



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2023-0014916
(43) 공개일자 2023년01월31일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
G01N 23/04 (2018.01) G01N 23/087 (2006.01)
(52) CPC특허분류
G01N 23/04 (2013.01)
G01N 23/087 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2021-0095794
(22) 출원일자 2021년07월21일
심사청구일자 2021년07월21일

(71) 출원인
연세대학교 산학협력단
서울특별시 서대문구 연세로 50 (신촌동, 연세대학교)
(72) 발명자
박광우
경기도 용인시 처인구 양지면 중부대로2685번길 2-1
한민철
서울시 강동구 고덕로97길 29 903동 701호
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인비엘티

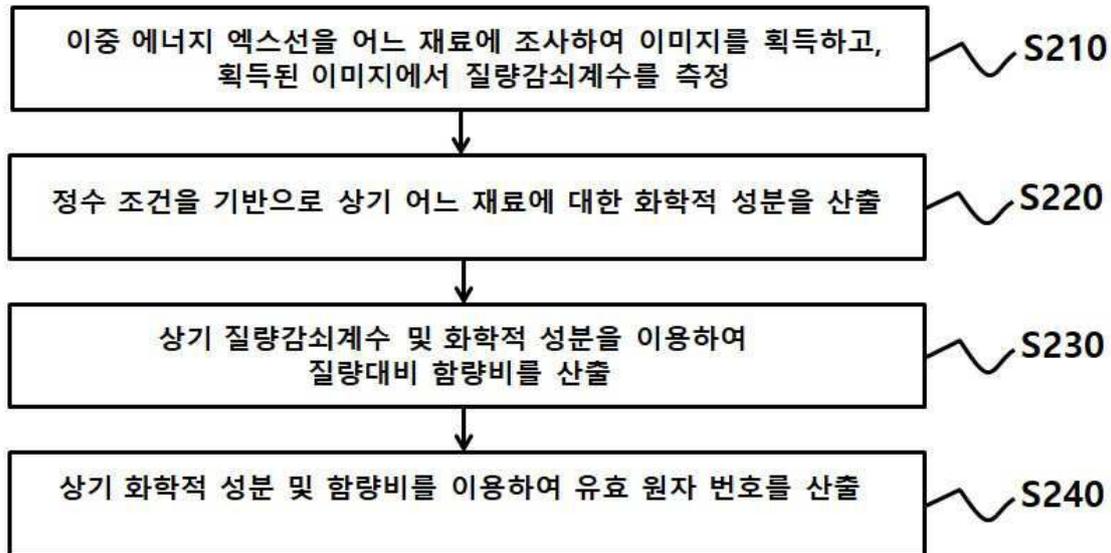
전체 청구항 수 : 총 23 항

(54) 발명의 명칭 **화학적 성분 분석 장치 및 화학적 성분 분석 방법**

(57) 요약

화학적 성분 분석 장치 및 화학적 성분 분석 방법이 제공된다. 상기 화학적 성분 분석 장치는 이중 에너지 엑스선을 어느 재료에 조사하여 이미지를 획득하고, 획득된 이미지에서 질량감쇠계수를 측정하는 질량감쇠계수 측정부 및 목적 함수의 최소화 및 정수 조건을 기반으로 화학적 성분을 산출하고, 상기 질량감쇠계수 및 화학적 성분을 이용하여 질량대비 함량비를 산출하며, 상기 화학적 성분 및 함량비를 이용하여 유효 원자 번호를 산출하는 제어부를 포함한다.

대표도 - 도2



(52) CPC특허분류

G01N 2223/401 (2013.01)

(72) 발명자

백승협

경기도 성남시 분당구 동판교로 92

안소현

서울시 도봉구 해등로 231 8-1502

김동욱

서울시 서대문구 증가로 27-05 103호

김진성

서울시 서대문구 통일로 394 홍제 센트럴
아이파크106동 102호

김호진

서울시 서대문구 북아현로 50길1 202동 603호

김지훈

서울시 성동구 금호산길 27 103-703

홍채선

경기도 광명시 오리로 801, 101동 2502호

이호

서울시 강남구 언주로 211

명세서

청구범위

청구항 1

장치에 의해 수행되는, 이중 에너지 엑스선을 이용하여 화학적 성분을 분석하는 방법으로서,

이중 에너지 엑스선을 어느 재료에 조사하여 이미지를 획득하고, 획득된 이미지에서 질량감쇠계수를 측정하는 단계;

목적 함수의 최소화 및 정수 조건을 기반으로 상기 어느 재료에 대한 화학적 성분을 산출하는 단계;

상기 질량감쇠계수 및 화학적 성분을 이용하여 질량대비 함량비를 산출하는 단계; 및

상기 화학적 성분 및 함량비를 이용하여 유효 원자 번호를 산출하는 단계를 포함하는 화학적 성분 분석 방법.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

어느 재료 x를 구성하는 N개의 화학적 구성은, 하기 [수학식 1]과 같이 선형 조합으로 확장되는 것을 특징으로 하는 화학적 성분 분석 방법.

[수학식 1]

$$\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_x = \sum_{i=1}^N w_i \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i$$

여기서, w_i 는 i번째 요소(element)의 중량 분율이고, $(\mu/\rho)_i$ 는 i번째 요소의 질량감쇠계수임.

청구항 3

제 2 항에 있어서,

상기 w_i 는 하기 [수학식 2]로 정의되는 것을 특징으로 하는 화학적 성분 분석 방법.

[수학식 2]

$$w_i = \frac{n_i A_i}{\sum_i n_i A_i}$$

여기서, 상기 n_i 는 공식 단위의 수, A_i 는 i번째 요소의 원자량, $\sum_i n_i A_i$ 는 어느 재료의 원자 질량임.

청구항 4

제 1 항에 있어서,

상기 질량감쇠계수를 측정하는 단계는,

서로 다른 에너지를 갖는 엑스선을 상기 어느 재료에 조사하여 각 에너지별로 상기 어느 재료에 대한 질량감쇠 계수를 측정하는 것을 특징으로 하는 화학적 성분 분석 방법.

청구항 5

제 4 항에 있어서,

상기 질량감쇠계수를 측정하는 단계는,

제1 에너지를 갖는 엑스선을 상기 어느 재료에 조사하여 상기 제1 에너지에 대한 질량감쇠계수를 측정하고,

상기 제1 에너지와 다른 제2 에너지를 갖는 엑스선을 상기 어느 재료에 조사하여, 상기 제2 에너지에 대한 질량감쇠계수를 측정하는 것을 특징으로 하는 화학적 성분 분석 방법.

