

레이저 회절성에 의한 입자크기의 계측을 위한 센서 설계

남부희*, 강성귀**, 유태우**, 방병렬**, 지구인***

* 강원대학교 ** 생산기술연구원 *** 건국대학교

Design of Photo-Detector for Particle Sizer Using Laser Diffraction

Boo Hee Nam, Sung-Gui Kang, Tae-U Yu, Byeong Ryeol Bang, Gyu-In Jee
Kangwon National Univ., Korea Academy of Industrial Technology, Kon-Kuk Univ.

ABSTRACT

We design a multi-element photo-detector to measure the size of particles using the diffracted light energy distribution. The light energy that is scattered by particles in the collimated laser beam is collected by the Fourier transform lens and directed to the multi-semicircular concentric annular detectors. The scattered profile measured by the photodetector is sampled by a 32 channel analog-to-digital converter. A nonnegative least squares analysis translates the light energy distribution into the corresponding unique particle size distribution.

1. 서 론

레이저를 이용하여 입자크기를 측정하는 여러가지 기술이 개발되어 왔다[1]-[3]. 1976년 영국의 Swithenbank에 의해 개발된 방법은 입자군이 레이저 빛을 통과할때 발생하는 회절패턴(diffraction pattern)을 분석해 입자의 크기를 측정하는 기술로 영국의 Malvern사에 의해 상품화 되었다. 입자크기 분포는 분말, 화장품, 의약품, 안료 관련업체 뿐만아니라 기계분부나 유체 분부와 관련된 응용분야에서도 매우 중요하다.

본 논문에서는 빛의 회절성으로부터 입자크기를 계산하는 이론을 이용하여 광 검출기를 설계하고 입자크기 분포를 구하는 알고리즘을 개발하였다. 변환 행렬을 이용하여 에너지 분포로부터 입자크기 분포를 구하는데, 비음수 최소자승법을 사용하였다. 광센서의 각 채널은 특정 입자 크기 그룹이 Fourier 변환된 2D의 축척평면에서 만들어내는 에너지분포 중 최대값이 각각의 채널에서 동일하게 나타나도록 광센서를 설계하였다.

2. 입자크기 측정 원리

그림 2.1은 입자 크기 측정장치 개략도를 나타낸다. He-Ne 레이저를 beam expander(splitter)로 통과 시켜 일종의 spatial filtering 시킨 후 평행광을 얻는다. 분무 노즐에서 나온 입자 분무는 평행 레이저에 의하여 서로 다른 각도로 회절을 일으키는데 이 광을 Fourier 변환렌즈로 통과시키면 그 축척 위치에 있는 축척 평면에 반경이 다른 유일한 형태의 동심원을 그리게 된다. 축척 평면에 동심원 형태의 동심 다환상 검출기를 놓아 여러 채널의 신호를 검출하여 A/D 변환시켜 신호 해석 알고리즘을 거쳐 입자크기 분포가 계산되어 출력된다.

축척 평면에서 강도 분포(intensity distribution)의 세기

U(P)는 다음으로 주어진다:

$$U(P) = C \iint_A e^{-ik(p\xi + q\eta)} d\xi d\eta \quad (2-1)$$

여기서

A : disc 면적

p, q : 축척 평면의 좌표

ξ, η : 원판 또는 구멍의 점의 직교 좌표

λ : 파장

$k = 2\pi/\lambda$

$$C = (1/\lambda)\sqrt{E/D} \Rightarrow C^2 = (1/\lambda^2)E/D \quad (2-2)$$

E : 원판상의 입력 에너지

D : 원판의 면적

회절 패턴의 중심에서의 강도는 다음과 같다:

$$I_0 = |U(0,0)|^2 = D^2 C^2 \quad (2-3)$$

원판에서의 Fraunhofer 회절을 계산하기 위하여 원통좌표로 표현하면, 회절 적분은

$$U(p) = C \int_0^a \int_0^{2\pi} e^{-ik\rho\omega\cos(\theta - \varphi)} \rho d\rho d\theta \quad (2-4)$$

로 되는데, 한편 Bessel 방정식과 그 해 $J_n(x)$ 의 적분 표현은 다음과 같이 된다.

$$\text{Bessel 방정식: } x^2 \ddot{y} + x \dot{y} + (x^2 - n^2)y = 0, n > 0 \quad (2-5)$$

$$\text{Bessel 함수: } J_n(x) = (i^{-n}/2\pi) \int_0^{2\pi} e^{-ix\cos\alpha} e^{in\alpha} d\alpha \quad (2-6)$$

$$\text{특히, } J_0(x) = (1/2\pi) \int_0^{2\pi} e^{-ix\cos\alpha} d\alpha. \quad (2-7)$$

