

## 주제 소개

머신러닝을 활용한 LWIR 스펙트럼 ARC 특성 최적화 및 파라미터 최적화

## 연구 배경

LWIR는 "Long-Wave Infrared"의 약어로, 장파 길이의 적외선 영역을 나타냅니다.

일반적으로 8 마이크로미터에서 14 마이크로미터의 파장을 포함하며, 이 영역은 열에 의해 방출되는 복사 에너지를 감지하는 데 사용됩니다.

LWIR 카메라 및 광학 시스템은 열 이미징 및 열 분석에 적합하며, 야간 및 낮 시간에도 사용할 수 있는 열 환경 감지 장치에 널리 사용됩니다.

해당 영상은 가시광선 영역에서의 카메라, 적외선 영역에서 근적외선 NIR, 단파장 SWIR, 장파장 LWIR 영역의 카메라 영상을 비교한 것입니다.

다른 적외선 영역 카메라보다 LWIR 카메라가 열 감지의 성능이 확연히 뛰어남을 볼 수 있습니다.

이를 활용하여 LWIR 카메라는 공장 및 산업 환경에서 열 문제를 감지하고 모니터링하는 데 사용되며, 의료 분야에서 체온 측정, 열 화상 검사, 및 기타 의료 응용에서 사용됩니다.

AR코팅은 수업시간에도 배웠듯이 Anti-reflective coating, 광학 물질의 표면에서의 반사를 최소화하는 코팅입니다.

카메라에 AR 코팅을 적용하면 광학 표면에서의 반사가 감소하므로 이미지 품질이 향상됩니다.

반사로 인해 발생하는 광학 왜곡이나 유의미한 신호 손실을 방지하고 높은 감도의 이미지를 얻을 수 있습니다.

## ARC 원리

ARC의 원리는 코팅과 렌즈 두 매질 간의 굴절률을 조절하여 반사를 최소화하는 것입니다.

또 코팅과 공기층의 표면에서 반사된 빛과, 코팅과 렌즈의 표면에서 반사된 빛의 파장을 서로 역위상이 되게 하여 상쇄 간섭을 유도하여 반사를 최소화합니다.

이를 위해 코팅 재료의 굴절률과 두께가 AR 코팅에서 주요한 역할을 합니다.

## 연구 목표

저희의 연구 목표는

1. LWIR 영역에서 AR 코팅 구조에서의 광학 소재의 굴절률과 코팅 두께가 주어졌을 때, 머신러닝 알고리즘을 사용하여 투과율을 예측
2. 학습된 모델을 활용하여 최대 투과율을 얻기 위해, 코팅 매질의 굴절률과 두께 역설계

## ML Model 소개

연구에 대해 말씀드리기에 앞서, 저희가 사용한 머신러닝 모델들에 대해 간략히 설명하려 합니다.

첫 번째로, Linear model입니다.

가장 간단하고 기본적인 회귀 알고리즘으로 종속 변수와 한 개 이상의 독립 변수간의 관계를 모델링하는데 사용되는 기법입니다.

이때 입력 변수와 출력 변수의 선형관계를 파악하며 적은 계산으로 빠르게 학습이 가능합니다.

Linear Regression의 한 변형인 Ridge Regression 모델도 사용하였는데, 이는 Linear Regression의 Overfitting을 방지하기 위한 정규화 기법 중 하나입니다.

여기서 Overfitting이란 머신러닝 모델이 학습데이터에 너무 맞춰져 새로운 데이터에 대한 일반화 성능이 낮아지는 현상을 말하는데, 선형회귀 모델에 규제를 추가하여 이러한 성능저하가 일어나는 것을 저지해 주는 역할을 합니다.

다음은 Decision Tree model입니다.

이 그림과 같이 노드와 이를 연결하는 엣지로 이루어진 계층적 구조를 tree 구조라 합니다.

이 model은 비선형 관계를 모델링할 수 있는 알고리즘 중 하나로, 결정트리를 사용하여 연속적인 종속변수를 예측하는 기법으로서 데이터를 기반으로 의사결정 트리를 구축하여 예측합니다.