청구항 6

제 4 항에 있어서,

상기 화학적 성분을 산출하는 단계는,

서로 다른 에너지를 통해 측정된 질량감쇠계수를 이용하여 상기 어느 재료를 구성하는 화학적 성분들의 질량감쇠계수를 산출하고,

화학적 성분들의 질량감쇠계수들을 이용하여 상기 화학적 성분들의 중량 분율을 산출하는 것을 특징으로 하는 화학적 성분 분석 방법.

청구항 7

제 6 항에 있어서,

상기 화학적 성분을 산출하는 단계는,

상기 산출된 화학적 성분들의 중량 분율에 근거하여, 하기 [수학식 3]을 통해 정수 조건을 만족하도록 화학적 성분을 산출하는 것을 특징으로 하는 화학적 성분 분석 방법.

[수학식 3]

$$n_i = \frac{w_i}{(1 - \sum_j^{N-1} w_j) A_i} n_N \in I$$

여기서, I는 정수 그룹이고, 상기 어느 재료가 N개의 화학적 성분으로 구성되며($Z=1, 2, \dots, N-1, N$), w_i 는 i 번째 요소의 중량 분율, A_i 는 i번째 요소의 원자량, n_i 는 i번째 요소의 공식 단위의 수임.

청구항 8

제 7 항에 있어서,

상기 [수학식 3]은,

N번째 화학적 성분이 가장 작은 중량 분율을 갖는 것을 특징으로 하는 화학적 성분 분석 방법.

청구항 9

제 7 항에 있어서,

상기 정수 조건을 만족하는 화학적 성분의 이론적 질량감쇠계수와 상기 이미지에서 측정된 질량감쇠계수의 차이가 일정범위 이내인지 여부를 판단하는 단계를 더 포함하는 화학적 성분 분석 방법.

청구항 10

제 1 항에 있어서,

산출된 화학적 성분에 대한 촬영이 강화된 촬영모드로 상기 어느 재료를 촬영하는 단계를 더 포함하는 화학적 성분 분석 방법.

청구항 11

제 10 항에 있어서,

상기 촬영하는 단계는, 상기 화학적 성분을 기반으로 영상의 노이즈를 제거하는 것을 특징으로 하는 화학적 성

분 분석 방법.

청구항 12

이중 에너지 엑스선을 어느 재료에 조사하여 이미지를 획득하고, 획득된 이미지에서 질량감쇠계수를 측정하는 질량감쇠계수 측정부; 및

목적 함수의 최소화 및 정수 조건을 기반으로 화학적 성분을 산출하고, 상기 질량감쇠계수 및 화학적 성분을 이용하여 질량대비 함량비를 산출하며, 상기 화학적 성분 및 함량비를 이용하여 유효 원자 번호를 산출하는 제어부를 포함하는 화학적 성분 분석 장치.

청구항 13

제 12 항에 있어서,

어느 재료 x를 구성하는 N개의 화학적 구성은, 하기 [수학식 1]과 같이 선형 조합으로 확장되는 것을 특징으로 하는 화학적 성분 분석 장치.

[수학식 1]

$$\begin{pmatrix} \mu \\ \rho \end{pmatrix}_x = \sum_{i=1}^N w_i \begin{pmatrix} \mu \\ \rho \end{pmatrix}_i$$

여기서, w_i 는 i번째 요소의 중량 분율이고, $(\mu/\rho)_i$ 는 i번째 요소의 질량감쇠계수임.

청구항 14

제 13 항에 있어서,

상기 w_i 는 하기 [수학식 2]로 정의되는 것을 특징으로 하는 화학적 성분 분석 장치.

[수학식 2]

$$w_i = \frac{n_i A_i}{\sum_i n_i A_i}$$

여기서, 상기 n_i 는 공식 단위의 수, A_i 는 i번째 요소의 원자량, $\sum_i n_i A_i$ 는 어느 재료의 원자 질량임.

청구항 15

제 12 항에 있어서,

상기 질량감쇠계수 측정부는,

서로 다른 에너지를 갖는 엑스선을 상기 어느 재료에 조사하여 각 에너지별로 상기 어느 재료에 대한 질량감쇠계수를 측정하는 것을 특징으로 하는 화학적 성분 분석 장치.

청구항 16

제 15 항에 있어서,

상기 질량감쇠계수 측정부는,

제1 에너지를 갖는 엑스선을 상기 어느 재료에 조사하여 상기 제1 에너지에 대한 질량감쇠계수를 측정하고,

상기 제1 에너지와 다른 제2 에너지를 갖는 엑스선을 상기 어느 재료에 조사하여, 상기 제2 에너지에 대한 질량감쇠계수를 측정하는 것을 특징으로 하는 화학적 성분 분석 장치.

청구항 17

제 15 항에 있어서,

상기 제어부는,

서로 다른 에너지를 통해 측정된 질량감쇠계수를 이용하여 상기 어느 재료를 구성하는 화학적 성분들의 질량감쇠계수를 산출하고,

화학적 성분들의 질량감쇠계수들을 이용하여 상기 화학적 성분들의 중량 분율을 산출하는 것을 특징으로 하는 화학적 성분 분석 장치.

청구항 18

제 17 항에 있어서,

상기 제어부는,

상기 산출된 화학적 성분들의 중량 분율에 근거하여, 하기 [수학식 3]을 통해 정수 조건을 만족하도록 화학적 성분을 산출하는 것을 특징으로 하는 화학적 성분 분석 장치.

[수학식 3]

$$n_i = \frac{w_i}{(1 - \sum_{j=1}^{N-1} w_j) A_i} n_N \in I$$

여기서, I는 정수 그룹이고, 상기 어느 재료가 N개의 화학적 성분으로 구성되며(Z=1, 2, ..., N-1, N), w_i는 i 번째 요소의 중량 분율, A_i는 i번째 요소의 원자량, n_i는 i번째 요소의 공식 단위의 수임.

청구항 19

제 18 항에 있어서,

상기 [수학식 3]은,

N번째 화학적 성분이 가장 작은 중량 분율을 갖는 것을 특징으로 하는 화학적 성분 분석 장치.

청구항 20

제 18 항에 있어서,

상기 제어부는,

상기 정수 조건을 만족하는 화학적 성분의 이론적 질량감쇠계수와 상기 이미지에서 측정된 질량감쇠계수의 차이가 일정범위 이내인지 여부를 판단하는 것을 특징으로 하는 화학적 성분 분석 장치.

