



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2022년06월10일
(11) 등록번호 10-2407112
(24) 등록일자 2022년06월03일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
G01N 30/86 (2006.01) G01N 30/72 (2006.01)
G01N 30/88 (2006.01) G06N 3/08 (2006.01)
G16C 20/70 (2019.01)
(52) CPC특허분류
G01N 30/8693 (2013.01)
G01N 30/72 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2020-0080530
(22) 출원일자 2020년06월30일
심사청구일자 2020년06월30일
(65) 공개번호 10-2022-0001972
(43) 공개일자 2022년01월06일
(56) 선행기술조사문헌
KR1020190054994 A*

(73) 특허권자
울산과학기술원
울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50
(72) 발명자
조경화
울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50
전준호
경상남도 창원시 의창구 창원대학교 20 창원대학교 공과대학 제52호관 316호
(74) 대리인
오위환, 나성근, 정기택

(뒷면에 계속)

전체 청구항 수 : 총 16 항

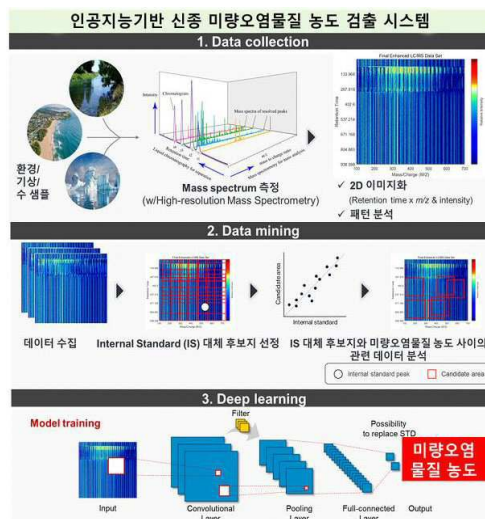
심사관 : 김기환

(54) 발명의 명칭 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치 및 방법

(57) 요약

본 발명은 내부표준물질 없이도 환경시료의 미량오염물질 농도 측정 정확도를 향상시킬 수 있도록 한 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치 및 방법에 관한 것으로, 고해상도 질량분석기에서 산출된 High resolution mass spectrum을 기반으로 하여 데이터를 수집, 구축하고 2차원, 3차원으로 시각화하여 미량 오염 물질 DB를 구축하는 데이터 수집 및 분석부;상기 데이터 수집 및 분석부에서 분석된 경향을 기초로 내부표준물질과 유사한 변화를 보이는 특성 인자를 추출하는 변화 인자 추출부;상기 변화 인자 추출부에서 조사된 특성 인자들을 바탕으로 측정 모델을 구축하는 딥러닝 기반 측정 모델 구축부;상기 딥러닝 기반 측정 모델 구축부에서 구축된 측정 모델을 적용하여 내부표준물질 없이 환경시료의 미량오염물질의 농도를 예측하고 검증하는 측정 모델 검증부;를 포함하는 것이다.

대표도 - 도2



(52) CPC특허분류

G01N 30/8679 (2013.01)

G01N 30/88 (2020.05)

G06N 3/08 (2013.01)

G16C 20/70 (2019.02)

(72) 발명자

박종관

경상남도 창원시 의창구 창원대학로 20 창원대학교
공과대학 50호관 201호

백상수

울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50 울산과학
기술원

장지이

울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50 울산과학
기술원

(56) 선행기술조사문헌

KR1020190114241 A*

KR1020170112404 A*

KR1020200055822 A*

KR1020200071796 A*

JP2009503480 A*

US20190079050 A1*

WO2018020652 A1*

*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 1485017110

과제번호 ARQ202001348001

부처명 환경부

과제관리(전문)기관명 한국환경산업기술원

연구사업명 수생태계건강성확보기술개발사업(R&D)

연구과제명 신중 미량 오염물질 수생태계 유입 부하량 예측 기술 개발

기 여 율 1/1

과제수행기관명 울산과학기술원

연구기간 2020.04.22 ~ 2023.12.31

명세서

청구범위

청구항 1

고해상도 질량분석기에서 산출된 High resolution mass spectrum을 기반으로 하여 데이터를 수집, 구축하고 2차원, 3차원으로 시각화하여 미량 오염 물질 DB를 구축하는 데이터 수집 및 분석부;

상기 데이터 수집 및 분석부에서 분석된 경향을 기초로 내부표준물질의 변화와 유사한 특징을 보이는 특성 인자를 추출하는 변화 인자 추출부;

상기 변화 인자 추출부에서 조사된 특성 인자들을 바탕으로 측정 모델을 구축하는 딥러닝 기반 측정 모델 구축부;

상기 딥러닝 기반 측정 모델 구축부에서 구축된 측정 모델을 적용하여 내부표준물질 없이 환경시료의 미량오염물질의 농도를 예측하고 검증하는 측정 모델 검증부;를 포함하는 것을 특징으로 하는 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치.

청구항 2

제 1 항에 있어서, 상기 데이터 수집 및 분석부는 미량 오염 물질 DB를 구축하기 위하여,

기존 유해물질 모니터링을 하여 DB를 구축하는 기존 유해물질 모니터링 DB 구축부와,

신종 유해물질 모니터링을 하여 DB를 구축하는 신종 유해물질 모니터링 DB 구축부와,

미지 물질 모니터링을 하여 미지 물질 DB를 구축하는 미지 물질 DB 구축부를 포함하는 것을 특징으로 하는 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치.

청구항 3

제 1 항에 있어서, 상기 데이터 수집 및 분석부에서 구해진 High resolution mass spectrum 데이터로부터 미량 오염물질 측정에 필요한 내부물질을 대신할 후보 영역(candidate subset)을 산출하고 미량오염물질 농도와 후보 영역(candidate subset)의 3차원 Peak를 정량화 하여 비교하여 mass spectrum에서 IS 대체 후보 영역(candidate subset)을 선정하는 것을 특징으로 하는 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치.

청구항 4

제 1 항에 있어서, 상기 딥러닝 기반 측정 모델 구축부는,

상기 데이터 수집 및 분석부에서 선정된 IS 대체 후보 영역(candidate subset)과 High resolution mass spectrum, 미량오염물질 모니터링 농도 데이터를 기반으로 Convolutional Neural Network를 이용하여 미량오염물질 측정 모델 구축을 위한 모델 학습을 진행하여 IS를 사용하지 않고 Mass spectrum 만으로 미량 오염물질을 측정이 가능하도록 하는 것을 특징으로 하는 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치.

청구항 5

제 4 항에 있어서, 상기 딥러닝 기반 측정 모델 구축부는,

수질 정보 및 물질 자료를 기반으로 분석 값을 보정해 주는 모델을 만들어 내부표준물질 없이도 환경시료의 미량오염물질 농도 측정 정확도를 향상시키는 것을 특징으로 하는 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치.

청구항 6

제 1 항에 있어서, 상기 데이터 수집 및 분석부는 미량 오염 물질 DB를 구축하기 위하여,

지정된 기존의 모니터링의 결과와 유해물질 유입 가능성을 파악하여 대상지점을 설정 후 모니터링을 실시하는

대상지점 설정 모니터링부와,

현장시료를 측정 검증하여 미량 오염물질의 특성을 분석하는 현장시료 검증부와,

현장시료에서 산출된 MS 데이터를 이용하여 빅데이터로 산출하고, 산출된 데이터는 딥러닝 기반 미량오염물질 측정 및 예측 모델 구축에 이용할 수 있도록 하는 현장시료 빅데이터 생성부를 포함하는 것을 특징으로 하는 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치.

청구항 7

제 1 항에 있어서, 상기 데이터 수집 및 분석부는 추정 및 비표적 분석을 위하여,

시료 내 잔류가 예상되는 물질들에 대한 고유의 exact mass, 이온화 과정을 포함하는 추정 리스트를 작성하고,

고분해능 질량분석기를 통해 추출된 데이터로부터 추정리스트를 기반으로 한 물질들이 지니는 고유의 exact mass와 유사한 accurate mass, 동위원소 패턴 일치여부, MS/MS fragments 비교 분석 및 구조 분석 등을 통하여 대상물질을 잠정적으로 확인하는 것을 특징으로 하는 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치.