Decision Tree model에서 중요한 하이퍼파라미터, 즉 변수들은 트리의 깊이,

최소 리프 샘플 수(리프 노드가 가져야 할 최소한의 샘플 수를 지정합니다. 이 값보다 적은 수의 샘플이 있는 리프 노드는 분할되지 않습니다.) 등이 있습니다.

저희는 이 모델의 최적화를 위해 이 두 파라미터의 값을 조정하였습니다.

저희는 Decision Tree를 응용한 랜덤 포레스트 모델도 사용하였는데, 이는 여러 개의 트리를 앙상블하여 최종 예측을 만듭니다.

이는 분산을 줄이고 일반화 성능을 향상시키는 효과를 가져올 수 있습니다.

랜덤 포레스트에서의 주요 파라미터는 앞서 Decision Tree model들의 파라미터들과 트리의 개수 등이 있는데, 저희는 최적화를 위해 트리의 개수 값을 조정하였습니다.

마지막으로 Neural Network model입니다.

생물학적 뉴런의 작동 원리를 모방하여 구성된 계층적인 모델로, 입력 데이터를 학습하고 예측하기 위해 가중치와 활성화 함수를 사용합니다.

뉴럴 네트워크 모델에서 주요 파라미터는 히든레이어 수와 각 히든 레이어의 뉴런 수,

각 학습 반복에서 사용되는 샘플의 수인 배치 사이즈,

전체 데이터셋에 대해 몇 번 반복하여 학습할지를 결정하는 에포크 등이 있습니다.

저희는 두 개의 히든 레이어를 사용하였고, 각각 64개, 32개의 뉴런을 가지고 있습니다.

또 이 모델을 최적화하기 위해 배치 사이즈와 에포크의 값을 조정하였습니다.

## 연구 프로세스 소개

저희의 전체 연구 프로세스는 다음과 같습니다.

먼저 cst studio를 통해 ARC 구조를 모델링하고, 파라미터 스윙을 통해 시뮬레이션을 진행하여 투과율에 대한 데이터를 얻었습니다.

다음으로는 저희가 사용할 모델에 적합한 형태로 데이터를 전처리 하였습니다.

앞서 설명 드린 5개의 모델을 만들어 학습시키고, 경우에 따라 최적화를 진행하였습니다.

각각의 모델을 비교하여 최종 모델을 설계하였습니다.

또 선정된 모델을 이용하여 투과율을 최대화하는 코팅 재료의 굴절률과 두께를 역설계하는 알고리즘을 제작하였습니다.

마지막으로 역설계 모델을 통해 굴절률과 두께 데이터가 주어졌을 때 실제값과 예측값을 비교하여 저희 모델의 성능을 파악하였습니다.

## 모델링과 시뮬레이션

다음과 같은 구조로 모델링을 진행하였습니다.

파라미터 스윙을 통해 렌즈와 코팅 재료의 굴절률은 1.0에서 5.0까지 0.25의 간격으로 돌렸고,

코팅 두께는 0부터 1까지 0.2의 간격으로 돌렸습니다.

결과 총 1723개의 투과율 그래프 데이터를 얻었습니다.

## 데이터 전처리

저희는 각각의 변수들에 대한 파장 대 투과율 파일을 총 1723개를 얻었습니다.

이를 각각 변수 별로 인덱싱하여, 약 40만개 행을 가지는 파일 하나로 합쳤습니다.

그리고 투과율의 비교를 위해, 해당 파장 영역대에서의 투과율의 평균값을 계산하였고,

이를 통해 1723개의 행을 가지는 파일을 얻었습니다.

## ML Model 디자인 (Mean)

먼저 투과율의 평균값에 대한 모델을 설계하였습니다.

1723개의 데이터를 사용하여 학습시켰습니다.

Input 변수들과 output 변수들의 선형적 관계를 파악하기 위해 Linear 모델을 만들었습니다.

그래프에서 x축은 실제 값, y축은 예측값이고, 빨간색 직선은  $y=x$ 의 함수입니다.

