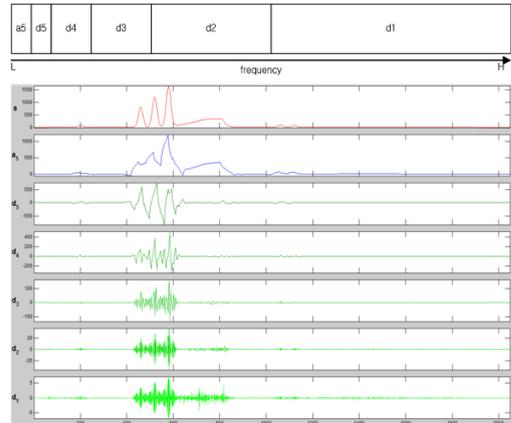
DWT는 스펙트럼 데이터를 저역통과 필터와 고역통과 필터를 차례로 통과 시켜 시간과 주파수 특성을 분석한다.[10] 스펙트럼의 특성을 비교하면, 피크와 백그라운드는 저주파 대역의 신호를 많이 포함하며, 잡음은 고주파 대역 신호로 구성되어진다.

따라서 DWT의 저역 통과 필터의 분석을 통해서 신호와 잡음을 분리 할 수 있다. 하지만, 유사한 주파수 특성을 가진 피크와 백그라운드 성분은 저역통과 필터만으로는 분리 할 수 없다.

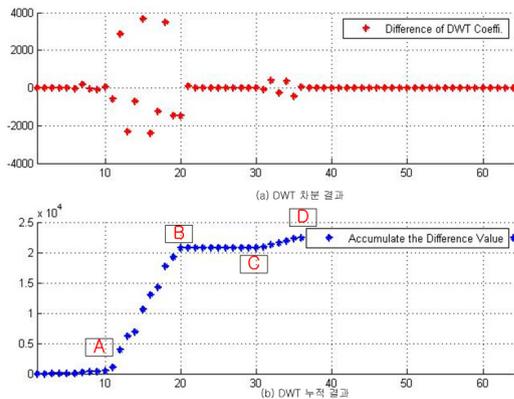
하지만, 백그라운드는 피크와는 달리 이웃한 주변과 유사한 형태로 그 변화가 완만하다. 이러한 특징은 차분을 이용하면 피크영역과 백그라운드의 영역의 구분이 가능하다. 본 논문에서는 피크와 백그라운드를 분리하기 위한 블록 포인트를 찾기 위해서 DWT 계수의 차분을 이용하였다. 그림 5는 DWT를 이용하여 스펙트럼을 분석한 결과이다.

그림 6은 DWT 계수의 차분 결과와 누적 결과이다. (a)의 차분 결과 백그라운드 영역은 기준선을 기준으로 변화 폭이 작으며 피크 영역은 변화 폭이 매우 큰 것을 알 수 있다. (b)는 차분 결과의 누적이며 A와 C는 피크가 시작하는 부분에서 기울기가 급격하게 변화하게 되고, B와 D의 위치는 피크가 끝나는 부분으로 기울기의 변화가 매우 작다.

본 논문에서는 2048 채널의 스펙트럼에서 기울기 정보를 가장 잘 알 수 있도록 DWT를 이용하여 5 Level 까지 분해하였고, 차분과 누적을 이용하여 블록 포인트를 찾을 수 있었다.



[그림 5] DWT를 이용한 스펙트럼 분석
[Fig. 5] Frequency bands divided by DWT



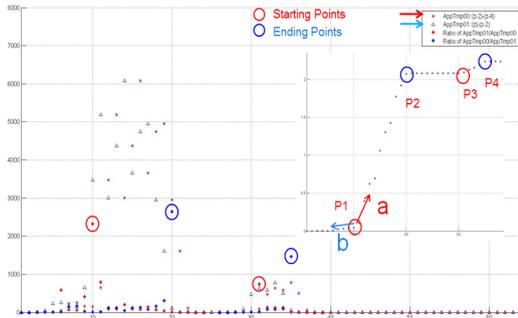
[그림 6] DWT 차분 값과 차분의 누적 값 비교.
[Fig. 6] Compare the difference vs accumulate value.

4.3 Detecting Block-points

앞 절에서는 블록 포인트를 찾기 위해서 DWT계수의 차분 결과를 누적하였다. 이렇게 누적된 데이터는 그림 6에서 보듯이 마치 계단 모양을 이루고 있다. (a)의 결과에서 피크가 시작되는 A를 기준으로 기울기가 급격히 증가하며, 피크가 끝나는 영역인 B에서는 기울기가 급격하게 감소하는 것을 알 수 있었다.