청구항 8

제 7 항에 있어서, 비표적 분석은 사전정보 없이 예상하지 못했거나 미지물질들을 확인하는 분석으로 추출된 데이터로부터 유의미한 피크를 선정한 다음 분자식을 할당하고,

해당 피크의 MS/MS fragment 데이터를 통한 비교 및 분자 구조 분석을 통하여 할당된 분자식에 대한 후보물질들 중 가장 유력한 물질을 최종적으로 확인하는 것을 특징으로 하는 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치.

청구항 9

제 8 항에 있어서, 할당된 분자식에 대한 후보물질 선정시 ChemSpider, Pubchem의 화학물질 관련 데이터베이스가 이용되고,

MS/MS fragment 비교 분석은 MassBank, mzCloud의 MS/MS fragment 데이터베이스가 이용되고,

분자 구조 분석은 metFrag 와 같은 MS/MS fragment 예측 시스템을 통하여 확인하는 것을 특징으로 하는 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치.

청구항 10

제 1 항에 있어서, 상기 딥러닝 기반 측정 모델 구축부는,

계층의 특징 추출을 위한 합성곱 계층 pooling 단계와 분류나 예측을 위한 fully-connected 단계로 구성되는 CNN을 이용하고,

입력데이터에서 내부표준물질의 변화와 유사한 특징을 보이는 부분을 CNN모델을 이용하여 추출하고,

필터의 크기, 개수, 구조, 보폭과 패딩, 활성화 함수의 요소들을 최적화하여구축된 측정 모델은 학습을 통해 후보범위들 중 내부표준물을 대체할 수 있는 부분을 찾는 것을 특징으로 하는 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치.

청구항 11

제 1 항에 있어서, 상기 데이터 수집 및 분석부는 고분해능 질량분석기를 이용한 표적분석을 표준물질을 통하여 실시하고,

표준물질을 이용한 대상물질의 정량검정곡선 작성은 0.1 ng/L에서 2,000 ng/L의 범위에 대하여 작성하고, R² 0.995 이상의 정확도를 갖도록 하고,

기기분석 간 시료 분석에 대한 정확도와 재현성을 평가하기 위하여, 대상물질의 표준물질 혼합액을 이용하여 상대표준편차(RSD, Relative standard deviation)과 check standard 분석을 통하여 평가하는 것을 특징으로 하는 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치.

청구항 12

고해상도 질량분석기에서 산출된 High resolution mass spectrum을 기반으로 하여 데이터를 수집, 구축하고 2차원, 3차원으로 시각화하여 미량 오염 물질 DB를 구축하는 데이터 수집 및 분석 단계;

분석된 경향을 기초로 내부표준물질의 변화와 유사한 특징을 보이는 특성 인자를 조사하는 인자 조사 단계;

조사된 특성 인자들을 바탕으로 측정 모델을 구축하는 단계;

적용된 측정 모델을 기반으로 내부표준물질 없이 환경시료의 미량오염물질의 농도를 예측하고 검증하는 확인 단계;를 포함하는 것을 특징으로 하는 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 방법.

청구항 13

제 12 항에 있어서, 상기 데이터 수집 및 분석 단계에서 미량 오염 물질 DB를 구축하기 위하여,

기존 유해물질 모니터링을 하여 DB를 구축하는 기존 유해물질 모니터링 DB 구축 및 신종 유해물질 모니터링을 하여 DB를 구축하는 신종 유해물질 모니터링 DB 구축 및 미지 물질 모니터링을 하여 미지 물질 DB를 구축하는 미지 물질 DB 구축을 수행하는 것을 특징으로 하는 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 방법.

청구항 14

제 12 항에 있어서, 상기 데이터 수집 및 분석 단계에서 구해진 High resolution mass spectrum 데이터로부터 미량 오염물질 측정에 필요한 내부물질을 대신할 후보 영역(candidate subset)을 산출하고 미량오염물질 농도와 후보 영역(candidate subset)의 3차원 Peak를 정량화 하여 비교하여 mass spectrum에서 IS 대체 후보 영역(candidate subset)을 선정하는 것을 특징으로 하는 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 방법.

청구항 15

제 14 항에 있어서, 상기 조사된 특성 인자들을 바탕으로 측정 모델을 구축하는 단계에서,

상기 데이터 수집 및 분석 단계에서 선정된 IS 대체 후보 영역(candidate subset)과 High resolution mass spectrum, 미량오염물질 모니터링 농도 데이터를 기반으로 Convolutional Neural Network를 이용하여 미량오염물질 측정 모델 구축을 위한 모델 학습을 진행하여 IS를 사용하지 않고 Mass spectrum만으로 미량 오염물질을 측정이 가능하도록 하는 것을 특징으로 하는 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 방법.

청구항 16

제 12 항에 있어서, 상기 조사된 특성 인자들을 바탕으로 측정 모델을 구축하는 단계에서,

계층의 특징 추출을 위한 합성곱 계층 pooling 단계와 분류나 예측을 위한 fully-connected 단계로 구성되는 CNN을 이용하고,

입력데이터에서 내부표준물질의 변화와 유사한 특징을 보이는 부분을 CNN모델을 이용하여 추출하고,

필터의 크기, 개수, 구조, 보폭과 패딩, 활성화 함수의 요소들을 최적화하여구축된 측정 모델은 학습을 통해 후보범위들 중 내부표준물을 대체할 수 있는 부분을 찾는 것을 특징으로 하는 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 방법.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 오염물질 검출에 관한 것으로, 구체적으로 내부표준물질 없이도 환경시료의 미량오염물질 농도 측정 정확도를 향상시킬 수 있도록 한 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치 및 방법에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 산업의 고도화로 유해화학물질의 종류와 사용량이 날로 증가하고 있는 반면, 현행 모니터링 시스템은 사고예방을 목적으로 설치되어 유해 화학물질에 대한 감시 체계 및 발생원에 대한 추적시스템의 기능은 실제 어려운 상

황이다.

- [0003] 전 세계적으로 246,000종 이상의 화학물질이 사용되는 것으로 알려져 있고, 국내에서 사용되는 화학물질도 4만 종 이상에 이르며, 매년 400여종의 새로운 화학물질이 수입되거나 국내에서 유통되고 있다.
- [0004] 이들 화학물질 중 중금속류, VOCs, 농약류 등은 수계로 배출되는 경우, 각종 질환과 발암, 내분비계 장애 (Endocrine Disrupters, EDs) 등 사람 건강은 물론 수생태 환경에 직, 간접적으로 커다란 위해를 줄 우려가 있기 때문에 우리나라에서는 하천, 호소 및 해역에 대한 수질환경기준을 설정하고 있으며, 이와 같은 수질기준을 달성하기 위한 수질규제기준을 설정하고 있다.
- [0005] 특히, 산업폐수의 경우에는 수질오염물질 항목 및 특정수질유해물질 항목으로 산업폐수로부터 배출될 수 있는 오염물질을 규정하고 각 항목에 대한 폐수배출허용기준을 설정하여 산업폐수에 의해 배출가능성이 있는 각종 오염물질을 관리하고 있다.
- [0006] 한편, 미량오염물질이란 ng/L에서 µg/L 또는 이보다 더 낮은 농도로 수중에 존재하는 오염물질들을 말하며, 미량오염물질 제어기술이란 인체 또는 생태계에 악영향을 미칠 수 있는 이와 같은 오염물질들을 무해화 시키는 기술이라고 할 수 있다.
- [0007] 최근에는 기기분석의 발달로 극미량의 농도까지 검출이 가능하게 되어 새로운 미량의 환경오염물질들의 존재가 확인되고 있다. 인체에도 심각한 영향을 미치는 것으로 알려진 과불화합물(Perfluorinated compounds) 외에도, 내분비계 장애물질의 작용과 유래가 유사한 미량오염물질로 인체용 및 동물용 의약품(Pharmaceuticals), 화장품 등의 일용품(Personal Care Products) 등이 거론되고 있으며, 이들은 하천이나 하수처리장 방류수 등에서 검출되고 있어 새로운 환경오염물질로 주목을 받고 있다.
- [0008] 의약품류를 포함한 대부분의 이러한 오염물질들은 주로 하폐수처리장으로부터 환경중으로 배출되고 있으며, 이들은 저농도에서 특이적으로 작용하기 때문에 매우 광범위한 수생태계에 악영향을 미칠 가능성이 있다.
- [0009] 이와 같은 미량오염물질의 정밀 분석을 위해서는 측정된 농도가 정확한지에 대한 검증이 필요하다.
- [0010] 현재까지 분석 기술에서 미량오염물질을 정밀 분석할 수 있는 가장 신뢰성 있는 방법은 측정되는 물질에 대한 기준이 될 수 있는 내부표준물질(internal standard: IS)를 넣어서 확인하는 방법이다.
- [0011] 그러나 IS는 주로 동위원소를 이용하고 고가 (e.g., 수십에서 수백만원 가량)이며, 많은 물질을 분석하려면 그 만큼의 비용이 증가하게 된다.
- [0012] 또한, 중요 생물 대사체 및 환경변환물질 등 표준물질을 상업적으로 구할 수 없는 경우도 많아 미량오염물질을 정밀 분석할 수 있는 신뢰성 높은 새로운 기술의 개발이 요구되고 있다.