실제값과 예측값이 일치할수록, 파란색 점들이 빨간색 직선 위에 위치하게 됩니다.

보시다시피 해당 모델들은 저희 데이터에 부적합한 모습을 보였습니다.

또 linear model 보완한 릿지 모델에서도 리니어 모델과 거의 동일하게 나타나는 것으로 보아,

투과율의 평균값을 예측하는 데에 있어 선형적인 관계를 찾을 수 없었음을 확인하였습니다.

두 모델의 테스트 데이터에 대한 정확도는 약 32퍼 정도로 확인되었습니다.

다음으로는 디시전 트리와 랜덤 포레스트 모델입니다.

앞 모델들과 대비되어, 꽤 높은 정확도를 보였습니다.

예러 값에서는 랜덤 포레스트가 더 높은 성능을 보였습니다.

디시전 트리에서 비교적으로 오버피팅이 더 발생하였습니다.

두 모델의 테스트 데이터에 대한 정확도는 각각 98퍼, 99퍼로 상당히 높은 예측 성능을 보였습니다.

마지막으로 뉴럴 네트워크 모델입니다.

앞의 값과는 다르게 해당 모델은 accuracy가 아닌 evaluation을 나타내는데, 이 값은 작을수록 높은 성능을 보입니다.

나쁘지 않은 결과를 보였지만, 앞서 두 모델에 비해 예측 성능이 좋지 못하였습니다.

다음으로, 모델들에 대한 최적화를 진행하였습니다.

최적화 알고리즘에는 베이지안 옵티마이제이션을 사용하였습니다.

이 알고리즘의 원리를 간단히 설명드리면, 최적화의 목표를 정의하는 목적 함수를 가지고, 주어진 범위 내에서 지정한 파라미터를 내부 알고리즘에 따라 조정하여, 목표 함수가 return하는 타겟값을 최대치로 뽑는 파라미터를 찾습니다.

먼저 디시전 트리 모델에서 최적화를 진행하였습니다.

테스트 데이터의 정확도를 타겟으로 지정하였고,

조정할 파라미터로 트리의 깊이, 최소 리프 샘플수를 지정하였습니다.

바운더리는 각각 10~20, 1~4로 설정하였습니다.

최적화 결과 에러가 약간 줄고, 오버피팅도 약간 해소되며, 테스트 데이터의 정확도가 약간 상승하였습니다.

다음으로는 랜덤 포레스트 모델입니다.

테스트 데이터의 정확도를 타겟으로 지정하였고,

조정할 파라미터로 트리의 개수로 지정하였고, 10~500의 바운더리 내로 설정하였습니다.

최적화 결과 에러가 약간 줄고, 오버피팅도 약간 해소되며, 테스트 데이터의 정확도가 약간 상승하였습니다.

마지막으로 뉴럴 네트워크 모델입니다.

타겟값의 최대화가 목표이기에 작을수록 성능이 좋은 evaluation의 음수를 타겟값으로 지정하였습니다.

조정할 파라미터로 배치 사이즈, 에폭크를 지정하였습니다.

바운더리는 둘 다 10~100으로 설정하였습니다.

최적화 결과 에러가 많이 줄고, 오버피팅도 약간 해소되며, evaluation 값이 많이 좋아졌습니다.

전체 모델들의 그래프입니다.

그래프를 보았을 때 랜덤 포레스트 모델이 가장 좋은 예측성능을 보였습니다.

수치적인 결과로도 비교해 보았을 때, 랜덤 포레스트 모델이 가장 우수하여 최종적으로 랜덤 포레스트 모델을 선정하였습니다.

## ML Model 디자인 (T)

다음으로 투과율에 대한 모델을 설계하였습니다.

8에서 14마이크로 영역의 파장에 대한 각각의 T값을 데이터로 받아, 약 40만개의 데이터를 이용하여 모델을 학습시켰습니다.

리니어 모델과 릿지 모델에서 모두 예측성능이 낮게 나와 투과율의 평균값을 이용한 데이터와 비슷하게 선형적인 관계를 찾을 수 없었습니다.

