

베이지언 기법을 이용한 수계 내의 독성물질 판단

정하규[†]·정종혁[†]·이현욱[†]·권원태*·김상길**·전숙례**

On-line identification of the toxicological substance in the water system using Bayesian technique

Ha Kyu Jung[†], Jong Hyuk Jung[†], Hyun Wook Lee[†], Won Tae Kwon*, Sang Gil Kim** and Sook Lye Jeon**

Key Words: Algae(조류), Bayesian technique(베이지언 기법), On-line monitoring(실시간 감시), Water resource monitoring(수질감시)

Abstract

Water resource can be examined using biological sensors. Algae has been one of the biological sensors used to evaluate and monitor the water pollution. The monitoring system, however, could determine whether the examined water was safe or not. It needs additional expensive chemical test to figure out the cause of the water pollution. In this study, an endeavor is given to identify the toxicant in the water using the shape of the chlorophyll fluorescence induction curve(FIC) from algae using monitoring system. Fundamental curves are obtained from the experiments with specified amount of toxicant. Bayesian method is utilized to determine the unknown toxicant in the water by comparing it with the fundamental curves. The results shows that the proposed method works fairly well.

기호설명

Fm_R : Maximum Fluorescence of Reference
 F_R : Fluorescence of Reference
 Fm_S : Maximum Fluorescence of Sample
 F_S : Fluorescence of Sample
 Y_R : Quantum Yield of Reference
 Y_S : Quantum Yield of Sample

1. 서론

† 서울시립대학교 대학원

* 서울시립대학교 기계정보공학과

E-mail : kwon@uos.ac.kr

TEL : (02)2210-2403 FAX : (02)2248-5110

** (주) 환경바이오

최근 우리 사회는 환경 오염에 대한 관심이 커지고, 이에 관한 제품들도 많이 나오고 있다.

그래서 최근에 환경 오염에 관한 수질, 토양, 대기를 검사하는 기관 및 업체들도 많이 등장하게 되었다. 이러한 제품들이 작동하는 원리들도 제품마다 다르다. 특히 수질을 검사하는 기관에서 사용되는 기기들은 대부분 화학 반응을 통해 수질을 오염 시키는 원인 물질을 확인하는 방법을 사용하고 있다. 하지만 이런 화학 반응으로 인해 사용된 시료는 아주 작기는 하지만 또 다른 환경 오염을 야기시킨다. 그래서 이러한 화학 반응을 이용한 방법에서 탈피하여, 수중 생물들이 오염 물질에 반응하는 것을 정보로 이용한 방법들이 많이 등장하고 있다. 그리고 이러한 수중 생물을 이용한 기기들이 앞으로 점점 더 널리 사용 될것이다. 하지만 화학 반응과 같이 명확한 해답을 통한 오염 물질 확인하는 것처럼, 수중 생물을 통한 오염 물질 확인은 아직 미흡한 단계

에 있다. 그래서 많은 업체들은 수중 생물이 반응해서 얻어진 데이터를 우리에게 필요한 정보로 만드는 일에 몰두하고 있다.

우리는 여기서 반달말이 오염 물질에 반응시 발산하는 빛을 시간에 따라 기록한 데이터를 통해서, 그래프화하고 이 그래프를 베이지안법을 이용해서 정보화한다. 이렇게 얻어진 정보를 통해서 수질 오염을 검출할 것이다

2. 수질감시 시스템의 검사방법

2.1 실험장치

본 실험에 사용한 실험장치는 WEMS-M이다. WEMS-M은 채수부, 구동부, 컨트롤부(디스플레이부)로 구성되어 있다. 구성된 모습은 Fig 1과 같다. 채수부는 시험수의 채수를 담당하며 구동부는 채수 및 측정을 하기 위한 각종 기기들을 말하며 컨트롤부는 구동부 및 채수부의 작동과 각종 결과의 디스플레이를 담당한다. 기본원리는 조류가 광합성 과정 중 발생시키는 여분의 형광량이 독성물질이 침투될 때 변화를 보이는데 이를 감지해 정상 상태의 형광량의 변화(대조구)와 독성물질 유입시의 형광량(실험구)의 차이를 측정하여 나타내는 방식이다.

