

## 레이저유도 플라즈마 분광법을 이용한 폐금속 분류를 위한 추정 연성정보 기반의 최빈 분류 기술

김에덴 · 장혜민 · 신성호 · 정성호 · 황의석

광주과학기술원 기계공학부

### Estimated Soft Information based Most Probable Classification Scheme for Sorting Metal Scraps with Laser-induced Breakdown Spectroscopy

Eden Kim, Hyemin Jang, Sungho Shin, Sungho Jeong and <sup>§</sup>Euseok Hwang

*School of Mechanical Engineering, Gwangju Institute of Science and Technology,  
123 Cheomdangwagi-ro Buk-gu Gwangju 61005, Republic of Korea*

#### 요 약

본 연구에서는 레이저유도 플라즈마 분광법(Laser induced breakdown spectroscopy, LIBS) 기반의 금속 종류별 스펙트럼 데이터를 이용하여 연성정보(soft information)를 추정하고 최빈 클래스로 분류하는(most probable classification) 금속 분류 방법을 제안한다. 폐금속 자원과 같이 사전 정보가 없는 금속을 분류하는 경우 몇 가지 핵심 구성성분에 대한 정량 분석을 통해서 클래스를 추정하는 방법이 효율적이다. 이에 따라 부분 집합 기반의 부분최소제곱회귀법(Partial Least Square Regression, PLSR)을 이용하여 LIBS 검출 스펙트럼으로부터 각 성분의 농도를 독립적으로 신뢰성 있게 추정하고, 인증 표준물질(CRM) 등 알려진 모집합의 농도 정보에 기반하여 최고 확률을 갖도록 분류하는 기술을 제안한다. 샘플 스펙트럼들의 다변량 분석을 통해서 여러 성분의 추정 농도를 다변량 정규 분포를 갖는 것으로 가정하고 통합(Joint) 추정 연성정보를 구할 수 있으며, 이를 활용한 최빈 확률 검출이나 추가적인 사전 정보의 결합 등을 통해서 분류 성능을 향상시킬 수 있다. 제안된 기술의 평가를 위해서 9가지 종류의 CRM 금속시료의 LIBS 스펙트럼 데이터를 사용하며, 부분 집합 기반의 PLSR 농도 추정 기술을 기반으로 단변량 혹은 다변량 정규 분포 연성 정보 추정을 통해 미지 금속의 검출과 연성 정보의 검출 등을 테스트 하였다. 또한 방사형 차트(Radar chart)를 이용하여 추정된 농도와 획득한 연성정보를 효과적으로 시각화함으로써 기존 라이브러리에 포함된 부분 집합의 금속과 비교하여 해당 금속과의 유사성을 그래프를 통해 추정할 수 있다.

**주제어** : 레이저유도 플라즈마 분광법, 폐금속, 분류, 연성정보, 방사형 차트

#### Abstract

In this study, a novel soft information based most probable classification scheme is proposed for sorting recyclable metal alloys with laser induced breakdown spectroscopy (LIBS). Regression analysis with LIBS captured spectrums for estimating concentrations of common elements can be efficient for classifying unknown arbitrary metal alloys, even when that particular alloy is not included for training. Therefore, partial least square regression (PLSR) is employed in the proposed scheme, where spectrums of the certified reference materials (CRMs) are used for training. With the PLSR model, the concentrations of the test

· Received : January 11, 2018 · Revised : January 26, 2018 · Accepted : February 2, 2018

<sup>§</sup> Corresponding Author : Euseok Hwang (E-mail : euseokh@gist.ac.kr)

School of Mechanical Engineering, Gwangju Institute of Science and Technology, 123 Cheomdangwagi-ro, Buk-gu, Gwangju, 61005, Korea

©The Korean Institute of Resources Recycling. All rights reserved. This is an open-access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0/>), which permits unrestricted non-commercial use, distribution and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

spectrum are estimated independently and are compared to those of CRMs for finding out the most probable class. Then, joint soft information can be obtained by assuming multi-variate normal (MVN) distribution, which enables to account the probability measure or a prior information and improves classification performance. For evaluating the proposed schemes, MVN soft information is evaluated based on PLSR of LIBS captured spectrums of 9 metal CRMs, and tested for classifying unknown metal alloys. Furthermore, the likelihood is evaluated with the radar chart to effectively visualize and search the most probable class among the candidates. By the leave-one-out cross validation tests, the proposed scheme is not only showing improved classification accuracies but also helpful for adaptive post-processing to correct the mis-classifications.