청구항 21

제 12 항에 있어서,

상기 제어부는,

산출된 화학적 성분에 대한 촬영이 강화된 촬영모드로 상기 어느 재료를 촬영하는 것을 특징으로 하는 화학적 성분 분석 장치.

청구항 22

제 21 항에 있어서,

상기 제어부는,

상기 화학적 성분을 기반으로 영상의 노이즈를 제거하는 것을 특징으로 하는 화학적 성분 분석 장치.

청구항 23

하드웨어인 컴퓨터와 결합되어, 제1항 내지 제11항의 방법을 수행하도록 컴퓨터에서 판독가능한 기록매체에 저장된 컴퓨터 프로그램.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 화학적 성분 분석 장치 및 화학적 성분 분석 방법에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 오늘날, 화학제(chemical agent)의 간접검사인 원격 식별과, 방출 분광분석법(emission spectroscopy)을 이용하여 그것들의 농도를 결정하는 기술은 가스 형태의 샘플에 대해서는 거의 성공적이라고 할 수 있다. 방출 분광 분석법은 대체로 이와 같은 목적으로 적용된다. 가스 형태의 혼합물에 대한 방출 스펙트럼을 분석함으로써, 연구대상 기체의 용적 내에 존재하는 화학물질이 무엇인지 그리고, 어느 정도의 농도로 존재하는지를 거의 확실하게 알 수 있다.

[0003] 이와 같은 방출 분광분석법은 C60 및 C70과 같은 거대분자에 대해서는 잘 분석될 수 있지만, DNA 성분에서 폴리 사이클릭(polycyclic) 방향족 탄화수소까지의 범위에 해당하는 족들에 대해서는 제대로 분석되지 않는다. 이러한 분자들에 대해, 고체는 약 200-300°C로 가열되어야 하며, 증기로부터의 방출은 적외선 영역에서 훨씬 우수한 스펙트럼을 제공한다.

[0004] IR 방출 분광분석법은 가스들이 단순하고, 밝고, 선밀도가 좋은 식별력있는 IR 스펙트럼이며, 낮은 연속 배경을 가지기 때문에 잘 분석할 수 있는 것이다. 그러나, IR 방출 분광분석법을 농축된 물질에 적용한 경우에는 제대로 분석되지 않는다.

[0005] 무엇보다도, 액체 및 고체의 IR 스펙트럼은 복잡하며, 연속적인 모양을 가지고 있다. IR 방출 분광분석법이 제대로 적용되지 않는 이유는, 물질과 방사선 사이에 열평형이 달성된 두꺼운 샘플들에 대하여, 산재하는 다수의 적외선 광자들이 방사체의 온도에만 의존하는, 별다른 특징이 없는 흑체 스펙트럼으로 귀착된다는 사실에 기인한다. 또한, 농 축된 상(phase)에 대해 피크치의 강도는 가스들에 비해서 훨씬 더 낮으며 더 넓다. 따라서, 샘플이 많은 구성요소를 포함하고 있다면, 자체 방출 스펙트럼을 분석함으로써 각각의 성분의 존재 및 농도를 찾아낸다는 것은 매우 어려울 것이다. 이 경우, 샘플의 분석에 복잡한 수학적 모델링과 교정(calibration)이 사용되어야 하기 때문이다.

[0006] 이러한 접근법을 실제로 응용한 몇가지 예가 있다. 그러한 접근법들의 대부분은 얇은 필름, 입자, 또는 고체 판(substrate) 상의 얇은 층에 관계된다. 두꺼운 샘플에 대하여, 산재하는 다수의 적외선 광자들은 거의 특징이 없는 흑체 스펙트럼으로 귀착된다.

[0007] 최근에, 이와 같은 방출 분광분석법을 반도체산업에 응용하기 위한 기술이 개발되었다. 예를 들면, New Mexico USA 대학의 T.Niemczyk는 칩전물을 처리하는 동안 실리콘 모니터 웨이퍼 상의 붕인규산 유리(borophosphosilicate glass)의 얇은 필름의 분광분석을 위한 방출 분광분석법을 개발하였다. Partial Least Square(PLS) 분석 및 교정 샘플의 방출 스펙트럼을 사용함으로써, 붕소 및 인에 대해 0.1%보다 더 좋은 정확도로 이러한 필름들의 구성을 결정하는 것이 가능하게 되었다.

[0008] 흡수된 종류들의 연구에 IR 방출 분광분석법을 적용하는 몇 가지 다른 예들이 문헌상으로 발견된다. 백금의 싱글 크리스탈 표면상에 흡수된 일산화탄소 및 C6D6분자들로부터의 방출 스펙트럼은 매우 낮은 온도로 조작되는, 공지된 기구인 FTIR에 적용되어 사용된다. 흡수된 종류들의 IR 방출 및 높여진 온도에서의 표면함수 그룹들은 종래의 분광 분석기에 적용되어 사용되며, 이 방법은 촉매내의 연구에 적용된다.

[0009] 용액성분의 간접검사에 의한 식별방법은 특히 의학분야에서 매우 중요하다. 의학분야에서는 매우 다른 방법들이 사용된다. 그 방법들은 주로 근적외선, 중적외선, 라만, 광 음향학, 전파 등의 분광분석적 방법들이 다르다. 이러한 방법들은 안정된 시간 파라미터를 가지는 추출된 액체에 적용될 때 잘 분석할 수 있다. 그러나, 생체조직을 측정할 경우에는 많은 문제들에 직면하게 된다. 예를 들면, 글루코스 또는 콜레스테롤 급의 생체조직을 측정하기 위한 견고한 간접검사 기기는 아직 개발된 바가 없다. 이러한 문제들의 특성은 주로 실제의 섬유조직의 복잡성, 비균질성, 온도의 불안정성, 및 많은 파라미터의 시간을 가지는 경향에 기인한다. 이러한 문제들을 다루

기 위해서는 Partial-Least-Squares(PLS), Artificial Neural Networks(ANN), 또는 Hybrid Linear Analysis(HLA) 같은 복잡한 수학적 모델링 및 알고리즘이 사용되어야 한다. 그러나, 이러한 방법들 모두가 지금 까지 만족스러운 결과를 가져다 준 것은 아니다. 이와 같은 경우에 차동 분석 방법은 제대로 분석되지 않는다.

발명의 내용

해결하려는 과제

- [0010] 본 발명이 해결하고자 하는 과제는 최적화된 방법으로 어느 재료를 구성하는 화학적 성분을 산출하는 것이 가능한 화학적 성분 장치 및 그것의 제어방법을 제공하는 것이다.
- [0011] 본 발명이 해결하고자 하는 과제들은 이상에서 언급된 과제로 제한되지 않으며, 언급되지 않은 또 다른 과제들은 아래의 기재로부터 통상의 기술자에게 명확하게 이해될 수 있을 것이다.