선행기술문헌

특허문헌

- [0013] (특허문헌 0001) 대한민국 공개특허 제10-2016-0101238호
(특허문헌 0002) 대한민국 공개특허 제10-2020-0014048호

발명의 내용

해결하려는 과제

- [0014] 본 발명은 종래 기술의 오염물질 검출 및 분석 기술의 문제점을 해결하기 위한 것으로, 내부표준물질 없이도 환경시료의 미량오염물질 농도 측정 정확도를 향상시킬 수 있도록 한 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치 및 방법을 제공하는데 그 목적이 있다.
- [0015] 본 발명은 수질 정보 및 물질 자료를 기반으로 분석 값을 보정해 주는 모델을 만들어 신뢰성 및 경제성을 높일 수 있도록 한 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치 및 방법을 제공하는데 그 목적이 있다.
- [0016] 본 발명은 정밀분석 시간을 단축시켜 화학사고 발생 시 즉각적으로 대응이 가능하도록 할 뿐만 아니라, 오염물질의 지속적인 모니터링을 가능하게 하여 지능적이고 강화된 정수처리 공정 개발에 기여할 수 있도록 한 딥러닝

기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치 및 방법을 제공하는데 그 목적이 있다.

- [0017] 본 발명은 고가의 내부표준물질을 대체하여 비용을 절감할 수 있으며, 시료 분석 및 결과 해석에 소요되는 노동 시간 단축에 기여할 수 있도록 한 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치 및 방법을 제공하는 데 그 목적이 있다.
- [0018] 본 발명의 다른 목적들은 이상에서 언급한 목적으로 제한되지 않으며, 언급되지 않은 또 다른 목적들은 아래의 기재로부터 당업자에게 명확하게 이해될 수 있을 것이다.

과제의 해결 수단

- [0019] 상기와 같은 목적을 달성하기 위한 본 발명에 따른 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치는 고해상도 질량분석기에서 산출된 High resolution mass spectrum을 기반으로 하여 데이터를 수집, 구축하고 2차원, 3차원으로 시각화하여 미량 오염 물질 DB를 구축하는 데이터 수집 및 분석부;상기 데이터 수집 및 분석부에서 분석된 경향을 기초로 내부표준물질의 변화와 유사한 특징을 보이는 특성 인자를 추출하는 변화 인자 추출부;상기 변화 인자 추출부에서 조사된 특성 인자들을 바탕으로 측정 모델을 구축하는 딥러닝 기반 측정 모델 구축부;상기 딥러닝 기반 측정 모델 구축부에서 구축된 측정 모델을 적용하여 내부표준물질 없이 환경시료의 미량오염물질의 농도를 예측하고 검증하는 측정 모델 검증부;를 포함하는 것을 특징으로 한다.
- [0020] 여기서, 상기 데이터 수집 및 분석부는 미량 오염 물질 DB를 구축하기 위하여, 기존 유해물질 모니터링을 하여 DB를 구축하는 기존 유해물질 모니터링 DB 구축부와, 신종 유해물질 모니터링을 하여 DB를 구축하는 신종 유해물질 모니터링 DB 구축부와, 미지 물질 모니터링을 하여 미지 물질 DB를 구축하는 미지 물질 DB 구축부를 포함하는 것을 특징으로 한다.
- [0021] 그리고 상기 데이터 수집 및 분석부에서 구해진 High resolution mass spectrum 데이터로부터 미량 오염물질 측정에 필요한 내부물질을 대신할 후보 영역(candidate subset)을 산출하고 미량오염물질 농도와 후보 영역(candidate subset)의 3차원 Peak를 정량화 하여 비교하여 mass spectrum에서 IS 대체 후보 영역(candidate subset)을 선정하는 것을 특징으로 한다.
- [0022] 그리고 상기 딥러닝 기반 측정 모델 구축부는, 상기 데이터 수집 및 분석부에서 선정된 IS 대체 후보 영역(candidate subset)과 High resolution mass spectrum, 미량오염물질 모니터링 농도 데이터를 기반으로 Convolutional Neural Network를 이용하여 미량오염물질 측정 모델 구축을 위한 모델 학습을 진행하여 IS를 사용하지 않고 Mass spectrum 만으로 미량 오염물질을 측정이 가능하도록 하는 것을 특징으로 한다.
- [0023] 그리고 상기 딥러닝 기반 측정 모델 구축부는, 수질 정보 및 물질 자료를 기반으로 분석 값을 보정해 주는 모델을 만들어 내부표준물질 없이도 환경시료의 미량오염물질 농도 측정 정확도를 향상시키는 것을 특징으로 한다.
- [0024] 그리고 상기 데이터 수집 및 분석부는 미량 오염 물질 DB를 구축하기 위하여, 지정된 기존의 모니터링의 결과와 유해물질 유입 가능성을 파악하여 대상지점을 설정 후 모니터링을 실시하는 대상지점 설정 모니터링부와, 현장시료를 측정 검증하여 미량 오염물질의 특성을 분석하는 현장시료 검증부와, 현장시료에서 산출된 MS 데이터를 이용하여 빅데이터로 산출하고, 산출된 데이터는 딥러닝 기반 미량오염물질 측정 및 예측 모델 구축에 이용할 수 있도록 하는 현장시료 빅데이터 생성부를 포함하는 것을 특징으로 한다.
- [0025] 그리고 상기 데이터 수집 및 분석부는 추정 및 비표적 분석을 위하여, 시료 내 잔류가 예상되는 물질들에 대한 고유의 exact mass, 이온화 과정을 포함하는 추정 리스트를 작성하고, 고분해능 질량분석기를 통해 추출된 데이터로부터 추정리스트를 기반으로 한 물질들이 지니는 고유의 exact mass와 유사한 accurate mass, 동위원소 패턴 일치여부, MS/MS fragments 비교 분석 및 구조 분석 등을 통하여 대상물질을 잠정적으로 확인하는 것을 특징으로 한다.
- [0026] 그리고 비표적 분석은 사전정보 없이 예상하지 못했거나 미지물질들을 확인하는 분석으로 추출된 데이터로부터 유의미한 피크를 선정한 다음 분자식을 할당하고, 해당 피크의 MS/MS fragment 데이터를 통한 비교 및 분자 구조 분석을 통하여 할당된 분자식에 대한 후보물질들 중 가장 유력한 물질을 최종적으로 확인하는 것을 특징으로 한다.
- [0027] 그리고 할당된 분자식에 대한 후보물질 선정시 ChemSpider, Pubchem의 화학물질 관련 데이터베이스가 이용되고, MS/MS fragment 비교 분석은 MassBank, mzCloud의 MS/MS fragment 데이터베이스가 이용되고, 분자 구조 분석은 metFrag 와 같은 MS/MS fragment 예측 시스템을 통하여 확인하는 것을 특징으로 한다.