이러한 특징을 이용하여 피크 영역의 시작 부분은 그림 7의 P1, P3처럼 기울기 a의 크기가 특정 임계값 이상으로 커지며, 반대로 피크가 끝나는 지점 P2, P4에서 기

울기 a 는 특정 임계값 이하로 작아진다. 기울기 정보를 이용하여 블록 포인트를 추정 할 수 있지만, 기울기 정보만을 사용하여 블록을 나눌 경우 문제가 발생한다. 누적 값들의 각 지점에서의 기울기를 비교하면, P1과 P2 사이에서는 기울기 a 는 매우 크고, 피크 시작부분을 정의하기 위한 특정 임계값 보다 큰 기울기를 유지하여 정확한 블록 포인트를 찾기 어렵다.



[그림 7] 피크 시작점과 끝점 검출
[Fig. 7] Detect the start and end points.

그림 7에서 P1과 P2의 사이의 각 지점의 기울기를 비교하면, 특정 임계값보다 큰 것을 알 수 있다. 이러한 문제를 해결하기 위해서 기울기간의 비율(a/b : 시작점, b/a : 끝점)를 적용하였다.

각 검색 위치에서의 기울기 비율을 이용하여 현재 위치에서의 좌우 기울기의 비율을 이용하면 시작점과 끝점을 추정 할 수 있다. 하지만, 기울기의 비율을 만족하는 위치는 피크가 시작되고, 끝나는 블록 포인트 부근에서 여러 위치에서 발생할 수 있다.

이러한 위치 중에서 정확한 블록 포인트를 찾기 위해서는 피크의 시작점에서는 아래 조건을 만족하는 최초 시작점을, 피크가 끝나는 지점에서는 조건을 만족하는 마지막 포인트를 기준으로 블록 포인트를 추정하였다.

현재 포인트에서 오른쪽의 기울기를 'a', 왼쪽을 'b'로 가정하였을 경우 다음 식과 같이 피크의 시작점과 끝점을 찾을 수 있다. 이렇게 추정된 지점을 이용하여 블록을 나눌 수 있으며, 각 블록 별로 임계값을 적용하는 Interval threshold를 적용할 수 있다.

- Start points : $a/b > \text{threshold}$
- End points : $b/a > \text{threshold}$

4.4 Split Block : divide block.

기울기와 기울기의 비율을 이용하여 모든 피크의 시작

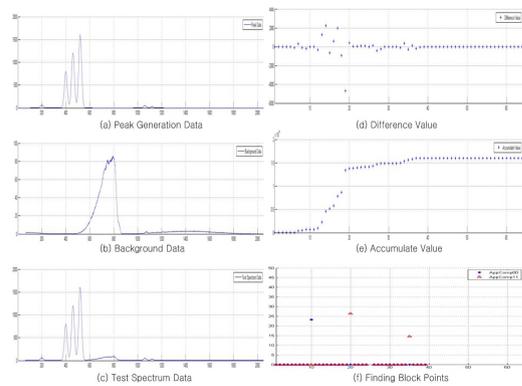
점과 끝점을 찾을 수 있다. 하지만 모든 위치를 이용할 경우 블록이 많아져 블록이 너무 세분화 되어 임계값을 적용하는 시스템의 복잡도가 높아지게 된다.

제안하는 알고리즘의 복잡도를 낮추기 위해서 앞에서 구해진 위치 중에서 피크의 첫 번째 시작점과 각 끝점만을 이용하여 블록을 나누도록 하였다. 이는 생성되는 구간의 개수를 $2n+1$ 에서 $n+2$ 로 낮춰 임계값의 연산과 적용 횟수를 줄였다.

5. Simulation Result

스펙트럼 신호는 SSD(Silicon Drift Detector)를 통해서 135eV의 분해능을 가지는 iEDX-200AT를 이용하여 스펙트럼의 백그라운드 데이터를 획득하였다. 본 논문에서 제안하는 블록화 알고리즘은 MatLab7.10을 이용하여 검증하였다.

스펙트럼 신호는 표준 시편 'PE_Blank'를 이용하여 백그라운드 신호를 생성하였고, 피크 정보는 가우시안 피크를 이용하여 50 sample의 스펙트럼 데이터를 생성하였다.



[그림 8] 테스트 스펙트럼 데이터와 블록 포인트.
[Fig. 8] Test Spectrum data & finding block points.

그림 8의 (a)는 가우시안을 피크를 생성한 피크 신호이고, (b)는 ISP사의 iEDX-200AT를 통해서 표준시편 'PE_Blank'를 측정하여 획득한 백그라운드 신호이며 (c)는 생성한 피크와 측정된 백그라운드로 만든 실험 데이터이다. (d)는 실험 데이터를 DWT 분석을 통해서 얻어진 계수의 차분 값이고, (e)는 (d)의 차분을 누적한 결과이고, (f)는 앞에서 제안한 방법을 적용하여 블록 포인트를 찾은 결과이다.