**Key words :** Laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS), Metal scrap, Classification, Soft information, Radar plot

## 1. 서 론

세계적으로 금속의 사용과 생산 수요는 계속해서 증가하고 있으며, 이로 인해 금속의 생산과 폐기에 의해 생기는 환경오염 문제를 해결하기 위해 폐금속의 재활용의 중요성이 부각되고 있다<sup>1)</sup>. 기존의 폐금속 선별 기술로는 가시광을 통해 색상으로 구분하거나 X-ray를 이용하여 분류하는 방법, 전자기 센서를 이용한 분류 방법 등이 존재하나, 제한된 속도와 정확도 측면에서 실제 활용성이 높지 않아 아직까지 폐금속 선별 및 재활용기술 산업이 대부분 수선별에 의존하고 있는 실정이다<sup>2-4)</sup>. 따라서, 금속에 함유된 원소에 대해 보다 정확하고 빠른 정량 및 정성 분석이 가능한 레이저유도 플라즈마 분광법(Laser induced breakdown spectroscopy, LIBS)을 이용한 연구가 진행되고 있다. LIBS 기술은 시료 표면에 나노초 펄스 레이저를 조사하였을 때 플라즈마가 발생하고, 이는 종류 및 여기 상태(excited state)와 기저 상태(ground state)의 에너지 차이에 따라 고유의 파장을 갖는 빛을 방출하기 때문에, 이 때 발생하는 분광신호를 수집 및 분석하여 시료의 구성성분을 알아낼 수 있다. 따라서 LIBS 기술은 측정을 짧은 시간 안에 완료하며 별도의 샘플링이나 전처리 없이 비접촉으로 측정이 가능하다는 장점이 있으며 기존 선별 기술 보다 높은 정확성을 보인다<sup>5)</sup>. 또한, 다양한 분야에 적용가능하며 실제로 화성 토양 분석, 환경 모니터링, 암세포 검출 등의 용도로도 응용되고 있다<sup>6-8)</sup>.

하지만 LIBS 기반으로 측정된 데이터는 자가 흡수 효과, 매트릭스 효과, 매 측정에 따른 변동 등 예측하기 어려운 왜곡들에 의해 정량 분석이나 선별의 정확성이 저하 될 수 있다<sup>8-10)</sup>. 이러한 문제를 완화시키기 위해 스펙트럼 데이터의 효과적인 정규화 방법이 필요하다. 기존의 정규화 방법은 최대 스펙트럼 피크에 대한 정규화, 내부 표준 피크에 대한 정규화 방법 등이 있다. 최

대 스펙트럼 피크에 대한 정규화의 경우, 모든 스펙트럼 데이터를 최대 스펙트럼 피크강도로 나누어 주면서 0과 1사이의 값으로 만든다. 내부 표준 피크에 대한 정규화는 요소 농도와 일관성이 있는 관련 피크를 택하여 나누어줌으로써 정규화 하는 방법으로, 공통적으로 일정한 농도의 미량 성분이 있는 분류의 경우 우수한 성능을 보이는 것으로 제안되었다<sup>11)</sup>. 반면, 본 연구에서는 동종 금속을 분류하는 경우에는 기존의 정규화 방법들 보다 효과적인 실효값(Root Mean Square, RMS) 정규화를 사용하였다.

정규화 된 LIBS 기반 스펙트럼 데이터는 정량분석에 기초하여 금속 원소의 농도를 추정할 수 있으며, 추정된 농도를 통해 효과적인 금속 분류를 수행할 수 있다. 정량 분석을 위해 부분최소제곱회귀법(Partial Least Square Regression, PLSR), 서포트벡터머신(Support Vector Machine, SVM), 인공지능신경망(Artificial Neural Network, ANN) 등의 다양한 회귀 분석 방법들이 연구되었다<sup>12)</sup>. 이 중 PLSR 기법은 매트릭스 효과를 완화하고 잡음이 많은 데이터를 효율적으로 처리할 수 있는 방법으로 본 연구에 사용되었다<sup>13)</sup>. 본 연구에서는 사전 정보가 없는 미지의 폐금속에 포함된 4가지 원소 성분(Al, Cu, Zn, Fe) 농도를 추정 하고 통계적 특성을 기반으로 가우시안 분포의 연성정보를 획득하였고, 추정 연성정보 기반의 최빈 분류방법을 이용해 금속을 분류해 내는 기술을 제안하였다. 추가적으로 다변량 정규 분포를 가정한 통합 연성 정보를 통해서 분류 성능을 향상시킬 수 있었다. 알루미늄과 구리 계열의 9 가지 종류 CRM 금속시료들의 LIBS 스펙트럼 데이터를 사용하여 제안된 기술의 평가를 진행하였으며, 부분 집합의 PLSR 농도 추정 기술을 기반으로 단변량 혹은 다변량 정규 분포 연성 정보 추정을 통해 미지 금속의 검출과 연성 정보의 검출 등을 테스트 하였다. 최종적으로는 방사형 플롯을 이용하여 기존 라이브러리에 있

는 참조 금속들의 농도와 측정된 폐금속의 농도를 입체적으로 비교함으로써 보다 효과적인 시각화를 통해 분류의 이해도를 높일 수 있음을 보였다.