- [0028] 그리고 상기 딥러닝 기반 측정 모델 구축부는, 계층의 특징 추출을 위한 합성곱 계층 pooling 단계와 분류나 예측을 위한 fully-connected 단계로 구성되는 CNN을 이용하고, 입력데이터에서 내부표준물질의 변화와 유사한 특징을 보이는 부분을 CNN모델을 이용하여 추출하고, 필터의 크기, 개수, 구조, 보폭과 패딩, 활성화 함수의 요소들을 최적화하여 구축된 측정 모델은 학습을 통해 후보범위들 중 내부표준물질을 대체할 수 있는 부분을 찾는 것을 특징으로 한다.
- [0029] 그리고 상기 데이터 수집 및 분석부는 고분해능 질량분석기를 이용한 표적분석을 표준물질을 통하여 실시하고, 표준물질을 이용한 대상물질의 정량검정곡선 작성은 0.1 ng/L에서 2,000 ng/L의 범위에 대하여 작성하고, R² 0.995 이상의 정확도를 갖도록 하고, 기기분석 간 시료 분석에 대한 정확도와 재현성을 평가하기 위하여, 대상물질의 표준물질 혼합액을 이용하여 상대표준편차(RSD, Relative standard deviation)과 check standard 분석을 통하여 평가하는 것을 특징으로 한다.
- [0030] 다른 목적을 달성하기 위한 본 발명에 따른 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 방법은 고해상도 질량분석기에서 산출된 High resolution mass spectrum을 기반으로 하여 데이터를 수집, 구축하고 2차원, 3차원으로 시각화하여 미량 오염 물질 DB를 구축하는 데이터 수집 및 분석 단계; 분석된 경향을 기초로 내부표준물질의 변화와 유사한 특징을 보이는 특성 인자를 조사하는 인자 조사 단계; 조사된 특성 인자들을 바탕으로 측정 모델을 구축하는 단계; 적용된 측정 모델을 기반으로 내부표준물질 없이 환경시료의 미량오염물질의 농도를 예측하고 검증하는 확인 단계;를 포함하는 것을 특징으로 한다.
- [0031] 여기서, 상기 데이터 수집 및 분석 단계에서 미량 오염 물질 DB를 구축하기 위하여, 기존 유해물질 모니터링을 하여 DB를 구축하는 기존 유해물질 모니터링 DB 구축 및 신종 유해물질 모니터링을 하여 DB를 구축하는 신종 유해물질 모니터링 DB 구축 및 미지 물질 모니터링을 하여 미지 물질 DB를 구축하는 미지 물질 DB 구축을 수행하는 것을 특징으로 한다.
- [0032] 그리고 상기 데이터 수집 및 분석 단계에서 구축된 High resolution mass spectrum 데이터로부터 미량 오염물질 측정에 필요한 내부물질을 대신할 후보 영역(candidate subset)을 산출하고 미량오염물질 농도와 후보 영역(candidate subset)의 3차원 Peak를 정량화 하여 비교하여 mass spectrum에서 IS 대체 후보 영역(candidate subset)을 선정하는 것을 특징으로 한다.
- [0033] 그리고 상기 조사된 특성 인자들을 바탕으로 측정 모델을 구축하는 단계에서, 상기 데이터 수집 및 분석 단계에서 선정된 IS 대체 후보 영역(candidate subset)과 High resolution mass spectrum, 미량오염물질 모니터링 농도 데이터를 기반으로 Convolutional Neural Network를 이용하여 미량오염물질 측정 모델 구축을 위한 모델 학습을 진행하여 IS를 사용하지 않고 Mass spectrum 만으로 미량 오염물질을 측정이 가능하도록 하는 것을 특징으로 한다.
- [0034] 그리고 상기 조사된 특성 인자들을 바탕으로 측정 모델을 구축하는 단계에서, 계층의 특징 추출을 위한 합성곱 계층 pooling 단계와 분류나 예측을 위한 fully-connected 단계로 구성되는 CNN을 이용하고, 입력데이터에서 내부표준물질의 변화와 유사한 특징을 보이는 부분을 CNN모델을 이용하여 추출하고, 필터의 크기, 개수, 구조, 보폭과 패딩, 활성화 함수의 요소들을 최적화하여 구축된 측정 모델은 학습을 통해 후보범위들 중 내부표준물질을 대체할 수 있는 부분을 찾는 것을 특징으로 한다.

발명의 효과

- [0035] 이상에서 설명한 바와 같은 본 발명에 따른 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치 및 방법은 다음과 같은 효과가 있다.
- [0036] 첫째, 내부표준물질 없이도 환경시료의 미량오염물질 농도 측정 정확도를 향상시킬 수 있도록 한다.
- [0037] 둘째, 수집 정보 및 물질 자료를 기반으로 분석 값을 보정해 주는 모델을 만들어 신뢰성 및 경제성을 높일 수 있도록 한다.
- [0038] 셋째, 정밀분석 시간을 단축시켜 화학사고 발생 시 즉각적으로 대응이 가능하도록 할 뿐만 아니라, 오염물질의 지속적인 모니터링을 가능하게 하여 지능적이고 강화된 정수처리 공정 개발에 기여할 수 있도록 한다.
- [0039] 넷째, 고가의 내부표준물질을 대체하여 비용을 절감할 수 있으며, 시료 분석 및 결과 해석에 소요되는 노동시간 단축에 기여할 수 있도록 한다.

도면의 간단한 설명

- [0040] 도 1은 본 발명에 따른 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치의 구성도
- 도 2는 인공지능 기반 미량오염물질 농도 검출을 위한 상세 구성도
- 도 3은 데이터 수집 및 분석을 통한 미량 오염 물질 DB 구축부의 상세 구성도
- 도 4는 신중,미지 물질 빅데이터화 과정을 나타낸 구성도
- 도 5는 본 발명에 따른 표적 분석 및 비표적 분석 과정을 나타낸 플로우 차트
- 도 6a내지 도 6d는 본 발명에 따른 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치에 적용되는 딥러닝 기술의 개요를 나타낸 구성도
- 도 7은 본 발명에 따른 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 방법을 나타낸 플로우 차트

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0041] 이하, 본 발명에 따른 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치 및 방법의 바람직한 실시 예에 관하여 상세히 설명하면 다음과 같다.
- [0042] 본 발명에 따른 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치 및 방법의 특징 및 이점들은 이하에서의 각 실시 예에 대한 상세한 설명을 통해 명백해질 것이다.
- [0043] 도 1은 본 발명에 따른 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치의 구성도이다.
- [0044] 본 발명에 따른 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치 및 방법은 수질 정보 및 물질 자료를 기반으로 분석 값을 보정해 주는 모델을 만들어 내부표준물질 없이도 환경시료의 미량오염물질 농도 측정 정확도를 향상시킬 수 있도록 한 것이다.
- [0045] 이를 위하여 본 발명은 Orbitrap Mass data를 수집하여 이의 물질별 경향을 분석하여 미량오염물질 농도 측정 정확도를 높이기 위한 표준화된 데이터 DB를 구축하는 구성을 포함할 수 있다.
- [0046] 본 발명은 내부 표준물질과 유사한 변화를 일으키는 특성 인자를 조사하여 조사한 특성 인자를 측정 모델에 적용하여 미량오염물질의 농도를 측정하는 구성을 포함할 수 있다.
- [0047] 이와 같이 본 발명은 질량 스펙트럼 데이터와 딥러닝 기술을 이용하여 미량 오염 물질의 검출을 위한 제한적인 분석 방법을 대체하기 위한 것이다.
- [0048] 일반적으로 검출대상 피크의 스펙트럼 외의 다른 자연 유기 물질(NOM)의 질량 스펙트럼들은 대부분 사용할 수 없는 것으로 간주되어 버려져왔다.
- [0049] 본 발명은 딥러닝 기술의 하나인 합성곱 신경망(Convolutional Neural Network; CNN)을 이용하여 지금까지 버려져 온 대량의 NOM 데이터로부터 의미있는 결과를 도출하여 이를 이용하여 환경시료의 미량오염물질 농도 측정 정확도를 향상시킬 수 있도록 한 것이다.
- [0050] 본 발명에 따른 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치는 Orbitrap Mass data를 수집하여 물질별 경향을 분석하는 데이터 수집 및 분석부(10)와, 데이터 수집 및 분석부(10)에서 분석된 경향을 기초로 내부 표준물질과 유사한 변화를 일으키는 특성 인자를 추출하는 변화 인자 추출부(20)와, 변화 인자 추출부(20)에서 조사된 특성 인자들을 바탕으로 측정 모델을 구축하는 딥러닝 기반 측정 모델 구축부(30)와, 딥러닝 기반 측정 모델 구축부(30)에서 구축된 측정 모델을 적용하여 내부표준물질 없이 환경시료의 미량오염물질의 농도를 예측하고 검증하는 측정 모델 검증부(40)를 포함한다.
- [0051] 여기서, 데이터 수집 및 분석부(10)는 오염물질 검출 및 분석 분야에서 축적된 방대한 양의 환경 데이터 및 해석되고 버려지는 데이터를 수집하여 데이터마이닝을 하고 빅데이터 분석을 통하여 물질별 경향을 분석하는 것이다.
- [0052] 이와 같은 빅데이터 분석을 통한 물질별 경향 분석에 관하여 구체적으로 설명하면 다음과 같다.
- [0053] 도 2는 인공지능 기반 미량오염물질 농도 검출을 위한 상세 구성도이다.