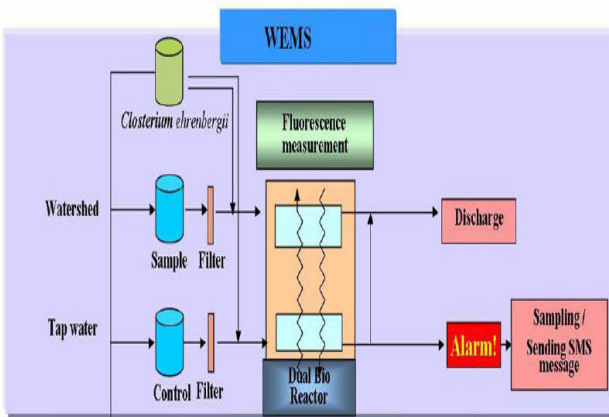


Fig. 1 WEMS-M

2.2 실험방법 및 조건

측정되는 형광량을 다음과 같이 계산하여 WEM-TOX값을 구했다. [1]

$$Y_R = \frac{Fm_R - F_R}{Fm_R} \quad (1)$$

$$Y_S = \frac{Fm_S - F_S}{Fm_S} \quad (2)$$

$$WEM-TOX = \frac{Y_S - Y_R}{Y_S} \quad (3)$$

사용한 독성물질은 Table 1과 같고 실험조건은 Table 2와 같다.

Table 1 Toxicities and their quantity(ppm) used for the experiments

Cu	Diazinon	Cyanogen	Atrazine	Fe	Waste water
1	1	1	0.01	10	Rubber
10	10	5	0.1	20	Pigment
100	100	10	1		

Table 2 Experimental condition of water ecotoxicological monitoring system

Item	Condition
Organism	Closterium
Organism Quantity	1200 cell/ml
Amount of Light	1000~1500 Lux
Light Cycle (L : D)	12h : 12h

3. 독성물질의 판단

3.1 실험결과의 커브피팅

독성물질 판단을 위해서 판단 기준이 될 그래프를 구했다. 그래프는 각 실험의 WEM-TOX값을 시간에 따른 이동평균으로 구하고 동일 독성물질을 사용한 실험들의 이동평균을 실험횟수에 대한 평균을 계산해서 커브피팅에 사용했다.

커브피팅은 Origin7.0 프로그램을 사용하고 R² 값과 Chi²/DoF값을 기준으로 그래프를 선택하였다. 선택한 그래프의 적합성을 확인하기 위해서 실험값과의 표준편차를 계산해서 다른 그래프들과 비교하였다.

3.2 베이지안 기법을 이용한 판단방법

실험에서 얻은 결과가 어떤 독성물질인지 판단은 위에서 구한 그래프들 중에 실험결과와 적합한 그래프를 선택하는 것으로 결정했다.

그래프들과 실험결과와의 비교는 각 시간에서의 실험값과 그래프사이의 거리를 비율로 나타내고 베이지안 기법을 사용해서 계산된 확률을 바탕으로 한다.

3.2.1 그래프와 실험결과와의 거리의 비율계산

각 시간에서의 실험값과 그래프값의 차의 절대값(d), 실험에 사용된 모든 독성물질에 대한 d값의 합계(S)를 사용해서 비율을 계산한다.

이 값을 확률로 나타내기 위해서 식(4)을 사용하면 된다.

$$p = \frac{\frac{S-d}{S}}{\sum \frac{S-d}{S}} \quad (4)$$

식(4)을 사용하여 얻은 각 시간에서의 확률들은 적합한 그래프를 선택할 수 없다.