과제의 해결 수단

- [0012] 상술한 과제를 해결하기 위한 본 발명의 일 면에 따른 화학적 성분 분석 방법은, 이중 에너지 엑스선을 어느 재료에 조사하여 이미지를 획득하고, 획득된 이미지에서 질량감쇠계수를 측정하는 단계; 목적함수의 최소화 및 정수 조건을 기반으로 상기 어느 재료에 대한 화학적 성분을 산출하는 단계; 상기 질량감쇠계수 및 화학적 성분을 이용하여 질량대비 함량비를 산출하는 단계; 및 상기 화학적 성분 및 함량비를 이용하여 유효 원자 번호를 산출하는 단계를 포함한다.
- [0013] 실시 예에 있어서, 상기 질량감쇠계수를 측정하는 단계는, 서로 다른 에너지를 갖는 엑스선을 상기 어느 재료에 조사하여 각 에너지별로 상기 어느 재료에 대한 질량감쇠계수를 측정하는 것을 특징으로 한다.
- [0014] 실시 예에 있어서, 상기 질량감쇠계수를 측정하는 단계는, 제1 에너지를 갖는 엑스선을 상기 어느 재료에 조사하여 상기 제1 에너지에 대한 질량감쇠계수를 측정하고, 상기 제1 에너지와 다른 제2 에너지를 갖는 엑스선을 상기 어느 재료에 조사하여, 상기 제2 에너지에 대한 질량감쇠계수를 측정하는 것을 특징으로 한다.
- [0015] 실시 예에 있어서, 상기 화학적 성분을 산출하는 단계는, 서로 다른 에너지를 통해 측정된 질량감쇠계수를 이용하여 상기 어느 재료를 구성하는 화학적 성분들의 질량감쇠계수를 산출하고, 화학적 성분들의 질량감쇠계수들을 이용하여 상기 화학적 성분들의 중량 분율을 산출하는 것을 특징으로 한다.
- [0016] 실시 예에 있어서, 상기 화학적 성분을 산출하는 단계는, 상기 산출된 화학적 성분들의 중량 분율에 근거하여, 정수 조건을 만족하도록 화학적 성분을 산출하는 것을 특징으로 한다.
- [0017] 실시 예에 있어서, 상기 정수 조건을 만족하는 화학적 성분의 이론적 질량감쇠계수와 상기 이미지에서 측정된 질량감쇠계수의 차이가 일정범위 이내인지 여부를 판단하는 단계를 더 포함한다.
- [0018] 실시 예에 있어서, 산출된 화학적 성분에 대한 촬영이 강화된 촬영모드로 상기 어느 재료를 촬영하는 단계를 더 포함한다.
- [0019] 실시 예에 있어서, 상기 촬영하는 단계는, 상기 화학적 성분을 기반으로 영상의 노이즈를 제거하는 것을 특징으로 한다.
- [0020] 본 발명의 다른 실시 예에 따른 화학적 성분 분석 장치는, 이중 에너지 엑스선을 어느 재료에 조사하여 이미지를 획득하고, 획득된 이미지에서 질량감쇠계수를 측정하는 질량감쇠계수 측정부; 및 목적함수의 최소화 및 정수 조건을 기반으로 화학적 성분을 산출하고, 상기 질량감쇠계수 및 화학적 성분을 이용하여 질량대비 함량비를 산출하며, 상기 화학적 성분 및 함량비를 이용하여 유효 원자 번호를 산출하는 제어부를 포함한다.
- [0021] 실시 예에 있어서, 상기 질량감쇠계수 측정부는, 서로 다른 에너지를 갖는 엑스선을 상기 어느 재료에 조사하여 각 에너지별로 상기 어느 재료에 대한 질량감쇠계수를 측정하는 것을 특징으로 한다.
- [0022] 실시 예에 있어서, 상기 질량감쇠계수 측정부는, 제1 에너지를 갖는 엑스선을 상기 어느 재료에 조사하여 상기 제1 에너지에 대한 질량감쇠계수를 측정하고, 상기 제1 에너지와 다른 제2 에너지를 갖는 엑스선을 상기 어느 재료에 조사하여, 상기 제2 에너지에 대한 질량감쇠계수를 측정하는 것을 특징으로 한다.
- [0023] 실시 예에 있어서, 상기 제어부는, 서로 다른 에너지를 통해 측정된 질량감쇠계수를 이용하여 상기 어느 재료를 구성하는 화학적 성분들의 질량감쇠계수를 산출하고, 화학적 성분들의 질량감쇠계수들을 이용하여 상기 화학적

성분들의 중량 분율을 산출하는 것을 특징으로 한다.

- [0024] 실시 예에 있어서, 상기 제어부는, 상기 정수 조건을 만족하는 화학적 성분의 이론적 질량감쇠계수와 상기 이미지에서 측정된 질량감쇠계수의 차이가 일정범위 이내인지 여부를 판단하는 것을 특징으로 한다.
- [0025] 실시 예에 있어서, 상기 제어부는, 산출된 화학적 성분에 대한 촬영이 강화된 촬영모드로 상기 어느 재료를 촬영하는 것을 특징으로 한다.
- [0026] 실시 예에 있어서, 상기 제어부는, 상기 화학적 성분을 기반으로 영상의 노이즈를 제거하는 것을 특징으로 한다.
- [0027] 이 외에도, 본 발명을 구현하기 위한 다른 방법, 다른 시스템 및 상기 방법을 실행하기 위한 컴퓨터 프로그램을 기록하는 컴퓨터 판독 가능한 기록 매체가 더 제공될 수 있다.
- [0028] 본 발명의 기타 구체적인 사항들은 상세한 설명 및 도면들에 포함되어 있다.

발명의 효과

- [0029] 본 발명에 따르면, 기존 스펙트럼/단일 엑스레이 장치를 사용하여 측정된 감쇠 계수 값을 본 발명에서 제시하는 화학적 원소 분석 알고리즘에 적용하여, 비용적인 부담이 큰 하드웨어 설계보다는 저비용의 소프트웨어 개발 및 검증 과정을 거쳐 제품화 할 수 있으며, 의료분야 등 시장 및 적용 분야에 따라 유동적으로 알고리즘의 변경/보완이 용이하다.
- [0030] 본 발명의 효과들은 이상에서 언급된 효과로 제한되지 않으며, 언급되지 않은 또 다른 효과들은 아래의 기재로부터 통상의 기술자에게 명확하게 이해될 수 있을 것이다.