- [0054] 본 발명에 따른 미량오염물질 농도 검출 시스템은 크게 데이터 수집, 데이터 마이닝, 딥러닝의 구성을 갖는다.
- [0055] 첫 번째로, 유역에서 수 샘플링을 실시한 후 고해상도 질량분석기(HP LC/MSMS)를 이용하여 수체 내의 미량오염 물질을 측정한다.
- [0056] 고해상도 질량분석기에서 산출된 High resolution mass spectrum을 기반으로 하여 데이터를 수집, 구축하고 2차원, 3차원으로 시각화한다.
- [0057] 다양한 성상을 가진 시료 내에 존재하는 미량오염물질을 대상으로 하는 분석 방법 중, 일반적으로 사용되며 가장 높은 신뢰도를 나타내는 분석 방법은 내부표준물질(IS, Internal standard)를 이용하는 내부표준물질법이다.
- [0058] 하지만, 내부표준물질법은 고가의 내부표준물질을 필요로 하며 비용소모적인 방법이다.
- [0059] 본 발명은 내부표준물질법을 이용하여 대상지역으로 선정된 수계 내에 거동하는 신종 미량오염물질을 정량 분석하여 농도 분포를 파악하고, 인공지능 기반의 모델을 이용하여 내부표준물질을 대신할 수 있는 수계 내의 대체 물질을 찾을 수 있도록 한 것이다.
- [0060] 그리고 얻어진 High resolution mass spectrum 데이터로부터 신종미량 오염물질 측정에 필요한 내부물질을 대신 할 후보 영역(candidate subset)을 산출하고 신종미량오염물질 농도와 후보 영역(candidate subset)의 3차원 Peak를 정량화 하여 비교한다.
- [0061] 그 후 최종적으로 mass spectrum에서 IS 대체 후보 영역(candidate subset)을 선정한다.
- [0062] 선정된 IS 대체 후보 영역(candidate subset)과 High resolution mass spectrum, 미량오염물질 모니터링 농도 데이터를 기반으로 딥러닝 모델 중 하나인 Convolutional Neural Network를 이용하여 미량오염물질 측정 모델 시스템 개발을 위한 모델 학습을 진행한다. 학습이 마무리된 후, 학습된 모델은 IS를 사용하지 않고 Mass spectrum 만으로도 미량 오염물질을 측정이 가능하게 된다.
- [0063] 도 3은 데이터 수집 및 분석을 통한 미량 오염 물질 DB 구축부의 상세 구성도이다.
- [0064] 현재 수계에는 산업용제, 의약품 및 개인관리용품들을 포함한 다양한 미량오염물질들이 공존하고 있고, 이들의 출현 및 농도는 수계지점마다 상이하게 나타나므로, 보다 광범위한 분석 스크리닝 및 우선순위물질선정, 그리고 이에 대한 추가적인 모니터링 프로그램 구축이 필요하다.
- [0065] 우선순위물질선정을 위해서는 현재 수계에 존재하는 미량오염물질에 대한 스크리닝이 필요하며 이를 위해 본 발명에서는 다종의 물질을 동시에 분석할 수 있는 비표적 및 추정 분석을 수행한다.
- [0066] 비표적 및 추정 분석을 통해 확인된 미량오염물질들은 출현빈도, 농도, 및 독성정보 등을 바탕으로 우선순위 및 주요대상물질 선정 후 선정된 물질들에 대한 주요 지점별 모니터링 프로그램을 구축한다.
- [0067] 이에 따라 검출 농도 및 빈도 분석 DB를 구축하여 인공지능 모델 개발을 위한 빅 데이터 생성 및 자료 분석을 수행한다.
- [0068] 미량오염 물질 DB 구축을 위해서는 도 3에서와 같이, 기존 유해물질 모니터링을 하여 DB를 구축하는 기존 유해 물질 모니터링 DB 구축부(11)와, 신종 유해물질 모니터링을 하여 DB를 구축하는 신종 유해물질 모니터링 DB 구축부(12)와, 미지 물질 모니터링을 하여 미지 물질 DB를 구축하는 미지 물질 DB 구축부(13)를 포함한다.
- [0069] 기존의 미량오염물질 DB 구축을 위해 1) 국립환경과학원의 '내분비계 장애물질 조사결과자료, 2) 2015년 이후 수계 내 미량오염물질 모니터링 관련 국내외 문헌, 그리고 3) 이전부터 수계 관리를 위하여 조사되어왔던 물질이나 최근에 수계 내 잔류가 확인되었던 신종 물질 외에도 아직까지 잘 알려지지 않거나 미확인 물질들에 대해 확인한다.
- [0070] European Union(EU)의 Registration of Chemicals(REACH) 화학 물질 등록, 평가, 승인 및 제한에 대한 보고에 따르면 유럽은 약 140,000개의 물질을 생산 또는 수입하고 미국의 경우 약 85,000개의 화학물질이 리스트에 포함되어 있으며 가정에서 사용하는 의약품, 살충제, 계면활성제 등 과 같은 물질들만 해도 30,000 ~ 70,000여 개가 되는 것으로 추정된다 (Hollender et al., 2017).
- [0071] 이와 같이 수많은 오염물질이 수계 내로 배출되어지고 있음이 예상되지만 기존에 수계 모니터링을 위한 대상물질로 선정된 물질들은 수십 혹은 수백여 개에 지나지 않는다.
- [0072] 반면에 추정 및 비표적 분석 기법과 같은 새로운 분석 방법은 표적 분석에 비하여 수많은 물질들을 대상으로 분

석 가능하므로 표적 분석이 지니는 한계에 대한 해결책으로 제시되고 있다.