3.2.2 베이지안 기법을 이용한 확률계산

베이지안 기법을 이용한 확률의 계산식을 식(5)와 같다. [2]

$$p_{ij} = \frac{p_{(i-1)j} \times p_{ij}}{\sum_{j=Toxity}^n p_{(i-1)j} \times p_{ij}} \quad (5)$$

여기에서 p_{ij} 는 i 번째 시간에서의 j-독성물질일 확률이다. 식(5)는 사전 확률과 현재 시각에서의 확률의 곱을 모든 독성물질에 대해서 구한 값들로 나누어서 계산한 것이고 그 결과가 새로운 현재의 값이 되는 것을 나타낸다.

이 방법을 사용하여 확률을 계산하는데 있어서 결과의 정확성을 높이기 위해서 WEM-TOX의 평균이 0.3이상인 그룹과 0.3이하인 그룹 2개로 분류하였다. 평균값이 0.26, 0.21인 구리100ppm, 다이아지논100ppm은 분류 기준인 0.3의 근처에 있으므로 두 그룹 모두에 포함시켰다.

Table 3 Group 1 sorted by the magnitude of WEM-TOX value (ppm)

Cu	Diazinon	Cyanogen	Atrazine	Fe	Waste water
1	1	1	0.01	10	Rubber
10	10	5		20	
100	100	10			

Table 4 Group 2 sorted by the magnitude of WEM-TOX value (ppm)

Cu	Diazinon	Cyanogen	Atrazine	Fe	Waste water
			0.1		Rubber
100	100		1		Pigment

3.3 판단결과

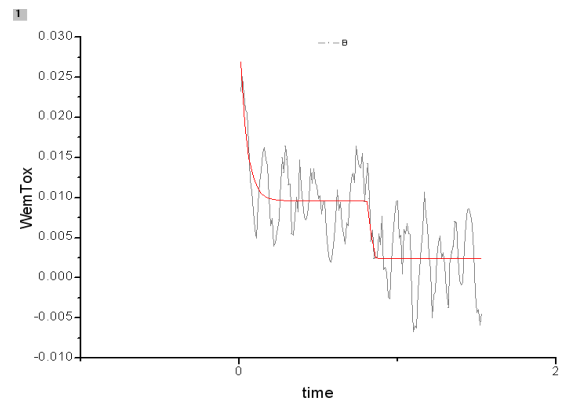


Fig. 2 The result of curve fitting of the data obtained when 1ppm of Cu is added to the water

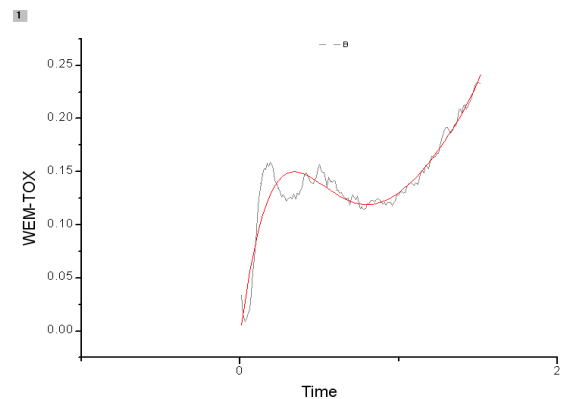


Fig. 3 The result of curve fitting of the data obtained when 10ppm of Cu is added to the water

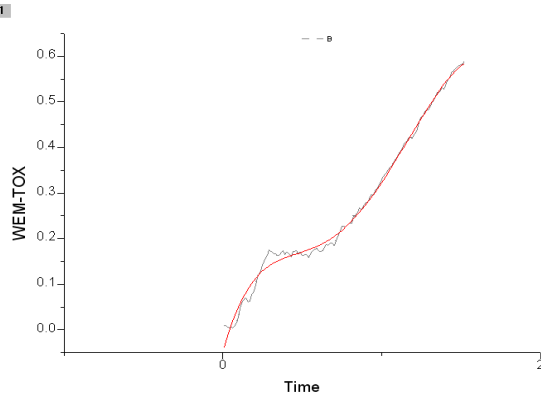


Fig. 4 The result of curve fitting of the data obtained when 100ppm of Cu is added to the water

Fig 2, 3, 4는 구리의 WEM-TOX값을 사용한 커브피팅을 통해서 얻은 그래프들이다. Fig 2는 구리 1ppm으로 바이페이직(Biphasic) 모델을 사용하였고 Fig 3, 4는 구리 10ppm, 100ppm으로 5차 폴리노미얼(Polynomial) 모델을 사용하였다.