비선형관계를 예측하는데 쓰이는 디시전트리와 랜덤포레스트에서는 약 99퍼의 정확성을 보였습니다

마지막으로 뉴럴네트워크 모델에서도 나쁘지 않은 결과를 보였지만 마찬가지로 앞의 두 모델에 비해 예측 성능이 좋지 못하였습니다.

전체적인 그래프를 비교하였을 때 랜덤 포레스트 모델이 가장 높은 예측성능을 보였습니다

수치적인 결과로 비교해보았을 때도 랜덤포레스트 모델의 성능이 가장 뛰어났기 때문에 랜덤포레스트를 최종 모델로 선정하게 되었습니다.

## 역설계

최종 모델들로 역설계의 알고리즘을 만들었습니다.

앞의 최적화와 마찬가지로 베이지안 옵티마이제이션 알고리즘을 사용하였습니다.

타겟값으로 투과율 평균값의 예상값을 지정하여, 가장 최대화하는 파라미터들을 역추적하였습니다.

먼저 코팅 재료의 굴절률에 대한 역설계입니다.

옆의 표는 임의로 렌즈굴절률 3.4, 코팅 두께 0.7로 설정한 상태입니다.

앞선 결과보다 큰 타겟값이 나왔을 때 보라색으로 표기되어, 마지막 보라색의 값을 확인하면 됩니다.

여기서는 투과율 평균값이 최대치로 나오는 코팅 굴절률을 2.412로 선정하였습니다.

다음은 코팅 두께에 대한 역설계입니다.

임의로 렌즈굴절률 3.4, 코팅 굴절률 1.8로 설정한 상태입니다.

여기서는 두께가 0.9257일 때 투과율 평균 값이 최대치로 나옵니다.

마지막으로 코팅재료 굴절률과 두께 동시 역설계입니다.

임의로 렌즈 굴절률을 3.4로 설정하였을 때, 가장 효율적인 값으로 코팅굴절률 2.091, 두께 1.0이 추정되었습니다.

## 검증 방법 및 결과

저희는 3가지의 역설계 모델을 통해 굴절률과 두께 데이터가 주어졌을 때 실제값과 예측값을 비교하여 저희의 예측 모델에의 성능을 파악하였습니다.

첫번째로 nARC를 예측하는 모델의 검증입니다.

LWIR 카메라 렌즈에는 주로 쓰이는 게르마늄과 셀렌화아연(징크 셀레나이드)을 선택하여 그 물질의 굴절률을 nSub으로 설정하였고, 임의로 0-1사이에서 코팅의 두께를 선정하였습니다.

이와 함께 역설계 모델에서 얻은 nARC값을 토대로 CST를 통하여 모델링을 진행하고, 실제 데이터를 뽑아서 모델이 plot한 Transmisson 그래프와 비교하여 정확성을 예측하였습니다.

파란색 그래프가 모델의 예측값이며 주황그래프는 cst를 통해 얻은 실제값입니다.

첫번째 에서는 상당히 높은 정확도를 보였는데, 나머지 두 경우에는 예측값이 전체적으로 편향된 모습을 볼 수 있습니다.

다음으로는 thARC를 예측하는 모델입니다.

마찬가지로 렌즈에는 주로 쓰이는 게르마늄과 셀렌화아연(징크 셀레나이드), 황화아연을 선택하여 그 물질의 굴절률을 nSub으로 설정하였고, AR 코팅에 쓰일 수 있는 게르마늄, 셀렌화아연, 플루오르화칼슘의 굴절률을 nARC로 설정하였습니다.

이와 함께 역설계 모델에서 얻은 thARC를 토대로 CST로 모델링을 진행하고, 실제 데이터를 뽑아서 그래프를 비교하였습니다.

여기에서도 첫번째 에서는 상당히 높은 정확도를 보였는데, 나머지 두 경우에는 예측값이 전체적으로 편향된 모습을 볼 수 있습니다.