## 2. 연구 방법

### 2.1. 실험 시료 및 측정

본 연구에서는 NIST(National Institute of Standards and Technology)와 Brammer<sup>14)</sup>에서 알루미늄과 구리 계열의 시료들을 각각 2개, 7개씩 총 9개의 금속 표준 시료들을 획득하였다. Table 1과 같이 획득한 9개의 금속 시료들에 관해 NIST와 Brammer에서 제공하는 원소 성분 농도를 참고하여 정량분석을 진행하고 평가하였다.

Fig. 1은 LIBS 시스템<sup>15)</sup>의 구조 개략도를 보여준다.

Table 1. Experimental CRMs data

	CRMs	Cu (%)	Zn (%)	Fe (%)	Al (%)
Aluminum alloy	134/05	0.0038	0.0012	0.286	99.5
	232/02	4.28	0.102	0.501	92.8
Copper alloy	1107	61.183	37.396	0.0389	0.083
	1110	84.59	15.20	0.033	-
	1111	87.14	12.81	0.010	-
	1112	93.38	6.30	0.070	-
	1113	95.03	4.80	0.043	-
	1114	96.45	3.47	0.017	-
	BS110B	99.94	0.0003	0.0005	0.0002

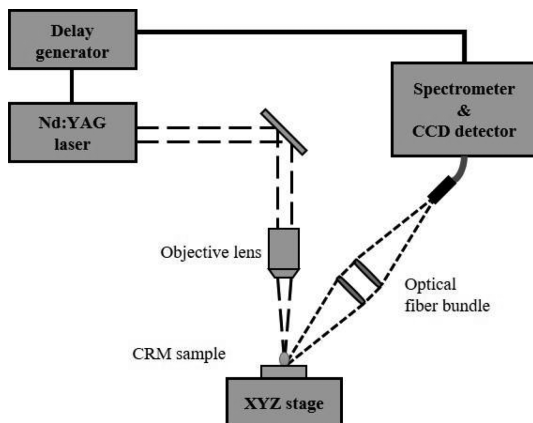


Fig. 1. Schematic diagram of LIBS system.

Table 2. Experimental conditions of LIBS system

Laser source	Q-switched Nd:YAG laser ( $\lambda = 532$ nm, $\tau = 5$ ns)
Fluence	20.6 J/cm <sup>2</sup>
Number of spectra	11 pulses $\times$ 10 points
Spectrometer	6 channel, 0.1 nm resolution, 187-1045 nm range
CCD conditions	1.05 ms gate width, 0.2 $\mu$ s gate delay

본 실험에 사용된 레이저는 약 5 ns의 펄스폭을 갖는 2차 조화파( $\lambda = 532$  nm) 야그레이저(Q-switched Nd:YAG, New-Wave Research Inc., Polaris II)이며 대물렌즈를 통해 금속 표면위에 수직으로 조사된다. 45도 대각선 방향에서 2개의 렌즈와 광섬유를 이용하여 금속 시료에 조사되어 발생하는 플라즈마 분광신호를 수집하였고 CCD-분광기로 분석하였다. 9가지의 금속을 각각 측정할 때 Table 2와 같이 동일한 실험조건을 설정하여 진행하였고 첫 번째 조사는 표면 클리닝 목적으로 실험 데이터로는 사용하지 않았다.

### 2.2. 신호 전처리를 위한 실효값 정규화(RMS normalization)

위 서론에서 언급된 것처럼 LIBS 기반 스펙트럼 데이터는 예측 불가능한 요소들이 정량 분석과 분류 성능 등에 영향을 크게 미치기 때문에 이를 완화시키기 위하여 정규화 과정이 반드시 필요하다. 본 연구에서는 효과적으로 이러한 요소들을 완화시키기 위하여 실효값 정규화를 사용하였다. 실효값 정규화는 전체 파장에 대한 스펙트럼 데이터의 실효값을 구해 그 값을 전체적으로 나누어 주는 방법이다. 관련된 수식은 다음과 같다.

$$\bar{x}_i = \frac{\sqrt{x_{0,i}^2 + x_{1,i}^2 + \dots + x_{L-1,i}^2}}{L} \quad (1)$$

여기서,  $x_{i,j}$ 은  $i$ 번째 샷의  $j$ 번째 파장에 대한 스펙트럼 피크의 강도를 나타내고  $L$ 은 한 번의 샷으로 얻는 데이터의 개수를 의미한다. 실효값은 스펙트럼 전체 에너지의 제곱근 값으로 나누었을 때, 기존의 가공되지 않은 데이터의 형태와 상대적인 주파수 특성 분포를 유지하고 스케일만 줄임으로써 기존의 정보를 잃지 않으므로 분류에 효율적으로 정규화 할 수 있는 특징을 가진다.