도면의 간단한 설명

- [0031] 도 1은 본 발명의 일 실시 예에 따른 화학적 성분 분석 장치를 설명하기 위한 개념도이다.
- 도 2는 본 발명의 일 실시 예에 따른 화학적 성분 분석 방법을 설명하기 위한 흐름도이다.
- 도 3은 도 2에서 살펴본 방법을 설명하기 위한 개념도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0032] 본 발명의 이점 및 특징, 그리고 그것들을 달성하는 방법은 첨부되는 도면과 함께 상세하게 후술되어 있는 실시예들을 참조하면 명확해질 것이다. 그러나, 본 발명은 이하에서 개시되는 실시예들에 제한되는 것이 아니라 서로 다른 다양한 형태로 구현될 수 있으며, 단지 본 실시예들은 본 발명의 개시가 완전하도록 하고, 본 발명이 속하는 기술 분야의 통상의 기술자에게 본 발명의 범주를 완전하게 알려주기 위해 제공되는 것이며, 본 발명은 청구항의 범주에 의해 정의될 뿐이다.
- [0033] 본 명세서에서 사용된 용어는 실시예들을 설명하기 위한 것이며 본 발명을 제한하고자 하는 것은 아니다. 본 명세서에서, 단수형은 문구에서 특별히 언급하지 않는 한 복수형도 포함한다. 명세서에서 사용되는 "포함한다(comprises)" 및/또는 "포함하는(comprising)"은 언급된 구성요소 외에 하나 이상의 다른 구성요소의 존재 또는 추가를 배제하지 않는다. 명세서 전체에 걸쳐 동일한 도면 부호는 동일한 구성 요소를 지칭하며, "및/또는"은 언급된 구성요소들의 각각 및 하나 이상의 모든 조합을 포함한다. 비록 "제1", "제2" 등이 다양한 구성요소들을 서술하기 위해서 사용되나, 이들 구성요소들은 이들 용어에 의해 제한되지 않음은 물론이다. 이들 용어들은 단지 하나의 구성요소를 다른 구성요소와 구별하기 위하여 사용하는 것이다. 따라서, 이하에서 언급되는 제1 구성요소는 본 발명의 기술적 사상 내에서 제2 구성요소일 수도 있음은 물론이다.
- [0034] 다른 정의가 없다면, 본 명세서에서 사용되는 모든 용어(기술 및 과학적 용어를 포함)는 본 발명이 속하는 기술 분야의 통상의 기술자에게 공통적으로 이해될 수 있는 의미로 사용될 수 있을 것이다. 또한, 일반적으로 사용되는 사전에 정의되어 있는 용어들은 명백하게 특별히 정의되어 있지 않는 한 이상적으로 또는 과도하게 해석되지 않는다.
- [0035] 이하, 첨부된 도면을 참조하여 본 발명의 실시예를 상세하게 설명한다.
- [0036] 설명에 앞서 본 명세서에서 사용하는 용어의 의미를 간략히 설명한다. 그렇지만 용어의 설명은 본 명세서의 이해를 돕기 위한 것이므로, 명시적으로 본 발명을 한정하는 사항으로 기재하지 않은 경우에 본 발명의 기술적 사

상을 한정하는 의미로 사용하는 것이 아님을 주의해야 한다.

- [0037] 본 명세서에서 '화학적 성분 분석 장치'는 연산처리를 수행하여 사용자에게 결과를 제공할 수 있는 다양한 장치들이 모두 포함된다. 예를 들어, '화학적 성분 분석 장치'는 데스크 탑 PC, 노트북(Note Book) 뿐만 아니라 스마트폰(Smart phone), 태블릿 PC, 셀룰러폰(Cellular phone), 피씨에스폰(PCS phone; Personal Communication Service phone), 동기식/비동기식 IMT-2000(International Mobile Telecommunication-2000)의 이동 단말기, 팜 PC(Palm Personal Computer), 개인용 디지털 보조기(PDA; Personal Digital Assistant) 등도 해당될 수 있다.
- [0038] 또한, '화학적 성분 분석 장치'는 클라이언트로부터 요청을 수신하여 정보처리를 수행하는 서버와 통신을 수행할 수 있다.
- [0039] 본 발명의 일 실시 예에 따른 화학적 성분 분석 장치는, 도 1에서 설명하는 구성요소들 중 적어도 하나를 포함하도록 구현될 수 있다.
- [0040] 도 1은 본 발명의 일 실시 예에 따른 화학적 성분 분석 장치를 설명하기 위한 개념도이다.
- [0041] 도 1을 살펴보면, 본 발명의 화학적 성분 분석 장치(100)는, 질량감쇠계수 측정부(110), 메모리(120), 제어부(130)를 포함할 수 있다.
- [0042] 질량감쇠계수 측정부(110)는, 이중 에너지 엑스선을 어느 재료(샘플)에 조사하여 이미지를 획득하고, 획득된 이미지에서 질량감쇠계수를 측정할 수 있다.
- [0043] 이중 에너지 엑스선은, 두 개의 서로 다른 에너지를 갖는 X-ray(X선) 또는 감마선을 포함할 수 있다.
- [0044] 질량감쇠계수 측정부는, 이중 에너지 스펙트럼의 단일 엑스레이를 이용하여, 어느 재료의 화학적 성분을 분석할 수 있다.
- [0045] 이를 위해, 상기 질량감쇠계수 측정부(110)는, 서로 다른 에너지를 조사하는 엑스선 출력부, 출력된 엑스선을 센싱하는 이미지 센서를 포함할 수 있다.
- [0046] 본 명세서에서는, 이중 에너지 엑스선을 조사하여 이미지를 획득하고 해당 이미지에서 질량감쇠계수를 측정하는 것으로 설명하나, 이에 한정되지 않는다.
- [0047] 즉, 본 발명의 질량감쇠계수 측정부(110)는, 어느 재료에 이중 에너지 엑스선을 조사하고, 어느 재료를 통과된 엑스선의 강도를 측정하여, 질량감쇠계수를 측정할 수도 있다.
- [0048] 메모리(120)는, 심혈관 질환 정보 수집부(110) 및 제어부(130)에서 생성/관리된 데이터, 이미지, 각종 정보 및 응용 프로그램 등을 저장하도록 형성될 수 있다.
- [0049] 메모리(120)는, 제어부(130)와 전기적으로 연결된다. 메모리(120)는 유닛에 대한 기본데이터, 유닛의 동작제어를 위한 제어데이터, 입출력되는 데이터를 저장할 수 있다. 메모리(120)는, 하드웨어적으로, ROM, RAM, EPROM, 플래시 드라이브, 하드 드라이브 등과 같은 다양한 저장기기 일 수 있다. 메모리(120)는 제어부(130)의 처리 또는 제어를 위한 프로그램 등, 이미지 분류 장치(100) 전반의 동작을 위한 다양한 데이터를 저장할 수 있다.
- [0050] 제어부(130)는 응용 프로그램과 관련된 동작 외에도, 통상적으로 이미지 분류 장치(100)의 전반적인 동작을 제어한다. 제어부(130)는 위에서 살펴본 구성요소들을 통해 입력 또는 출력되는 신호, 데이터, 정보 등을 처리하거나 메모리에 저장된 응용 프로그램을 구동함으로써, 사용자에게 적절한 정보 또는 기능을 제공 또는 처리할 수 있다.
- [0051] 이하에서는, 어느 재료를 구성하는 화학적 성분을 산출하는 방법에 대하여 첨부된 도면을 참조하여 보다 구체적으로 살펴보기로 한다.
- [0052] 도 2는 본 발명의 일 실시 예에 따른 화학적 성분 분석 방법을 설명하기 위한 흐름도이다.
- [0053] 도 2를 참조하면, 화학적 성분 분석 장치는, 이중 에너지 엑스선을 어느 재료에 조사하여 이미지를 획득하고, 획득된 이미지에서 질량감쇠계수를 측정할 수 있다(S210).
- [0054] 구체적으로, 질량감쇠계수를 측정부(110)는, 서로 다른 에너지를 갖는 엑스선을 상기 어느 재료에 조사하여 각 에너지별로 상기 어느 재료에 대한 질량감쇠계수를 측정할 수 있다.
- [0055] 또한, 질량감쇠계수 측정부(110)는, 제1 에너지를 갖는 엑스선을 상기 어느 재료에 조사하여 상기 제1 에너지에 대한 질량감쇠계수를 측정하고, 상기 제1 에너지와 다른 제2 에너지를 갖는 엑스선을 상기 어느 재료에 조사하