다음으로는 nSub만 주어졌을 때 nARC와 thARC를 예측하는 모델입니다

렌즈에는 게르마늄과 셀렌화아연(징크 셀레나이드), 황화아연을 선택하여 그 물질의 굴절률을 nSub으로 설정하였고, 이와 함께 역설계를 통해 얻은 nARC와 thARC 값을 토대로 모델링을 진행하고 Transmission그래프를 비교하였습니다.

여기서는 세 경우 모두 상당히 높은 정확도를 보임을 확인하였습니다.

## 정리나 결론

저희는 LWIR 스펙트럼에서의 ARC 특성 최적화 및 파라미터 최적화에 대한 연구를 진행하였습니다.

저희는 Linear, Ridge, Decision Tree, Random Forest, Neural Network 등 다양한 머신러닝 모델을 사용하여 예측력을 향상시키려 노력하였습니다. 그 결과, Random Forest 모델이 가장 우수한 예측 성능을 보여 주었고, 최종 모델로 선정되었습니다.

또한, 학습된 모델을 활용하여 최대 투과율을 달성하기 위한 코팅 재료와 적절한 두께를 찾기 위한 역설계 알고리즘을 개발하였고,

실제 데이터와의 비교를 통해 모델의 정확성을 검증하였습니다.



## 연구의 한계(아쉬운 점)

먼저 thARC 범위 설정에 관한 문제입니다.

저희는 thARC를 0에서 1까지 0.1 간격으로 파라미터 스위치를 진행했는데, 역설계로 찾은 굴절률이 높게 나오는 경우에는 대부분 두께가 0.9 이상의 값을 갖는 경향이 있었습니다.

이를 고려하여 thARC의 최대값을 더 높게 설정해 더 많은 thARC 데이터를 얻었다면, 더 효율적인 thARC 값을 찾을 수 있지 않았을까 하는 아쉬움이 남습니다.

또한, 설계한 알고리즘들의 한계에 대해서도 아쉬움이 남았습니다.

이전에 언급한 오차의 원인 중 하나로, 학습 데이터의 굴절률 간격이 큰 값을 사용한 것이 부적절했습니다.

더 많은 데이터를 수집했다면, 모델의 오차를 크게 줄일 수 있었을 것이라는 생각이 듭니다.

또한, 역설계에 사용된 베이지안 옵티마이제이션 모델이 정말 최대의 타겟 값을 찾아낼 수 있는지에 대한 의문도 남았습니다.

역설계에서 다른 비선형 최적화 알고리즘 두 가지(유전 알고리즘, 뉴턴-랩슨 방법)를 추가로 사용하여 베이지안 알고리즘이 가장 높은 타겟 값을 보였지만, 더 높은 타겟 값이 존재하는지 여부를 단정짓기 어려웠습니다.

또한 파장에 따라 굴절률이 달라지는 재료의 특성을 고려하지 못한 부분도 아쉬움으로 남았습니다.

LWIR 영역의 렌즈에서는 파장에 따른 굴절률 분산 특성을 가지는 재료가 많지만, 이러한 재료의 굴절률 특성을 반영하지 못하고 해당 파장 영역대에서의 굴절률 평균값만을 사용한 것이 아쉬웠습니다.

추가적으로 열에 민감한 LWIR 렌즈의 AR 코팅을 개발하기 위해서는 열 전도성, 열 방사율 등을 고려하는 것이 중요합니다.

그러나 저희 프로젝트에서는 열적인 부분에 대한 연구가 배제되고, LWIR영역에서 AR코팅을 빛의 굴절과 간섭의 영역으로만 해석을 진행하여 아쉬움이 남았습니다.

## 연구의 발전 가능성

더 많은 데이터 샘플을 활용하여 학습하고, 재료의 열적인 특성과 굴절률 분산 특성을 더 잘 반영한다면, 저희의 머신러닝 모델의 예측 성능이 향상될 것으로 기대합니다.

우리 연구의 접근 방식은 기존의 CST 스튜디오를 통한 설계 과정보다 효율적일뿐만 아니라 시간적으로도 많은 이득을 가져올 것으로 생각합니다.

개선된 모델은 향후 LWIR 영역에서의 AR 코팅 연구에 충분히 활용될 수 있을 것입니다.