따라서,

$$U(P) = 2\pi C \int_0^a J_0(k\rho\omega) \rho d\rho, \quad J_0(x) = J_0(-x). \quad (2-8)$$

또한 Bessel 함수의 순환 관계식

$$(d/dx)[xJ_1(x)] = xJ_0(x) \quad (2-9)$$

을 이용하면 다음을 얻는다.

$$U(P) = CD[2J_1(kaw)/kaw] \quad (2-10)$$

여기서 $x = kaw$, $D = wa^2$ (aperture 면적), $w = s/f$, $k = 2\pi/\lambda$, $I_0 = (CD)^2 = DE/\lambda^2$, f 는 초점 길이이다. 대응되는 강도는

$$I(P) = |U(P)|^2 = I_0 [2J_1(x)/x]^2 \quad (2-11)$$

가 된다.

초점 평면에서 반경 $w = s/f$ 의 원 내에 포함된 분수 에너지(fraction of energy)는 다음과 같이 구해진다:

$$L(w) = \frac{1}{E} \int_0^w \int_0^{2\pi} I(\omega) \omega d\omega d\phi$$

$$= 2 \int_0^x \frac{J_1^2(x)}{x} dx \quad (2-12)$$

$$= 1 - J_0^2(x) - J_1^2(x)$$

$$= 1 - J_0^2\left(\frac{2\pi as}{\lambda f}\right) - J_1^2\left(\frac{2\pi as}{\lambda f}\right) : \text{Rayleigh의 식} \quad (2-13)$$

식 (2-13)는 누적 상대 에너지 분포이다($x = 2\pi as / \lambda f$). 분수 에너지 $L(w)$ 에 의하면 첫째 dark ring 내에 80% 이상의 에너지가 집중되어 있다. 에너지 분포식은 다음으로 구해진다 (그림 2.2):

$$(d/dx)L(w) = (d/dx)[1 - J_0^2(x) - J_1^2(x)]$$

$$= 2(J_1^2(x)/x) \quad (2-14)$$

에너지 분포의 첫 최대점은 $J_0(x) = 3J_2(x)$ 가 되는 값이다.

$$x_m = (2\pi as / \lambda f) = 1.3566 \quad (2-15)$$

HeNe 빛에 대하여 $\lambda = 0.6328 \mu\text{m}$ 이므로

$$(s/f)_m = (\lambda/2\pi a)x_m = 0.1366/a$$

의 x_m 값이 에너지 분포의 첫 최대치의 위치를 나타낸다.

a 에 의하여 초점 평면에서 s_1 과 s_2 사이의 환내의 빛 에너지는 다음과 같다:

$$L_{s1, s2} = E[J_0^2(2\pi as_1/\lambda f) + J_1^2(2\pi as_1/\lambda f) - J_0^2(2\pi as_2/\lambda f) - J_1^2(2\pi as_2/\lambda f)] \quad (2-16)$$

여기서 E 는 입자에 떨어지는 에너지이므로 입자의 면적에 비례한다. N 개의 입자가 있을 경우에는

$$L_{s1, s2} = C' N \pi a^2 [(J_0^2 + J_1^2)_{s1} - (J_0^2 + J_1^2)_{s2}] \quad (2-17)$$

여기서 C' 은 레이저 세기와 광학적 효율에 의존하는 상수이다. 입자에 대한 크기 분포는 임의의 크기범위 내에서 가중분수로 분포를 표현하는 것이 편리하다. 가중치는 다음 관계를 갖는다:

$$N = \frac{W}{\rho(4/3)\pi a^3} = \frac{3W}{4\rho\pi a^3} \quad (2-18)$$

초점 평면에서 임의의 환에서의 광에너지 분포는 단순히 모든 크기의 각각의 개별 입자로 부터의 기여치의 합이다. 따라서, 가중치 관계식을 첫 식에 대입시키면:

$$L_{s1, s2} = C'' \frac{W}{a} [(J_0^2 + J_1^2)_{s1} - (J_0^2 + J_1^2)_{s2}] \quad (2-19)$$