여, 상기 제2 에너지에 대한 질량감쇠계수를 측정할 수 있다.

- [0056] 화학적 성분 분석 장치는, 정수 조건을 기반으로, 상기 어느 재료에 대한 화학적 성분을 산출할 수 있다(S220).
- [0057] 화학적 성분 분석 장치는, 목적함수의 최소화 및 정수 조건을 기반으로, 상기 어느 재료에 대한 화학적 성분을 산출할 수 있다.
- [0058] 화학적 성분 분석 장치는, 상기 질량감쇠계수 및 화학적 성분을 이용하여 질량대비 함량비를 산출하고, 상기 화학적 성분 및 함량비를 이용하여 유효 원자 번호를 산출할 수 있다(S230, S240).
- [0059] 어느 재료 x를 구성하는 N개의 화학적 구성은, 하기 [수학식 1]과 같이 선형 조합으로 확장될 수 있다.

수학식 1

$$\begin{pmatrix} \mu \\ \rho \end{pmatrix}_x = \sum_{i=1}^N w_i \begin{pmatrix} \mu \\ \rho \end{pmatrix}_i$$

- [0060]
- [0061] 여기서, w_i 는 i번째 요소(element)의 중량 분율이고, $(\mu/\rho)_i$ 는 i번째 요소의 질량감쇠계수이다.
- [0062] 상기 w_i 는 하기 [수학식 2]로 정의될 수 있다.

수학식 2

$$w_i = \frac{n_i A_i}{\sum_i n_i A_i}$$

- [0063]
- [0064] 여기서, 상기 n_i 는 공식 단위의 수, A_i 는 i번째 요소의 원자량, 는 어느 재료의 원자 질량이다.
- [0065] 제어부(130)는, 서로 다른 에너지를 갖는 엑스선을 상기 어느 재료에 조사하여 각 에너지별로 상기 어느 재료에 대한 질량감쇠계수를 측정하도록 질량감쇠계수 측정부(110)를 제어할 수 있다.
- [0066] 예를 들어, 상기 질량감쇠계수 측정부(110)는, 제1 에너지를 갖는 엑스선을 상기 어느 재료에 조사하여 상기 제1 에너지에 대한 질량감쇠계수를 측정하고, 상기 제1 에너지와 다른 제2 에너지를 갖는 엑스선을 상기 어느 재료에 조사하여, 상기 제2 에너지에 대한 질량감쇠계수를 측정할 수 있다.
- [0067] 일 예로, 서로 다른 두 에너지(E_1, E_2)와, 2개의 성분으로 어느 재료x가 이루어졌다고 가정하면, 상기 [수학식 1]은 하기의 수학식 3으로 표현될 수 있다.

수학식 3

$$\begin{aligned} \mu_x(E_1) &= w \cdot \mu_1(E_1) + (1 - w) \cdot \mu_2(E_1) \\ \mu_x(E_2) &= w \cdot \mu_1(E_2) + (1 - w) \cdot \mu_2(E_2) \end{aligned}$$

- [0068]
- [0069] 여기서, 질량감쇠계수 μ/ρ 는 감쇠계수 μ 로 단순화될 수 있으며, 감쇠계수 μ 는 0에서 1 사이에 존재할 수 있다.
- [0070] 상기 수학식 3을 풀면, 중량 분율 w는 하기의 수학식 4를 만족할 수 있다.

수학식 4

$$0 \leq w = \frac{\Delta\mu_2 - \Delta\mu_x}{\Delta\mu_2 - \Delta\mu_1} \leq 1$$

[0071]

[0072] 상기 수학식 4를 상기 수학식 3으로 대체하면, 다음의 수학식 5와 같을 수 있다.

수학식 5

$$\alpha \cdot \Delta\mu_2 + \beta \cdot \mu_2 - \gamma = 0 \quad \text{with} \quad \begin{cases} \alpha = \mu_x - \mu_1 \\ \beta = \Delta\mu_x \cdot \mu_1 - \Delta\mu_1 \cdot \mu_x \\ \gamma = \Delta\mu_x - \Delta\mu_1 \end{cases}$$

[0073]

[0074] 여기서, Δ(delta)는 다른 에너지에서 측정된 질량감쇠계수의 차이를 의미할 수 있으며, 일 예로 다음과 같을 수 있다.

$$\Delta\mu_x = \mu_x(E_1) - \mu_x(E_2)$$

[0075]

[0076] 또한, 어느 재료에 대한 질량감쇠계수 μ_x와 상기 재료에 포함된 제1 물질(즉, 제1 화학적 성분)에 대한 질량 감쇠계수 μ₁는 각 에너지에서 잘 알려진 값일 수 있다.