Table 5는 구리 10ppm을 베이지안 기법을 사용하여 얻는 결과를 시간경과에 따라서 나타낸 것이다. 실험을 시작했을 때 구리 10ppm의 실험이 구리 10ppm일 확률은 0.0832로 다른 독성물질일 확률보다는 높지만 그 차이가 매우 작다. 전체 실험시간의 1/3이 지난 시점에서 계산된 확률을

Table 5 Probability change of the water system with 10ppm of Cu as a function of time

	Time	start	1/3	2/3	end
Cu	1	0.0774	0.0075	0.00016	2E-6
	10	0.0832	0.3811	0.69405	0.83826
	100	0.0708	0.3207	0.01927	1.5E-5
Diazinon	1	0.0813	0.0074	0.00016	2.6E-6
	10	0.0779	0.0137	0.00058	1.4E-5
	100	0.0575	0.0091	0.00091	0.00052
Cyanogen	1	0.0823	0.0159	0.00064	1.2E-5
	5	0.0693	0.0494	.004426	0.01331
	10	0.0753	0.1511	0.23815	0.1478
Atrazine	0.01	0.0812	0.0127	0.0004	6.4E-6
Fe	10	0.0821	0.0121	0.00048	1.3E-5
	20	0.0817	0.0139	0.00094	4.6E-5
Waste water	Rubber	0.08	0.0054	1E-8	5.3E-13

보면 구리 10ppm일 확률이 0.38로 확연히 증가했음을 볼 수 있다.

그리고 그 추세가 비슷한 구리100ppm도 0.32로 증가했음을 알 수 있다. 2/3이 경과한 시점에서의 확률은 구리 10ppm이 0.69로 더욱 증가하였고 구리100ppm은 0.019로 감소한 것을 볼 수 있다. 최종시간에서는 구리 10ppm의 확률이 0.838로 나타나고 다른 독성물질일 확률은 매우 작게 나타나는 것을 볼 수 있다.

Table 6, 7, 8은 구리 1ppm, 10ppm, 100ppm의 최종시간에서의 확률을 일부 나타낸 것이다.

Table 9와 Table 10은 그룹1과 그룹2의 계산결과를 나타낸다. 구리 1ppm으로 실험한 결과를 사용해서 판단한 결과를 보면 실험값이 구리 1ppm일 확률이 0.276, 다이아지는 1ppm일 확률이 0.268, 다이아지는 10ppm일 확률이 0.106, 아트라진 0.01ppm일 확률이 0.14, 철 10ppm일 확률이 0.081, 철 20ppm일 확률이 0.022로 나타난다.

Table 6 Probability change of the water system with 1ppm of Cu as a function of time

Cu	1ppm	0.276
Diazinon	1ppm	0.268
Diazinon	10ppm	0.106
Atrazine	0.01ppm	0.14

Table 7 Probability change of the water system with 10ppm of Cu as a function of time

Cu	10ppm	0.838
Diazinon	100ppm	0.0005
Cyanogen	5ppm	0.013
Cyanogen	10ppm	0.148

Table 8 Probability change of the water system with 10ppm of Cu as a function of time

Cu	100ppm	0.98
Diazinon	100ppm	0.0002
Cyanogen	5ppm	0.0008
Cyanogen	10ppm	0.0084

4. 결 론

참고문헌

본 연구에서는 조류생물경보장치(WEMS-M)을 통해 감지되는 독성물질을 판단하기 위해서 베이 지안 기법을 사용하는 방법을 제시하였다. 이러한 방법을 이용하여 다음과 같은 결론은 얻었다.