n 개의 크기 그룹에 대하여 합하면 에너지 합산식은

$$L_{s1, s2} = C'' \sum_{i=1}^n (W_i/a_i) [(J_0^2 + J_1^2)_{s1} - (J_0^2 + J_1^2)_{s2}] \quad (2-20)$$

n 개의 photodetector ring 에 대하여, 만일 우리가 입자 크기 a_1, a_2, \dots, a_n 의 종류를 갖고, 각 크기의 입자 갯수가 N_1, N_2, \dots, N_n 이라면, 다음 형태의 행렬 방정식을 얻는다:

$$\begin{bmatrix} L_1 \\ L_2 \\ \vdots \\ L_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & \dots & T_{1n} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ T_{m1} & T_{m2} & \dots & T_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} W_1 \\ W_2 \\ \vdots \\ W_n \end{bmatrix} \quad (2-21)$$

따라서, 입자크기분포 가중치(weight) $W=[W_i]$ 를 구할 수 있다.

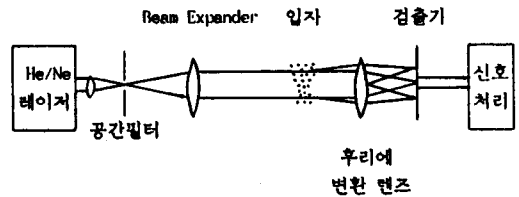


그림 2.1 레이저 회절입자 측정

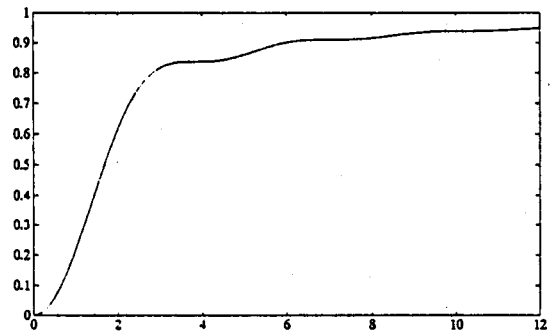


그림 2.2 반경 x 원내의 분수에너지: $1 - J_0^2(x) - J_1^2(x)$

3. Laser Detector의 설계

임의의 크기를 갖는 입자는 탐지기 평면의 모든 반경으로 빛을 회절시키지만 에너지 분포 폭선은 하나의 특정한 반경에서 정점을 갖는다.

반경이 a 인 입자에 의해 detector면에서의 반경 s_1 과 s_2 사이에 회절되는 광에너지의 양은 다음과 같다.

$$L_{s1, s2}(a) = E[J_0^2(ka s_1/f) + J_1^2(ka s_1/f) - J_0^2(ka s_2/f) - J_1^2(ka s_2/f)] \quad (3-1)$$

여기서, $k = (2\pi)/\lambda$. 에너지 분포의 첫 번째 최대값의 위치는 식(2-15)와 같다. 입자들의 크기분포를 알아내서 몇개의 분할된 그룹으로 분류하고자 한다면 j 번째 detector의 반경 s_j 가 a_j 와 (2-15)에 의해 관계되는 최적의 반경위치에서 측정이 이루어져야 한다. 이때 a_j 는 j 번째 그룹을 대표하는 입자의 평균크기이다.

결국 내경이 s_{1j} 이고 외경이 s_{2j} 으로 주어지는 특정한 반원경의 detector는 식 (3-1)에 의해 결정되는 반경의 크기 범위안에 있는 입자들에 대해 가장 민감하게 반응하게 된다. 예로써 Malvern 2200의 ring detector 14번은 $s_{114} = 9.220\text{mm}$ 이고, $s_{214} = 11.501\text{mm}$ 이다. 렌즈의 초점거리 $f = 300\text{mm}$ 와 $\lambda = 0.6328\mu\text{m}$ 의 경우 이 ring은 식 (2-15)에 의해 결정되는 하한반경 a_{L14}

= 3.563 상한반경 $au_{14} = 4.445$ 사이에 있는 입자들에 대해 가장 민감하게 반응한다. 그러나 실제로 Malvern 2200의 경우 식(2-15)의 우변에 잘못된 값인 1.375 을 사용하여 입자의 크기범위가 결정되었다.

Malvern 2200의 입자크기 그룹에 대하여 동일한 광에너지를 쏘인 각 입자그룹의 평균크기를 가진 한 입자들이 그 그룹에 해당하는 단일 ring에 회절시킨 광에너지를 구해서 그것을 그래프로 표시하면 그림 3.1과 같다. 그래프의 j번째 막대는 j번째 입자그룹의 평균크기를 갖는 반지름 $(a_{Lj} + a_{Uj})/2$ 인 입자가 j번째 ring에 분산시키는 광에너지를 의미한다.