### 2.3. 추정 연성정보 기반의 최빈 분류방법

본 연구는 연성정보 기반의 최빈 분류를 위해서 정량 분석 방법으로 PLSR 방법을 적용하였다. 2.1에서 언급된 바와 같이 9개의 다른 금속 시편들에 대해서 각각 획득된 100개의 데이터를 PLSR 기반으로 각 시편마다 농도의 평균과 표준편차 오차를 추정한다. 본 연구에서는 Table 1에 나오는 9가지의 금속 중에 목표 시편 금속의 스펙트럼을  $\{\mathbf{x}_i^{(t)}\}$  라 하고, 나머지 8가지의 금속의 총 800개의 스펙트럼들을,  $\{\mathbf{x}_i^{(t \neq t)}\} \forall i, \forall t \neq t$ , 트레이닝 집합으로 고려하여 각 시편 금속에 포함된 원소들의 농도를 다음과 같이 추정하였다.

$$y_{\alpha,i}^{(t)} = g_{\alpha}^{(t)}(\mathbf{x}_i^{(t)}) \quad (2)$$

여기서  $y_{\alpha,i}^{(t)}$  은  $\mathbf{x}_i^{(t)}$  측정에서 원소  $\alpha$ 의 농도를 나타내고  $g_{\alpha}^{(t)}$  는  $\forall t \neq t$  금속들로 트레이닝한 해당 원소의 회귀함수를 나타낸다. Fig. 2는 구리1110를 미지의 금속으로 가정하고 다른 금속들의 구리 성분 농도의 평균값과 에러의 표준 편차를 각각 (a)와 (b)에 파란점으로 나타내었고, 점선은 각각 선형과 다항식 피팅 결과를 보여준다. 미지의 금속인 구리1110의 경우 금속에 포함된 구리 성분 농도의 평균값과 에러의 표준 편차를 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\hat{\mu}_{Cu}^{(cu1110)} = \frac{1}{M} \sum_{i=0}^{M-1} y_{Cu,i}^{(cu1110)} \quad (3)$$

$$\hat{\sigma}_{Cu}^{(cu1110)} = \sqrt{\frac{1}{M} \sum_{i=0}^{M-1} (y_{Cu,i}^{(cu1110)} - \hat{\mu}_{Cu}^{(cu1110)})^2} \quad (4)$$

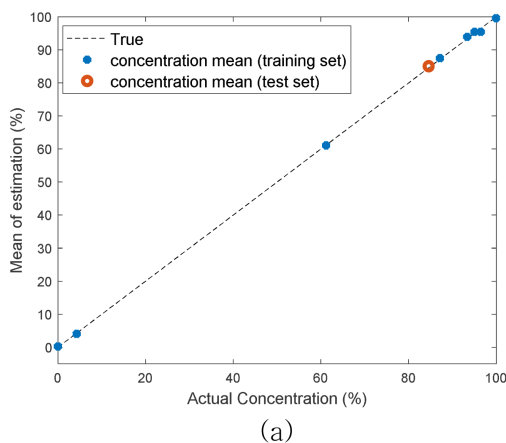


Fig. 2에 각각 붉은색 원으로 나타내었고, 피팅 결과와 거의 일치함을 보여 미지의 금속에 대한 통계적 정보를 주변 금속들로부터 추정할 수 있음을 알 수 있다. 추정 값이 단변량 가우시안 분포를 따른다고 가정하면 Fig. 2의 경우 구리 성분  $y_{Cu,i}^{(cu1110)}$  는  $N(\hat{\mu}_{Cu}^{(cu1110)}, \hat{\sigma}_{Cu}^{(cu1110)^2})$  분포를 갖는 연성정보를 제공할 수 있다. 여기서  $N(\mu, \sigma^2)$  는 평균  $\mu$ , 분산  $\sigma^2$ 의 가우시안 분포를 나타내고,  $\hat{\mu}_{Cu}^{(cu1110)}$  와  $\hat{\sigma}_{Cu}^{(cu1110)}$  는 해당 금속을 모른다고 가정하고 Fig. 2에서 피팅을 통해서 얻어낸 평균과 에러의 표준 편차를 나타낸다. 따라서 스펙트럼  $\mathbf{x}_j$ 가 다차원의 미소 공간  $V$ 를 가질 때  $t$  클래스일 확률은 아래와 같고, 이를 연성 정보로 검출하거나 확률이 가장 큰 클래스로 분류 할 수 있다.