- [0073] 대체적으로 고분해능 질량분석기 기반 추정 및 비표적 분석과 같은 새로운 분석기법을 이용하면 기존의 표적 분석보다 비교적 다종의 물질들에 대한 모니터링이 가능하다.
- [0074] 이러한 새로운 분석 기법을 통하여 기존에 모니터링 되어오던 물질들과 미지물질들에 대한 추가적인 모니터링이 수행하고 검출된 물질들에 대한 DB구축 후 이를 바탕으로 인공지능 모델 개발을 위한 빅 데이터 생성 및 자료 분석을 진행한다.
- [0075] 도 4는 신중,미지 물질 빅데이터화 과정을 나타낸 구성도이다.
- [0076] 본 발명은 신중,미지 물질 빅데이터화를 위하여 도 4에서와 같이, 지정된 기존의 모니터링의 결과와 유해물질 유입 가능성을 파악하여 대상지점을 설정 후 모니터링을 실시하는 대상지점 설정 모니터링부(31)와, 현장시료를 측정 검증하여 미량 오염물질의 특성을 분석하는 현장시료 검증부(32)와, 현장시료에서 산출된 MS 데이터를 이용하여 빅데이터로 산출하고, 산출된 데이터는 딥러닝 기반 미량오염물질 측정 및 예측 모델 구축에 이용할 수 있도록 하는 현장시료 빅데이터 생성부(33)를 포함한다.
- [0077] 수십 년간 다양한 방법을 통해 수계 내 모니터링이 수행되어왔는데, 오염물질 항목을 미리 정하고 각 물질들에 따른 전처리 및 분석 등을 확립한 후 정성 및 정량 분석이 가능한 표적 분석이 주로 사용되었다.
- [0078] 그러나 표준물질 구비가 필수적인 표적 분석 기법으로는 기존에 잘 알려지지 않거나 사전정보가 전혀 없는 미규제 물질의 검출에는 시행착오를 겪는 과정에서 많은 시간이 소요되어 활용성이 떨어진다.
- [0079] 이에 대응하는 새로운 분석 기법으로는 추정 및 비표적 분석이 있으며, 이를 활용하기 위해서는 질량 분석 시 1단위로 질량을 분석하는 저분해능 질량분석기가 아닌 0.0001단위로 질량을 분석하는 고분해능 질량분석기가 필요하다.
- [0080] 저분해능 질량분석기로는 mass error가 높아 분리할 수 없었던 물질들을 고분해능 질량분석기를 이용하면 분리가 가능하고 이러한 높은 선택성과 감도를 바탕으로 분석대상 물질을 미리 정하지 않더라도 수많은 오염물질을 식별해낼 수 있다.
- [0081] 1995년과 2005년에 quadrupole-time-of-flight (QTOF) 및 Fourier transform orbitrap (Orbitrap)이 각각 상용화 된 이후로 고분해능과 정확도를 기반으로 한 유전자분석, 단백질 및 대사체 분석이 이루어졌고 이후 환경, 식품 등에서의 미량잔류오염물질 분석으로 활용성이 넓혀졌다.
- [0082] 최근까지 환경 분석 측면에서도 고분해능 질량분석기를 이용한 의약품, 농약, 개인위생용품, 산업용 물질 등에 대한 모니터링이 국내외에서 많이 이루어지고 있다.
- [0083] 또한, 분석결과를 해석하는 다양한 소프트웨어 개발로 인하여 고분해능 질량분석기를 통하여 추출된 신뢰성 높은 데이터로부터 peak picking, 동위원소 패턴 분석, MS/MS fragment 비교 분석 등 복잡한 과정을 단시간에 수행할 수 있다.
- [0084] 이와 같은 특성을 활용하여 표적 분석 시에는 수십, 수백 종에 달하는 대상물질에 대하여 동시에 정량분석이 가능하고 시료 내 잔류할 것이라 예상되는 물질들에 대한 추정 분석 및 미지물질에 대한 비표적 분석까지 다양한 분석기법의 적용이 가능하다.
- [0085] 도 5는 본 발명에 따른 표적 분석 및 비표적 분석 과정을 나타낸 플로우 차트이다.
- [0086] 표적 분석은 표준물질 구비 후 대상물질에 대한 정성 및 정량 분석을 수행하는 분석 기법이고 추정 및 비표적 분석은 표준물질을 확보하지 못한 상황에서도 수많은 물질들을 정성적으로 확인할 수 있는 분석 기법이다.
- [0087] 먼저 추정 분석은 표준물질이 확보되지 않아 정량분석은 불가능하지만 시료 내 잔류가 예상되는 물질들에 대한 고유의 exact mass, 이온화 과정 등을 포함하는 추정 리스트를 작성한다.
- [0088] 이 후, 고분해능 질량분석기를 통해 추출된 데이터로부터 추정리스트를 기반으로 한 물질들이 지니는 고유의 exact mass와 매우 유사한 accurate mass, 동위원소 패턴 일치여부, MS/MS fragments 비교 분석 및 구조 분석 등을 통하여 대상물질을 잠정적으로 확인한다.
- [0089] 비표적 분석은 추정 리스트 등 과 같은 사전정보 없이 예상하지 못했거나 미지물질들을 확인하는 분석기법으로 추출된 데이터로부터 유의미한 피크를 선정한 다음 분자식을 할당한다.

- [0090] 이후 해당 피크의 MS/MS fragment 데이터를 통한 비교 및 분자 구조 분석을 통하여 할당된 분자식에 대한 후보 물질들 중 가장 유력한 물질을 최종적으로 확인한다.
- [0091] 할당된 분자식에 대한 후보물질 선정시 ChemSpider, Pubchem 등 화학물질 관련 데이터베이스가 이용되고 MS/MS fragment 비교 분석은 MassBank, mzCloud 등 MS/MS fragment 데이터베이스가 이용되며 분자 구조 분석은 metFrag 와 같은 MS/MS fragment 예측 시스템을 통하여 확인한다.
- [0092] 고분해능 질량분석기를 이용한 표적분석 또한 일반적인 표적분석과 마찬가지로 표준물질 구비를 통하여 실시된다. 해당 대상물질에 대하여 고분해능 질량분석기는 5ppm 이내의 정확한 질량 값(exact mass) 측정을 가능하게 하며, 동위원소 패턴(Isotopic pattern)과 물질 고유의 MS/MS fragment 확인을 통하여 높은 신뢰도를 제공한다.
- [0093] 표준물질을 이용한 대상물질의 정량검정곡선 작성은 0.1 ng/L에서 2,000 ng/L의 범위에 대하여 작성하고, R^2 0.995 이상의 정확도를 갖도록 한다.
- [0094] 또한, 시료분석과 농도에 대한 정도보증관리(QA/QC)를 위하여 시료채취 간에는 환경시험·검사 QA/QC 핸드북에 따른 시료채취를 실시한다.
- [0095] 즉, 갈색병(amber bottle)을 이용하여 시료채취 후 시료변형을 최소화하기 위하여 헤드스페이스를 제거하여 시료채취를 실시하고, 일반항목(pH, 수온, 용존산소량, 전기전도도)은 현장에서 시료채취와 동시에 측정한다.
- [0096] 시료 성상은 시료채취 지점에 따라 지표수와 폐수, 하수처리장 방류수로 구분된다.
- [0097] 시료 성상에 따른 미량오염물질 농도 분석에 대한 matrix effect를 고려하여 대상물질에 대한 회수율(recovery) 실험을 한다.
- [0098] 농도 분석 회수율 실험은 분석 시료와 동일한 시료에 주입실험(Spiking test)를 통하여 실시하고, 시료 내 대상 물질을 일정농도 (ex. 100 ng/L)로 주입하여 동일한 전처리 과정과 분석을 거쳐 대상물질에 대한 일정 신뢰구간 이상(70~130%)의 회수율을 확보한다.
- [0099] 그리고 기기분석 간 시료 분석에 대한 정확도와 재현성을 평가하기 위하여, 대상물질의 표준물질 혼합액을 이용하여 상대표준편차(RSD, Relative standard deviation)과 check standard 분석을 통하여 평가한다.
- [0100] 도 6a내지 도 6d는 본 발명에 따른 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치에 적용되는 딥러닝 기술의 개요를 나타낸 구성도이다.
- [0101] 본 발명에서는 딥러닝, GIS 빅데이터 기반 신종미량오염물질 예측 모델을 개발하기 위하여, 미량오염물질 모니터링과 더불어 수리/수문/환경 데이터를 수집한다.
- [0102] 이렇게 수집된 정보를 이용하여, 수리 수문 모델을 구축한다.
- [0103] 수리/수문 모델은 유역내의 수리/수문/환경 정보를 GIS 형태로 산출이 가능하며, 미세측 지역에 대해서도 정보 산출이 가능하다.
- [0104] 이렇게 산출된 수리/수문/환경 GIS정보와 오염원 정보, 오염물질 정보를 추가하여, 최종적으로 GIS 형태의 수리/수문/환경 빅데이터를 산출한다.
- [0105] 최종적으로 산출된 GIS 형태의 빅데이터는 유역 내의 미량오염물질예측을 위해 딥러닝에 적용한다.
- [0106] 이 때 사용되는 딥러닝 모델은 LSTM 모델이다. 신종 미량오염물질 예측을 위해 LSTM과 GIS형태의 빅데이터를 이용하여 모델 학습을 진행한다.
- [0107] 최종적으로 신종 미량오염물질 예측이 가능한 시스템 개발이 완료가 되면, 추가적인 모니터링 정보를 이용하여 모델 검증을 진행한다.
- [0108] 딥러닝 기반 측정 모델 구축부(30)에서 구축된 측정 모델은 학습을 통해 후보범위들 중 내부표준물질을 대체할 수 있는 부분을 찾을 것이며, 필터의 크기, 개수, 구조, 보폭과 패딩, 활성화 함수 등 주요 요소들을 최적화하여 설계된다.
- [0109] 여러 입력데이터에서 내부표준물질이 보이는 특징과 유사한 특징을 보이는 부분을 CNN모델을 이용하여 추출한다.
- [0110] Convolutional Neural Network (CNN)은 데이터의 특징을 추출하여 패턴을 파악하는 구조로, 크게 convolution