6. 결론

Threshold의 적용 방법에 따라 Level threshold와 Interval threshold로 구분된다. DWT의 분석을 통한 특정 레벨에서 블록별로 임계값을 다르게 적용하는 것이 레벨 전체에 하나의 임계값을 적용하는 것보다 백그라운드를 더 잘 추정하는 것을 알 수 있었다. 이러한 Interval threshold를 적용하기 위해서 기존의 알고리즘에서는 스펙트럼을 미리 분석하여 블록을 실험적이고 직관적으로 블록 포인트를 결정하였다.

본 논문에서는 블록 포인트를 찾기 위해서 스펙트럼을 미리 분석하여 실험적으로 블록을 나누는 것이 아니라 입력된 스펙트럼을 분석하여 신호와 잡음의 주파수 특성을 이용하여 잡음을 제거하고, 이웃한 주변의 값과 유사한 특징을 가지는 백그라운드는 차분을 통하여 각 위치에서의 기울기를 이용하여 피크영역과 백그라운드 영역을 구분하였고, 기울기 정보와 기울기의 비율을 이용하여 블록 포인트를 찾는 방법을 제안하였다.

References

- [1] Directive 2002/95/EG: Restriction of the Use of Certain Hazardous Substances in Electrical and Electronic Equipment(RoHS).
- [2] F. L. Melquiades and C. R. Appoloni, "Application of XRF and field portable XRF for environmental analysis", J.Radioanal Nucl. Chem., 262, pp.533-541, 2004.
- [3] Xiandeng Hou, Bradley T Jones, "Field instrumentation in atomic spectroscopy", Microchemical Journal, 66, pp115-145, 2000.
- [4] JET-EP2 - Project Plan: "Gamma-ray spectrometry-GRS", JET internal document, 2006
- [5] Miroslav Morhac, Vladislav Matousek, "Peak Clipping Algorithms for Background Estimation on Spectroscopic Data", Applied Spectroscopy. Vol. 62, pp.91-106, 2008.
- [6] M. Kowalczyk, et al. "Application of mathematical morphology operations for simplification and improvement of correlation of images in close-range photogrammetry," pp153-158, 2008.
- [7] Miroslav Morhac, "An algorithm for determination of peak regions and baseline elimination in spectroscopic data", Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, 600, pp.478-487, 2009.
- [8] Pan Du, Haihui Wang, "Application of Wavelet Transform to the MS-based Proteomics Data Preprocessing",

Proceedings of the 7th IEEE International Conference on Bioinformatics and Bioengineering 2007, pp. 680-686, Nov, 2007.

- [9] David L. Donoho, "De-Noising by Soft-Thresholding", IEEE Transactions on Information Theory, Vol. 41, No. 3, May, pp.613 - 627. 1995.
- [10] Bjorn K. Alsberg, Andrew M. Woodward, Douglas B. Kell, "An introduction to wavelet transforms for chemometricians: A time - frequency approach", Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 37 pp. 215-239, 1997.
- [11] P.M. Ramos, I. Ruisachez "Noise and Background Removal in Raman Spectra of Ancient Pigments using Wavelet Transform". Journal of Raman Spectroscopy, Vol.36. No. 9, pp.848-856, 2005.
- [12] Gang Li, "Noise Removal of Raman Spectra using Interval Thresholding Method", 2nd International Symposium on Intelligent Information Technology Application, pp. 535-539, Dec, 2008.

양 상 훈(Sanghoon Yang)

[정회원]



- 2005년 8월 : 전북대학교 전자정보 공학부(전자전공) 학사
- 2007년 8월 : 전북대학교 대학원 정보통신 공학 석사
- 2007년 8월 ~ 현재 : 전북대학교 전자정보공학부 전자전공 박사과정

<관심분야>
정보통신, 멀티미디어, 신호분석

이 재 환(Jaehwan Lee)

[준회원]



- 2012년 2월 : 전북대학교 전자정보 공학부 전자전공(학사)
- 2012년 3월 ~ 현재 : 전북대학교 전자정보공학부 전자전공 석사과정

<관심분야>
임베디드, 신호분석

박 동 선(Dong Sun Park)

[정회원]



- 1979년 2월 : 고려대학교 전자공학과 학사 졸업
- 1984년 12월 : 미국 미주리대 전기 및 컴퓨터 공학 석사 졸업
- 1990년 12월 : 미국 미주리대 전기 및 컴퓨터 공학 박사 졸업
- 2012년 ~ 현재 : 전북대학교 교수, IT융합센터장

<관심분야>

인공지능, 컴퓨터 네트워크