$$p^{(t)}(\mathbf{x}_j) = \int_V \left[ \prod_{\alpha} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hat{\sigma}_{\alpha}^{(t)^2}}} \exp\left(-\frac{y_{\alpha,j} - \hat{\mu}_{\alpha}^{(t)^2}}{2\hat{\sigma}_{\alpha}^{(t)^2}}\right) \right] dV \quad (5)$$

$$t' = \operatorname{argmax}_t p^{(t)}(\mathbf{x}_j) \quad (6)$$

실제 원소 성분들의 농도는 상관성이 있기 때문에 다변량 분석을 통해서 연성 정보와 분류의 정확도를 높일 수 있다. 본 연구에서는 4가지 원소(Al, Cu, Zn, Fe)들의 농도를 통합(joint)으로 추정하고, 평균 벡터  $\hat{\mu}^{(t)}$ 와 공분산  $\hat{C}^{(t)}$ 를 추정하여 4차원 정규 확률 분포 함수(Multi-variate normal probability density function, mvn-pdf)에 기반한 연성 정보를 아래와 같이 구할 수 있다.

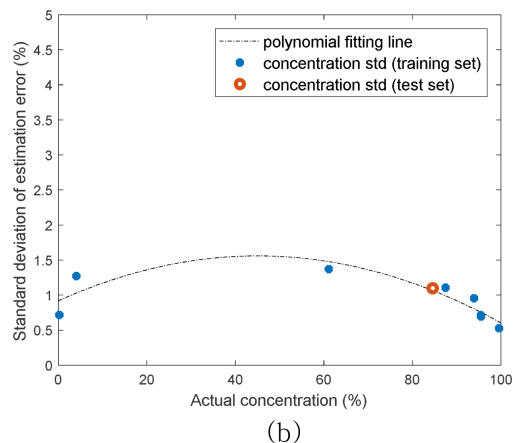


Fig. 2. (a) Estimation of mean of Cu concentration using copper alloys, (b) Estimation of standard deviation error of Cu concentration using copper alloys.

$$p^{(l)}(\mathbf{x}_j) = \int_V \left[ \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^k |\hat{C}^{(l)}|}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{y} - \hat{\boldsymbol{\mu}}^{(l)})^T \hat{C}^{(l)-1} (\mathbf{y} - \hat{\boldsymbol{\mu}}^{(l)})\right) \right] dV \quad (7)$$

이때  $\mathbf{y}$ 는 알려진 합금들의 추정 농도인  $g_\alpha(\mathbf{x}_j)$  들의 4차원 벡터이다. 이때 공분산의 대각 성분이 미소 값을 갖는 경우, 이들 성분을 제외한  $\hat{\boldsymbol{\mu}}^{(l)}$ 와 공분산  $\hat{C}^{(l)}$ 를 통해서 mvn-pdf를 효율적으로 구할 수 있다. 이러한 연성 정보를 기반으로 기존 라이브러리에 최빈 확률을 갖는 금속으로 분류할 수 있다.

$$l'' = \operatorname{argmax}_l p^{(l)}(\mathbf{x}_j) \quad (8)$$

또한 연성 검출로 확률 정보들을 저장하고, 추후 인접 스펙트럼들의 상관관계와 사전 확률 정보 등을 이용하여 분류의 정확도를 높일 수도 있다.

### 3. 실험 결과

#### 3.1. 실효값 정규화(RMS normalization) 효과 분석

실효값 정규화의 효과를 비교하기 위해 구리 1107, 1110~1114, BS110 7가지 시료에서 측정된 700개의 스펙트럼 데이터를 사용하여 분류 특성을 평가하였다. 서론에 언급된 것처럼 기존에 자주 사용되는 정규화 방법인 최대 스펙트럼 피크에 대한 정규화, 내부 표준 피크에 대한 정규화와 정규화를 하지 않았을 때, 그리고 본 연구에서 사용한 실효값 정규화 4가지 방법에 대해서 비교하였다. 내부 표준 피크에 대한 정규화의 경우는 Table 1에서 볼 수 있듯이 구리 시료들 중에 공통적이면서 가장 일정한 미량 성분이 Fe이기 때문에 Fe성분의 피크 스펙트럼선을 선정하였다. 정규화 적용 후 측정 시기마다의 변동의 정도를 비교하기 위해 다음과 같은 변동 계수 (coefficient of variation)를 지표로 사용하였다<sup>16)</sup>.

$$CV = \frac{\sigma}{\mu} \quad (9)$$

Fig. 3은 구리계열 시료에서 강도가 높은 320~340 nm 대역에서의 정규화 방법에 따른 변동 계수를 나타낸다. 가공되지 않은 데이터에 비해 정규화를 통해서 변동성을 줄일 수 있음을 보였고, 실효값 정규화는 특정 스펙트럼선에 의존한 것이 아닌 스펙트럼 전체 에너지를 고려하기 때문에 기존의 정규화 방법들 보다 실효값 정규화가 변동성 저감에 효과적임을 알 수 있다.