1. WEM-TOX값에 따라 2분야로 나누어 판정하는 기법을 사용하면 확률이 올라감을 확인하였다.
2. 독성물질의 WEM-TOX의 평균값이 0.05이하 인 물질들에서는 커브피팅이 잘 되지 않았으며, 베이 지안 기법을 통한 확률계산에 영향을 미쳐 판단이 잘 되지 못하고 비슷한 확률을 가지는 값들이 나타났다.
3. WEM-TOX의 평균값이 0.1보다 커지면서 확률이 현저하게 증가하였으며 0.3이상인 독성물질 들은 99%이상의 확률을 나타냄을 확인할 수 있다.
4. 같은 독성물질이라도 비교할 독성물질의 개 수에 따라서 확률이 달라지는 것을 그룹1과 그룹 2의 구리100ppm과 다이아진은 100ppm으로 확인 하였으며 비교대상의 수가 적을수록 확률이 증가 하는 것을 알 수 있다.

(1) Genty, B., Briantais, j. M., Baker, N. R., 1989, "The relationship between the quantum yield of photosynthetic electron transport and quenching of chlorophyll fluorescence", *Biochim. Biophys. Acta*, Vol. 990, pp. 87~92.

(2) Choi, G. J., Jang, I. H., Lee, J. J., Lee, J. H., 2003, "이공계를 위한 확률과 통계학", pp. 55~58.

Table 9 Results of experiment to determine the toxicity in the water using Bayesian technique with Group1 data

Original toxicity in the water	Probability toxicity in the water	Cu			Diazinon			Cyanogen			Atrazine	Fe		water
		1	10	100	1	10	100	1	5	10	0.01	10	20	Rubber
Cu	1	0.276	0	0	0.268	0.106	0	0.104	0	0	0.14	0.081	0.022	0
	10	0	0.838	0	0	0	0.0005	0	0.013	0.148	0	0	0	0
	100	0	0.0065	0.98	0	0	0.0002	0	0.0008	0.0084	0	0	0	0
Diazinon	1	0.187	0	0	0.3	0.078	0	0.106	0	0	0.159	0.131	0.036	0
	10	0.097	0	0	0.092	0.249	0	0.191	0	0	0.159	0.149	0.059	0
	100	0	0.009	0.0001	0	0	0.98	0	0.0003	0.0025	0	0	0	0
Cyanogen	1	0.087	0	0	0.069	0.184	0	0.248	0	0	0.205	0.131	0.072	0
	5	0	0.0271	0	0	0.0002	0	0.0001	0.82	0.14	0	0.0001	0.0005	0
	10	0	0.062	0	0	0	0	0	0.107	0.83	0	0	0	0
Atrazine	0.01	0.103	0	0	0.127	0.128	0	0.179	0	0	0.203	0.184	0.072	0
Fe	10	0.053	0	0	0.075	0.168	0	0.151	0	0	0.125	0.233	0.19	0
	20	0.039	0	0	0.057	0.125	0	0.113	0.001	0	0.089	0.199	0.375	0
Waste water	Rubber	0	0.0003	0.005	0	0	0.004	0	0	0.0001	0	0	0	0.98

Table 10 Results of experiment to determine the toxicity in the water using Bayesian technique with Group2 data

Original toxicity in the water \ Probability toxicity in the water		Cu	Diazinon	Atrazine		Waste water	
		100	100	0.1	1	Rubber	Pigment
Cu	100	1	0	0	0	0	0
Diazinon	100	0	0.9999	0	0	0	0
Atrazine	0.1	0	0	1	0	0	0
	1	0	0	0	0.9996	0	0.0003
Waste water	Rubber	0	0	0	0	0.997	0.002
	Pigment	0	0	0	0	0.00029	0.9997