[0077] 이에 따라, 제어부(130)는, 상기 수식 5를 제2 화학적 성분 μ₂에 대하여 풀 수 있다.

[0078] 즉, 제어부(130)는, 서로 다른 에너지(E1, E2)를 통해 측정된 질량감쇠계수를 이용하여 어느 재료를 구성하는 화학적 성분들의 질량감쇠계수(μ₁, μ₂)를 산출하고, 화학적 성분들의 질량감쇠계수들을 이용하여 화학적 성분들의 중량 분율을 산출할 수 있다.

[0079] 질량감쇠계수들을 이용하여 상기 화학적 성분들의 중량 분율(w)을 산출하는 것은, 수식 4가 이용될 수 있다.

[0080] 제어부(130)는, 상기 수학식 5를 다음의 수학식 6과 같이, 함수로 설정할 수 있다.

수학식 6

$$f(z) \equiv \alpha \cdot \Delta\mu_2 + \beta \cdot \mu_2 - \gamma$$

[0081]

[0082] 이상적으로, f(z)는 상기 수학식 5에서 살핀 바와 같이, 0이어야 한다.

[0083] 그러나, 대부분의 경우, f(z)²는 이미지의 노이즈와 측정의 불확실성으로 인해 0이 아니다.

[0084] 이에 따라, 함수 f(z)²는 물질 2(즉, 어느 재료를 구성하는 화학적 성분 2)를 찾기 위해 최소화를 위한 객체 함수가 될 수 있다. 상기 객체 함수는, 앞서 설명한 목적 함수일 수 있다.

[0085] 여기서, 시험 재료 1(화학적 성분 1)(trial material 1)은 시험 재료 2((화학적 성분 2) (trial material 2)가 존재하는 조건에서 결정되어야 한다.

[0086] 그러나, 상기 객체 함수의 최소화를 수행하는 경우, 화학적 성분 2의 유효 원자 번호(effective Z, Z_{eff})가 정수가 아닐 수 있으며(예를 들어, Z=3.78), 이는 상기 객체 함수가 양의 정수가 아닌 실수인 Z의 연속 함수이기

때문이다.

- [0087] 또한, 객체 함수(즉 목적 함수)의 최소화를 수행하는 경우, 복수의 답이 존재하므로, 거부 알고리즘이나 조건이 필요하게 된다.
- [0088] 이에 따라, 본 발명의 화학적 성분 분석 장치의 제어부(130)는, 정수 조건(integer condition)에 기반하여, 화학적 성분을 산출할 수 있다.
- [0089] 구체적으로, 앞서 살펴본 객체 함수 $f(z)^2$ 의 최소화를 통해, 앞서 살펴본 수식 4의 중량 분율 및 화학적 구성의 복수의 솔루션을 제공할 수 있다.
- [0090] 이 때, 일 예로, 제어부(130)는, 중량 분율이 각각 0.111과 0.888인 H와 O를 결정할 수 있다.
- [0091] 제어부(130)는, 산출된 화학적 성분들의 중량 분율에 근거하여, 다음의 수학적 식 7을 통해 정수 조건을 만족하도록 화학적 성분을 산출할 수 있다.

수학적 식 7

$$n_i = \frac{w_i}{(1 - \sum_{j=1}^{N-1} w_j)A_i} n_N \in I$$

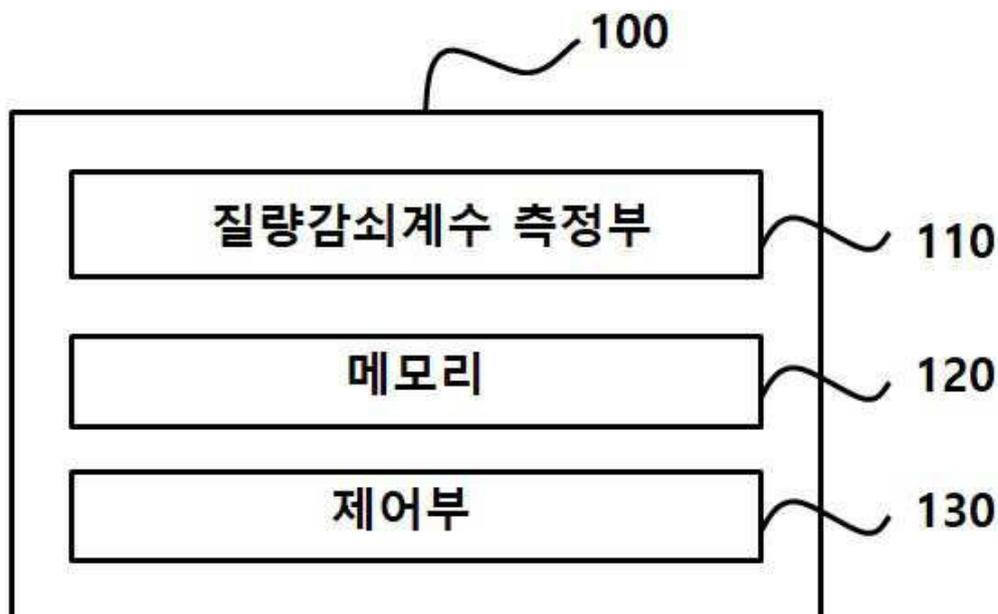
- [0092]
- [0093] 여기서, I는 정수 그룹이고, 상기 어느 재료가 N개의 화학적 성분으로 구성되며($Z=1, 2, \dots, N-1, N$), w_i 는 i 번째 요소의 중량 분율, A_i 는 i 번째 요소의 원자량, n_i 는 i 번째 요소의 공식 단위의 수(the number of formula units)이다.
- [0094] 또한, 상기 수식 7은, N번째 화학적 성분이 가장 작은 중량 분율을 가질 수 있다.
- [0095] 이러한 정수 조건은, 매우 엄격하여, 대부분의 여러 솔루션을 거부할 수 있다. 즉, 정수 조건을 이용하면, 본 발명에서는 보다 정확하게 어느 재료의 화학적 성분을 산출할 수 있다.
- [0096] 상기 정수 조건에 의해, H의 수가 정수 2여야 하는 H₂O의 화학적 표현을 결정할 수 있으며, 계산 절차에서 그 숫자는 실수(real number)가 될 수 있다.
- [0097] 또한, 본 발명은, 계산에서 이러한 정수 수의 화학 성분을 기반으로 감쇠를 계산하여 X-선 이미지에서 측정된 감쇠 값을 비교하고 3 % 차이 이내의 값을 허용할 수 있다(약 ~ 5 개의 용액을 얻었으며 최상의 솔루션은 0.5 % 이내임).
- [0098] 도 3을 참조하면, 제어부(130)는, 질량감쇠계수를 상기 수식 1에 대입하여, 화학적 성분(Element1, ..., n)과 각 성분의 중량 분율(w_1, w_2, \dots, w_n)을 산출할 수 있다.
- [0099] 이후, 앞서 설명한 것과 같이, 객체 함수의 최소화를 통해 복수의 셋(set)이 산출되는 경우(Multiple set of n atomic elements), 제어부(130)는, 정수 조건에 기반하여 화학적 성분을 결정(필터링)할 수 있다(Filtering by integer condition).
- [0100] 이후, 제어부(130)는, 상기 정수 조건을 만족하는 화학적 성분의 이론적 질량감쇠계수와 상기 이미지에서 측정된 질량감쇠계수의 차이가 일정범위 이내인지 여부를 판단할 수 있다(<1% difference with input attenuations).
- [0101] 이후, 상기 차이가 일정범위 이내인 경우, 제어부(130)는, 상기 질량감쇠계수 및 화학적 성분을 이용하여 질량 대비 함량비를 산출하고, 상기 화학적 성분 및 함량비를 이용하여 유효 원자 번호를 산출할 수 있다.
- [0102] 상기 질량대비 함량비는, 앞서 설명한 중량 분율(w)일 수 있다.
- [0103] 여기서, 유효 원자 번호(Z_{eff})는, 주어진 물질(어느 재료)에 대해 이의 구성물의 원자번호를 무게에 대해서 평균한 것을 의미한다.
- [0104] 평균화에 사용되는 무게는 목적에 따라 다르나 방사선 공학에서는 문제로 하고 있는 방사선과의 상호작용의 원