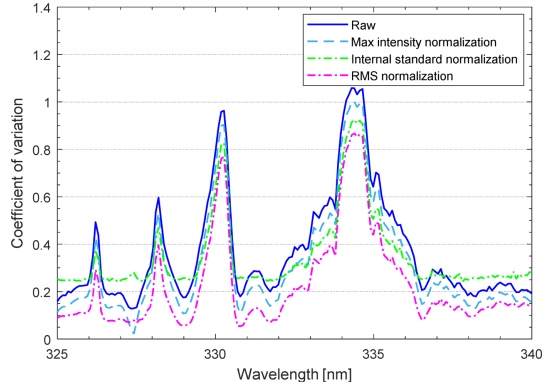


Fig. 3. Comparison with coefficient of variation using copper alloys.

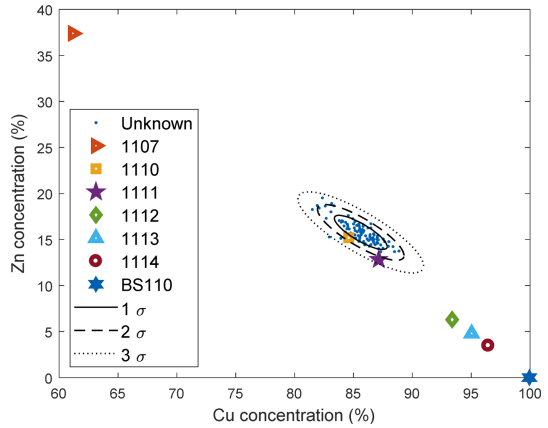


Fig. 4. Two dimensional estimated soft information of Cu and Zn concentration based on most probable classification.

#### 3.2. 추정 연성정보 기반의 최빈 분류방법 평가

먼저 추정 연성정보 기반의 최빈 분류 방법을 평가하기 위해서 위의 2.3 경우와 같이 미지의 금속을 구리 1110이라고 가정하고, 다른 8종 금속의 스펙트럼 데이터로 트레이닝을 진행 하였다. 미지의 금속이 포함하는 원소의 농도에 대한 연성정보 즉, 평균과 분산의 값을 식 (3), (4)와 같이 추정하여 제공하기 때문에 연성정보를 이용하여 각 농도에 대한 정규 확률 분포를 식 (5), (7)을 통해서 구할 수 있다. 본 실험에서는 구리 계열의 동종금속을 분별하기 위하여 구리 농도와 아연 농도를 고려하였고, 각 구리 농도와 아연 농도의 추정된 연성정보를 기반으로 mvn-pdf를 구함으로써 어떤 라이브러리 금속 데이터가 가장 높은 확률을 갖는지 찾아내는 테스트를 진행 하였다. Fig. 5는 미지의 금속 데이터가

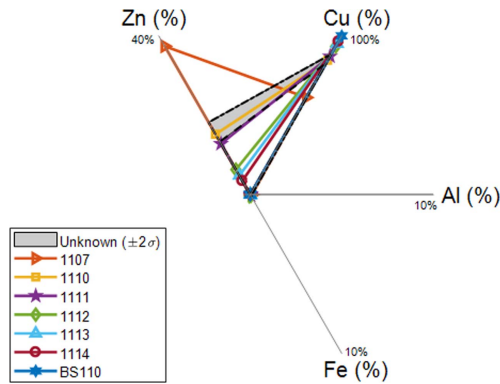


Fig. 5. Radar plot visualization.