이 그래프로부터 우리는 원점 근처에 위치하는 ring 1~5 들을 제외한 모든 ring들은 거의 동일한 양의 광 에너지를 흡수한다는 사실을 알 수 있다. 위의 경우 ring 6~31 사이의 평균치는 0.0626이다. 이것은 각 detector ring으로부터 측정되는 값들의 상대적인 비를 동일하게 함으로써 보다 정확한 측정을 얻기 위한 것으로 해석된다.

위의 사실들로부터 모든 ring이 동일한 양의 광에너지를 흡수하도록 다음과 같은 detector 설계방법을 제안할 수 있다.

1. 각 ring에 공통적으로 분산될 광에너지를 양 LE를 정한다.
2. j번째 detector ring의 내경 s_{1j} 가 주어졌다고 가정한다.
3. 식 (2-15)에 의해 주어진 λ 와 f 그리고 s_{1j} 에 대한 a_{Uj} 를 결정한다.
4. 식 (3-1)에 의해 주어지는 아래의 수식을 만족하는 s_{0j} 를 구한다.

$$LE = J_0^2(k a_{Uj} s_{1j} / f) + J_1^2(k a_{Uj} s_{1j} / f) - J_0^2(k a_{Uj} s_{0j} / f) - J_1^2(k a_{Uj} s_{0j} / f)$$

5. 식 (2-15)로부터 s_{0j} 에 대한 a_{Lj} 를 결정한다.
6. 구간의 평균값 $a_j = (a_{Lj} + a_{Uj}) / 2$ 를 구하여 step 4의 a_{Uj} 대신 대입하여 새로운 s_{0j} 를 구한다.
7. step 4-6을 반복하여 s_{0j} 가 특정한 값으로 수렴할 때까지 계속한다.
8. s_{0j} 가 구해지면 ring사이의 절연체가 차지하는 길이 d를 더하여 j+1번째 ring의 내경 $s_{1(j+1)}$ 을 구한다:

$$s_{1(j+1)} = s_{0j} + d.$$

위의 step들을 반복하면 순차적으로 detector ring의 크기와 입자그룹의 범위를 정할 수 있다. 처음 다섯 ring의 크기는 Malvern 2200의 detector ring 1 - 5까지의 크기를 그대로 사용하고 각 ring에 분산될 광에너지 LE는 그림 3.1에 보여진 평균값을 갖도록 한다. 그림 3.2에 설계된 detector가 보여진다.

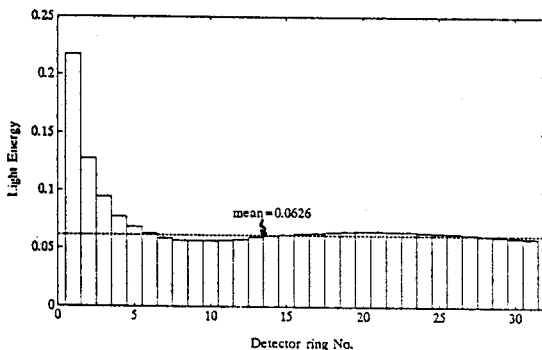


그림 3.1 단일 ring의 빛 에너지 양

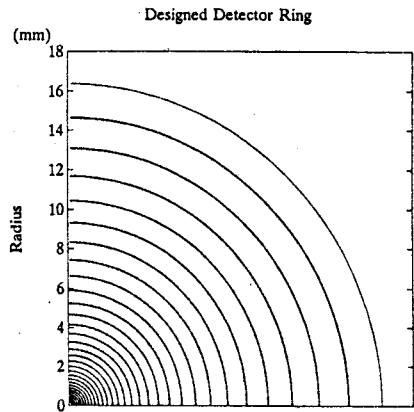


그림 3.2 설계된 Detector

4. 입자 크기 분포 해석

입자의 크기분포를 갖는 입자그룹은 특정한 빛에너지 분포를 갖고 있고, 이것은 3장에서 설계된 디텍터에 의해 측정된다. 측정된 빛에너지 분포로부터 입자의 크기분포를 알아내기 위해서는 수치적인 계산[4]-[7]이 필요하다.