과 pooling 과정으로 진행된다.

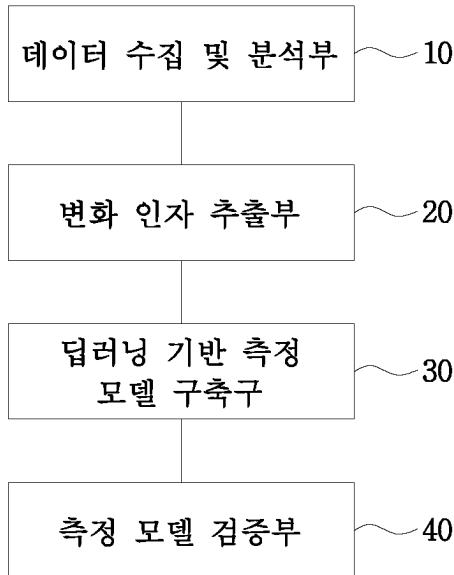
- [0111] Convolution 과정은 데이터의 특징을 추출하는 과정으로, 성분의 특징을 강조하고 압축하여 parameter의 개수를 줄이게 된다. 이러한 압축 과정은 데이터의 유무를 판단하고 처리하는 filter, 데이터의 크기를 적절하게 조절해주는 padding, 압축된 결과 값을 수치화 시켜주는 active function으로 진행된다.
- [0112] Active function으로는 sigmoid, ReLU 함수 Pooling 과정은 입력 데이터의 특징 추출을 방해하는 노이즈와 크기를 줄여주며, max-pooling, average-pooling 등의 방법이 존재한다. 위 두 과정을 지나 fully connected layers를 통해 학습을 진행하고 입력 데이터에 대한 결과 값을 도출한다.
- [0113] 도 7은 본 발명에 따른 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 방법을 나타낸 플로우 차트이다.
- [0114] 본 발명에 따른 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 방법은 Orbitrap Mass data를 수집하여 물질별 경향을 분석하는 데이터 수집 및 분석 단계(S301)와, 분석된 경향을 기초로 내부표준물질과 유사한 변화를 일으키는 특성 인자를 조사하는 인자 조사 단계(S302)와, 조사된 특성 인자들을 바탕으로 모델을 구축하는 개발 단계(S303)와, 적용된 측정 모델을 기반으로 내부표준물질 없이 환경시료의 미량오염물질의 농도를 예측하고 검증하는 확인 단계(S304)를 포함한다.
- [0115] 이상에서 설명한 본 발명에 따른 딥러닝 기반 모델링을 통한 미량오염물질 정밀검출 장치는 수질 정보 및 물질 자료를 기반으로 분석 값을 보정해 주는 모델을 만들어 신뢰성 및 경제성을 높일 수 있도록 한 것으로, 정밀분석 시간을 단축시켜 화학사고 발생 시 즉각적으로 대응이 가능하도록 할 뿐만 아니라, 오염물질의 지속적인 모니터링을 가능하게 하여 지능적이고 강화된 정수처리 공정 개발에 기여할 수 있도록 한 것이다.
- [0116] 이상에서의 설명에서와 같이 본 발명의 본질적인 특성에서 벗어나지 않는 범위에서 변형된 형태로 본 발명이 구현되어 있음을 이해할 수 있을 것이다.
- [0117] 그러므로 명시된 실시 예들은 한정적인 관점이 아니라 설명적인 관점에서 고려되어야 하고, 본 발명의 범위는 전술한 설명이 아니라 특허청구 범위에 나타나 있으며, 그와 동등한 범위 내에 있는 모든 차이점은 본 발명에 포함된 것으로 해석되어야 할 것이다.

부호의 설명

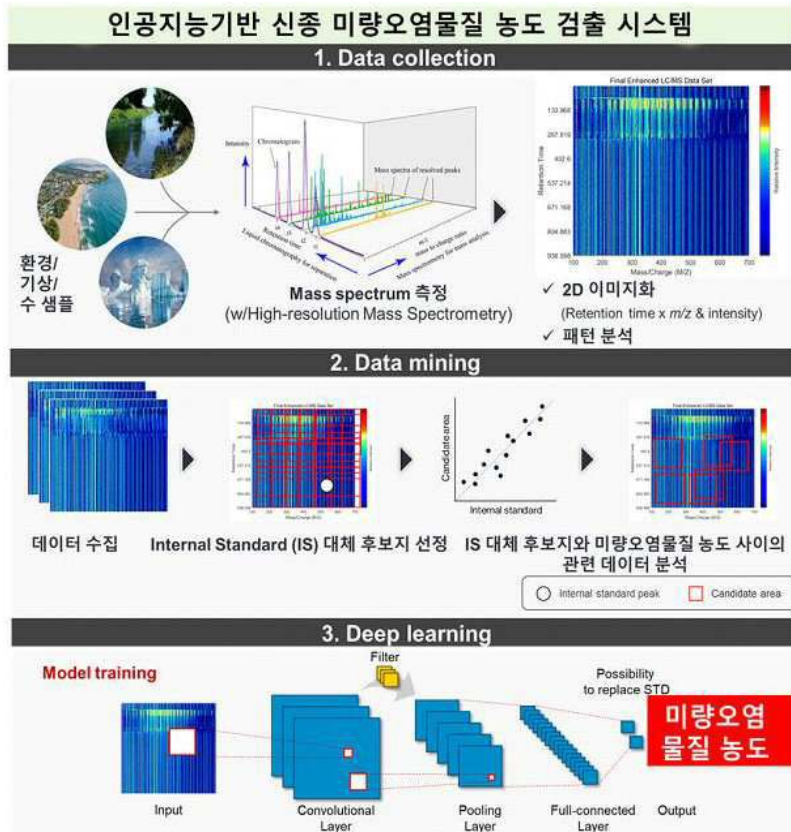
- [0118] 10. 데이터 수집 및 분석부
- 20. 변화 인자 추출부
- 30. 딥러닝 기반 측정 모델 구축부
- 40. 측정 모델 검증부