가지는 구리와 아연 농도의 2차원의 분포도와 기존의 라이브러리에 속해있는 데이터들의 분포 위치를 나타낸다. 미지의 금속은 타원의 형태로 분포를 보이고 있으며 구리1110의 기존 금속 데이터의 가능성이 가장 높음을 보여주고 다음으로 구리1111 금속 데이터의 가능성이 두 번째로 높음을 보여준다. 따라서 제안된 방법을 통하여 PLSR 트레이닝 과정에서 구리1110 데이터가 포함되지 않았음에도, 연성정보 기반의 농도 추정을 통해서 구리1110으로 적절히 분류해 낼 수 있음을 보여준다. 다음으로 다변량 분석을 통한 다차원 정규 분포 연성정보를 기반으로 한 최빈 분류의 성능을 확인하기 위해서, 각 시편의 스펙트럼의 트레이닝 집합과 테스트 집합을 9:1의 비율로 임의로 선택하여 교차 검증을 진행하였고 반복 실험 결과를 Table 3에 나타내었다. 최빈 분류를 통해서 동종 합금의 경우도 오류 없이 분류할 수 있으며, 연성 정보를 통해서 유사 분류 오류

패턴 등을 확인함으로써 분류의 정확도를 높일 수 있다. 또한 분류에 대한 사전 확률 정보나 금속의 색깔, 모양, 거칠기 등의 부가 정보가 있는 경우 제안된 연성 정보와 통합하여 추가적으로 분류 정확도를 높일 수 있을 것이다.

### 3.3. 방사형 플롯을 이용한 시각화

본 연구에서는 추정 연성정보 기반의 최빈 분류방법을 확장하여 방사형 플롯을 이용한 시각화 방법도 함께 제안한다. 단순한 금속선별 결과 클래스 데이터만 제공하는 것이 아니라, 위의 과정을 통해 분류하고자 하는 미지의 금속의 성분 농도 값을 연성정보와 함께 추정하기 때문에 정량적으로 금속의 각 원소 함유량의 정보와 그에 따른 불확실성을 알 수 있었다. 따라서, 미지의 금속이 연성정보를 통해 4가지 원소 성분들을 어느 정도 포함 하고 있는지 보여줄 수 있고, 기존의 라이브러리에 저장되어있는 어떤 금속과 가장 유사하게 원소를 함유하고 있어 분류되었는지에 대한 정보를 Fig. 6과 같이 보여줄 수 있다. 미지의 금속은 구리 농도는  $85.62 \pm 2.96\%$ , 아연의 농도는  $15.78 \pm 2.44\%$  사이의 정보를 약 95% 가지고 있음을 보여주며, 역시 기존 데이터의 구리1110과 가장 유사한 금속이라는 결과를 보여준다.

## 4. 결 론

본 연구에서는 금속선별의 정확도를 높이고 다양한 정보를 고려하기 위하여 연성정보를 기반한 최빈 분류 방법을 제안하였다. 실효값 정규화 과정을 통해 LIBS

Table 3. Result of estimated probability based on soft information using 9:1 cross-validation

		Al134/05	Al232/02	Cu1107	Cu1110	Cu1111	Cu1112	Cu1113	Cu1114	BS110
Al	134/05	0.7263	2.57e-5	0	0	0	0	0	0	0
	232/02	1.30e-7	0.498	0	0	0	0	0	0	0
Cu	1107	0	0	0.384	0	0	0	0	0	0
	1110	0	0	0	0.310	0.014	0	0	0	0
	1111	0	0	0	0.004	0.511	8.2e-16	0	0	0
	1112	0	0	0	2.9e-26	7.7e-19	0.566	0.002	6.43e-6	1.0e-22
	1113	0	0	0	5.9e-61	1.4e-28	0.242	0.794	0.415	2.9e-13
	1114	0	0	0	0	1.6e-40	8.45e-4	0.311	0.464	2.23e-7
	BS110	0	0	0	0	0	8.4e-15	2.1e-28	3.7e-19	0.614

데이터를 전처리하고 정규화 된 스펙트럼 데이터로 PLSR 방법을 통하여 트레이닝하고 정량분석을 진행하였다. 이때 미지 금속을 고려하여 해당 금속을 제외하고 트레이닝 하였으며, 농도에 관해 추정된 평균과 표준오차의 통계적 특성을 갖는 가우시안 분포를 가정하였다. 다차원 정규 확률 분포 함수에 의해 구해진 확률을 통해 가장 높은 확률에 따라 금속을 분류하고 방사형 플롯으로 시각화함으로써 보다 효과적이고 정확하게 분류 할 수 있었다. 또한 추정된 연성 정보에 사전 확률 분포와 부가 정보 등을 통합하여 추가적으로 분류의 정확도를 높일 수 있을 것이다.

### 감사의 글

본 논문은 환경부 글로벌담 환경기술개발사업 중 유용자원재활용기술개발사업의 지원에 의하여 연구되었으며 이에 감사드립니다(과제번호:2016002250003).