Kuhn-Tucker 정리 :

$$\min f(x) \\ g_i(x) \geq 0$$

의 문제에서는 x^* 를 가능해라 할 때 Kuhn-Tucker조건은 다음과 같다.

$$(1) \lambda_i g_i(x^*) = 0 \text{ 가 되는 } \lambda_i \geq 0 \text{ 가 존재한다.}$$

$$(2) \nabla f(x^*) - \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla g_i(x^*) = 0 \quad (4-1)$$

크기가 a_j 이고 무게의 비(Weight Fraction)가 w_j 인 입자그룹 ($j=1, 2, \dots, n$)들에 의해 내경이 s_{1i} 이고 외경이 s_{10i} 인 i-번째 디텍터에 분산되는 빛에너지는 다음의 식으로 주어진다.

$$L_{s_{11}, s_{10}} = C \sum_{j=1}^n (w_j/a_j) [(J_0^2 + J_1^2) s_{11} - (J_0^2 + J_1^2) s_{10}] \quad (4-2)$$

만약 m개의 디텍터가 구성되어 있다면 각 디텍터에 분산되는 빛에너지는 위의 식으로부터 다음의 행렬형태로 표현된다.

$$L = T W \quad (4-3)$$

$$T_{ij} = \frac{C}{a_j} [(J_0^2 + J_1^2)(2\pi a_j s_{11}/\lambda f) - (J_0^2 + J_1^2)(2\pi a_j s_{10}/\lambda f)] \quad (4-4)$$

a_j 는 j-번째 입자크기그룹을 대표하는 입자그룹의 평균값이다. 예로서, MV2200의 Size Class No. 3의 a_j 값은 $a_j = (a_{31} + a_{30})/2 = (199.2 + 261.2)/2 = 230.2$ 이다. 측정값의 수, 즉 디텍터의 수인 m은 입자크기그룹의 수인 n보다 크거나 같아야 한다 ($m \geq n$). 설계된 디텍터들의 내경과 외경이 알려져 있고 그에 따른 최적의 입자크기그룹이 결정되어 있으므로 T 행렬의 값은 식 (4-4)에 의해 계산된다. 이와는 달리 L 벡터의 값은 디텍터에 의해 측정되는 빛에너지의 값이므로 측정오차가 발생하게 되어 식 (4-3)은 아래의 같이 다시 쓰여진다.

$$L = T W + V \quad (4-5)$$

여기서, V는 각 디텍터에서 발생하는 측정오차를 나타낸다. 식 (4-5)에서 L과 T가 알려졌을 때 추정오차를 최소화하는 최적의

W를 구하는 것은 최소자승문제 (Least Square Problem)에 해당한다. 행렬이 비정칙(singular) 혹은 수치적으로 매우 비정칙에 가까울 때 이 행렬로 이루어진 선형 수식

$$A X = b \quad (4-6)$$

를 푸는데 가우스 소거법과 LU등이 만족할 만한 결과를 주지 못할 때, SVD(singular value decomposition)는 무엇이 문제인가를 알려줄 뿐만 아니라 해를 구할 수 있게 해준다. W에 대한 부호조건을 고려한 최소자승문제는 다음과 같다:

$$\begin{aligned} \min J &= \|L - TW\|^2 \\ W & \\ \text{s.t. } W &\geq 0 \end{aligned} \quad (4-7)$$

위의 문제는 목적함수가 제곱형이므로 일반적인 quadratic programming 방법을 이용하여 수치적으로 해를 구할 수 있다. 그러나 (4-7)은 특별한 형태의 quadratic programming문제이다. 즉, W에 대한 제한이 일반적인 형태의 선형 제한이 아니라 단지 음수가 될 수 없다는 단순한 형태이다. 그러므로 우리는 (4-7)을 풀기 위한 특정한 수치적 알고리즘을 생각할 수 있다.

(4-7)의 해가 되기 위한 필요조건인 Kuhn-Tucker조건은 다음과 같이 구해진다.

$$VJ(W^*) - \mu = 0, \quad \mu \geq 0 \quad (4-8)$$

$$\mu^T W^* = 0 \quad (4-9)$$

$\mu \geq 0, W \geq 0$ 이므로 (4-9)로부터 μ 는 해당하는 제한조건이 active일 때, 즉 $W_j^* = 0$ 일 때, 양의 값을 갖고, $W_j^* > 0$ 일 때 $\mu_j = 0$ 이다. W_j^*, μ_j 는 각기 W^*, μ 의 j-번째 요소이다. 위의 두 조건으로부터 W가 비음수 최소자승해가 되기 위한 조건은 다음과 같이 구체적으로 구해진다.

$$\begin{aligned} W_j^* > 0 \text{ 일 때 } & VJ_j(W^*) = 0 \\ W_j^* = 0 \text{ 일 때 } & VJ_j(W^*) > 0 \end{aligned} \quad (4-10)$$

위의 조건을 만족하는 해를 구하기 위해, Active Set Method를 이용한 다음의 알고리즘을 사용한다.