자번호에 의한 차이를 고려해서 정해진다.

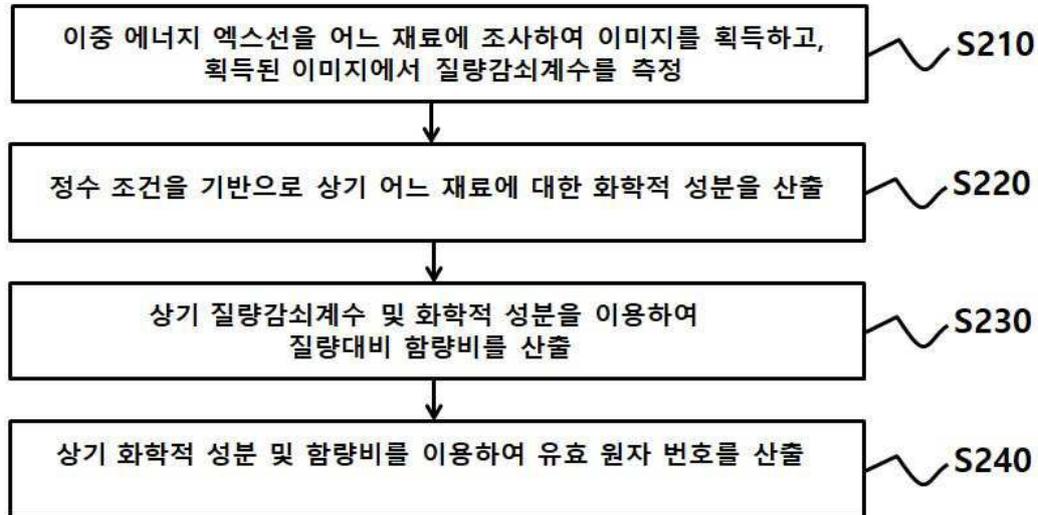
- [0105] 또한, 제어부(130)는, 이러한 방법을 통해 산출된 화학적 성분을 이용하여 다양한 기능을 수행할 수 있다.
- [0106] 예를 들어, 제어부(130)는, 산출된 화학적 성분 및 유효 원자 번호를 이용하여, 중입자치료 시 선량계산에 적용하거나, 의료 영상의 특정 화학성분을 강화한 영상을 얻어 더 많은 의료 정보를 획득할 수 있다.
- [0107] 예를 들어, 제어부(130)는, 대사에 사용되는 C, H, O의 함량을 강화하여 암세포를 검출할 수 있다.
- [0108] 즉, 제어부(130)는, 산출된 화학적 성분 에 대한 촬영이 강화된 촬영모드로 어느 재료를 촬영할 수 있다. 이를 위해, 본 발명은 어느 재료를 촬영하기 위한 카메라가 더 구비될 수 있다.
- [0109] 또한, 제어부(130)는, 화학적 성분을 기반으로 영상의 노이즈를 제거할 수도 있다.
- [0110] 본 발명에 따르면, 기존 스펙트럼/단일 엑스레이 장치를 사용하여 측정된 감쇄 계수 값을 본 발명에서 제시하는 effective Z 산출 알고리즘에 적용하여, 비용적인 부담이 큰 하드웨어 설계보다는 저비용의 소프트웨어 개발 및 검증 과정을 거쳐 제품화 할 수 있으며, 시장 및 적용 분야에 따라 유동적으로 알고리즘의 변경/보완이 용이하다.
- [0111] 본 발명의 효과들은 이상에서 언급된 효과로 제한되지 않으며, 언급되지 않은 또 다른 효과들은 아래의 기재로부터 통상의 기술자에게 명확하게 이해될 수 있을 것이다.
- [0112] 본 발명의 실시예와 관련하여 설명된 방법 또는 알고리즘의 단계들은 하드웨어로 직접 구현되거나, 하드웨어에 의해 실행되는 소프트웨어 모듈로 구현되거나, 또는 이들의 결합에 의해 구현될 수 있다. 소프트웨어 모듈은 RAM(Random Access Memory), ROM(Read Only Memory), EPROM(Erasable Programmable ROM), EEPROM(Electrically Erasable Programmable ROM), 플래시 메모리(Flash Memory), 하드 디스크, 착탈형 디스크, CD-ROM, 또는 본 발명이 속하는 기술 분야에서 잘 알려진 임의의 형태의 컴퓨터 판독가능 기록매체에 상주할 수도 있다.
- [0113] 이상, 첨부된 도면을 참조로 하여 본 발명의 실시예를 설명하였지만, 본 발명이 속하는 기술분야의 통상의 기술자는 본 발명이 그 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로, 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며, 제한적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

도면

도면1



도면2



도면3