도면

도면1



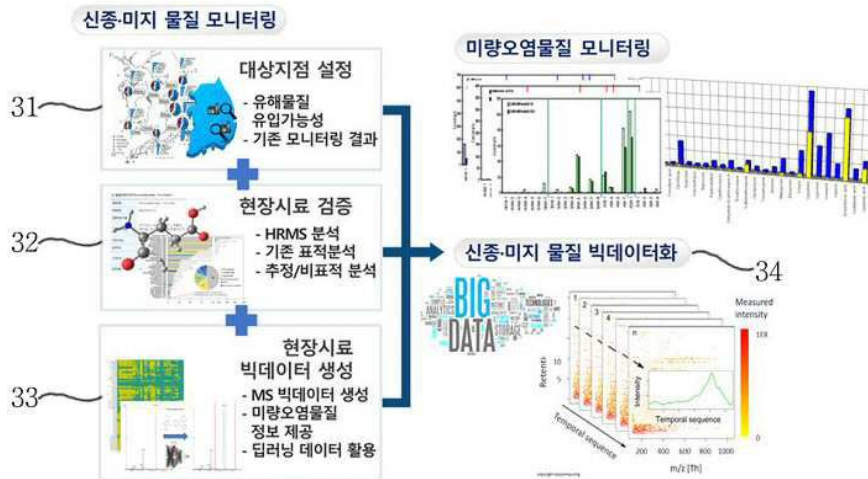
도면2



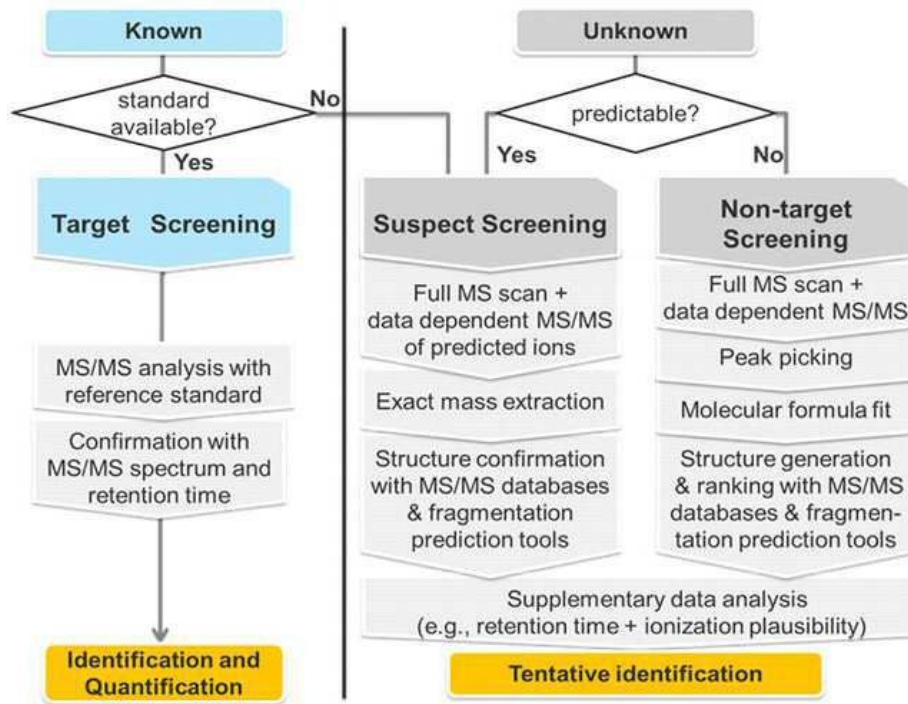
도면3



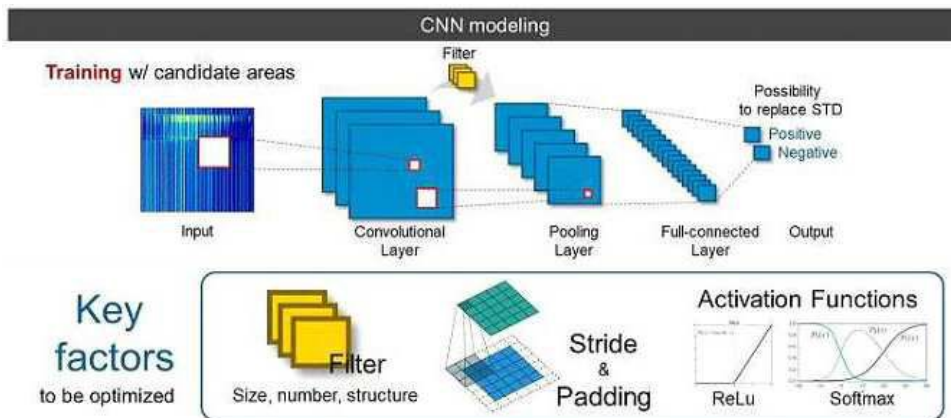
도면4



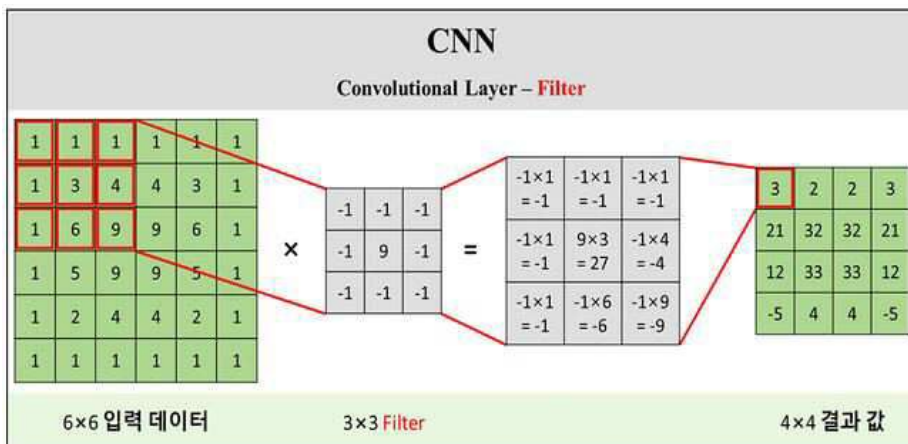
도면5



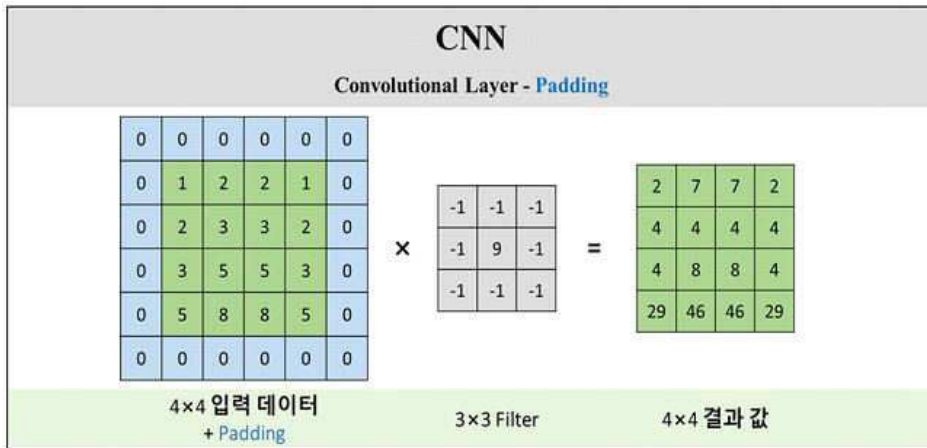
도면6a



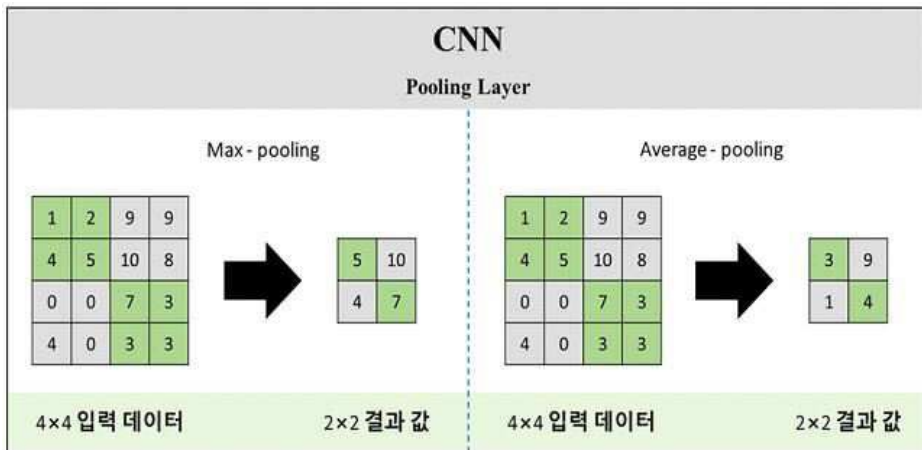
도면6b



도면6c



도면6d



도면7