- I. SVD를 이용하여 비제한(unconstrained) 최소 자승해 W^* 를 구한다.
- II. W^* 의 임의의 요소 W_j^* 가 음수이면 그 값을 영으로 하고 (즉, $W_j^* = 0$), 이런 과정을 거친 W^* 를 W^{*sat} 라 한다. 이 점에서의 J의 gradient $VJ(W^{*sat})$ 를 구한다.
- III. $(W^{*sat})_j = 0$ 이고 $VJ_j(W^{*sat}) > 0$ 이면 j-번째 제한은 active이다.
- IV. 만약 모든 제한들이 active가 되거나 혹은 어떤 active set도 inactive set이 되지 않고, 또한 어떤 inactive set도 active set이 되지 않았다면 W^{*sat} 는 비음수 최소자승해이다.
- V. active set에 있는 모든 제한에 해당하는 W의 요소들을 영으로 하여 (4-7)에 $W_j = 0$ 로 대입하여 차수가 줄어든 새로운 최소자승문제를 구성한다.
- VI. 새로운 최소자승문제의 비제한 해를 구하여 inactive 요소의 최소 자승해를 구한다.
- VII. 단계 II로 간다. 최대한 n번의 반복 후에 비음수 최소자승해가 구해진다.

위의 방법을 이용하여 특정입자에 대한 시뮬레이션 결과는 기 대하였던 바와 같이 그림 4.1과 같다.

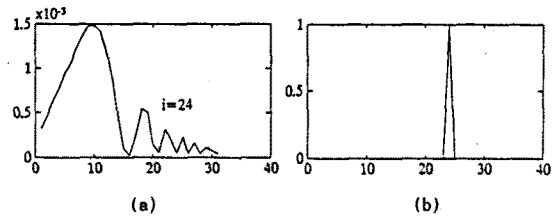


그림 4.1 특정 입자크기에 대한 분포 해석

(a) 24번째 그림의 빛 에너지

(b) Quadratic Program을 이용하여 해석된 가중치

5. 결 론

본 논문에서는 레이저의 회절성을 이용하여 입자 크기를 계산하는 이론을 구명하고 이에 의하여 광 탐지기를 설계하고 입자 크기 분포에 대한 가중치를 구하는 알고리즘을 개발하였다. 시뮬레이션을 통하여 설계된 광 탐지기는 주어진 입자의 빛 에너지 분포에 대하여 예상되는 입자 크기 분포를 얻었다.

앞으로의 연구 방향은 하드웨어를 구현하여 입자크기를 실시간 계속하고 입자크기를 여러가지 측면에서 해석하는 소프트웨어의 개발이 요구된다.

참 고 문 헌

1. Swithenbank, J., Beer, J.M., Taylor, D.S., Abbott, D. and McCreath, G.C., "Laser Diagnostic Technique for the Measurement of Droplet and Particle Size Distribution," in Experimental Diagnostics in Gas Phase Combustion Systems, Progress in Astronautics and Aeronautics Series, edited by B.T. Zinn, AIAA, Vol.53, pp.421-447, New York, 1977.
2. E. Dan Hirtleman, V. Oechsle and N.A. Chigier, "Response characteristics of laser diffraction particle size analyzers: optical sample volume extent and lens effects," Optical Engineering, Vol.23, No.5, pp.610-619, September/October 1984.
3. J.A. Drallmeier and J.E. Peters, "Time-Resolved Pulsed Spray Drop Sizing at Elevated Pressures," J. Propulsion, Vol.2, No.2, pp.142-148, March-April 1986.
4. W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky, and W.T. Vetterling, Numerical Recipes in C, Cambridge University Press, 1988.
5. D.G. Luenberger, Linear and Nonlinear Programming, Addison Wesley, 1984.
6. N.L. Segall, J.F. Macgregor and J.D. Wridght, "One-step optimal Saturation Correction," Automatica Vol. 27, No.1, pp.135-139, 1991.
7. Willard I. Zangwill, Nonlinear Programming, A Unified Approach, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J., 1969