### References

- Gurell, J., et al., 2012 : *Laser induced breakdown spectroscopy for fast elemental analysis and sorting of metallic scrap pieces using certified reference materials*, Spectrochim. Acta, Part B., 74-75, pp.46-50.
- Choi, H. K. et al., 2007 : *Technology development of separation for waste plastics by the near-infrared spectra method*, KIC News, 10(3), pp.22-41.
- Koyanak, S. and Kobayashi, K., 2010 : *Automatic sorting of lightweight metal scrap by sensing apparent density and three-dimensional shape*, Resour Conserv Recycl., 54, pp.571-578.
- Jung, I. S. et al., 2015 : *Overview and recent development of recycling small waste electrical and electronic equipment (WEEE)*, J. of Korean Inst. of Resources Recycling, 24(4), pp.38-49.
- Cremers, D. A. and Radziemski, L. J., 2006 : *Handbook of laser-induced breakdown spectroscopy*, pp.23-53, 2<sup>nd</sup> Edition, John Wiley & Sons Ltd, England.
- Sallé, Béatrice, et al., 2014 : *Laser-induced breakdown spectroscopy for Mars surface analysis: capabilities at stand-off distances and detection of chlorine and sulfur elements*, Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 59(9), pp.1413-1422.
- Kumar, Akshaya, et al., 2004 : *Characterization of malignant tissue cells by laser-induced breakdown spectroscopy*, Applied optics, 43(28), pp.5399-5403.
- Gaudiuso, Rosalba, et al., 2010 : *Laser induced breakdown spectroscopy for elemental analysis in environmental, cultural heritage and space applications: a review of methods and results*, Sensors, 10(8), pp.7434-7468.
- Anabitarte, F., A. Cobo, and José Miguel Lopez-Higuera., 2012 : *Laser-induced breakdown spectroscopy: fundamentals, applications, and challenges*, ISRN Spectroscopy 2012.
- In, Jung-Hwan, et al., 2013 : *Improvement of selenium analysis during laser-induced breakdown spectroscopy measurement of CuIn 1-x Ga x Se2 solar cell films by self-absorption corrected normalization*, Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 28(8), pp.1327-1337.
- Syvilay, D., et al., *Trace element quantification of lead based roof sheets of historical monuments by laser induced breakdown spectroscopy*, Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 103, pp.34-42.
- Boucher, Thomas F., et al., 2015 : *A study of machine learning regression methods for major elemental analysis of rocks using laser-induced breakdown spectroscopy*, Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 107, pp.1-10.
- Clegg, Samuel M., et al., 2009 : *Multivariate analysis of remote laser-induced breakdown spectroscopy spectra using partial least squares, principal component analysis, and related techniques*, Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 64(1), pp.79-88.
- Brammer standard reference materials, <http://www.brammerstandard.com/>
- Shin, S. H., et al., 2016 : *Multivariate analysis for classification of metals by laser induced breakdown spectroscopy*, Spring Annual Proc. Korean Soc. of Laser Processing.
- Jang, H. M., et al., 2018 : *Most informative Spectral Line Processing Scheme for Laser-induced Breakdown Spectroscopy based Classification of Same-base Alloys*, Submitted to Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy

---

### 김 에 덴

- 한동대학교 기계제어공학부 학사
  - 현재 광주과학기술원 기계공학부 석사과정
-

<b>장 해 민</b>	<b>신 성 호</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>•이주대학교 기계공학과 학사</li> <li>•현재 광주과학기술원 기계공학부 석사과정</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>•광주과학기술원 의료시스템학과 석사</li> <li>•현재 광주과학기술원 기계공학부 박사과정</li> </ul>
<b>정 성 호</b>	<b>황 의 석</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>•University of California at Berkeley 기계공학 박사</li> <li>•현재 광주과학기술원 기계공학부 교수</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>•Carnegie Mellon University 전기컴퓨터 공학과 박사</li> <li>•현재 광주과학기술원 기계공학부 조교수</li> </ul>

《**광 고**》 본學會에서 發刊한 자료를 판매하오니 學會사무실로 문의 바랍니다.

- \* EARTH '93 Proceeding(1993) 457쪽, 價格 : 20,000원  
(The 2th International Symposium on East Asian Resources Recycling Technology)
- \* 자원리사이클링의 실제(1994) 400쪽, 價格 : 15,000원
- \* 학회지 합본집 I~X 價格 : 40,000원, 50,000원(비회원)  
(I: 통권 제1호~제10호, II: 통권 제11호~제20호, III: 통권 제21호~제30호, IV: 통권 제31~제40호,  
V: 통권 제41호~제50호, VI: 통권 제51호~제62호, VII: 통권 제63호~제74호, VIII: 통권 제75호~제86호  
IX: 통권 제87호~제98호, X: 통권 제99호~제110호)
- \* 한·일자원리사이클링공동워크샵 논문집(1996) 483쪽, 價格 : 30,000원
- \* 한·미자원리사이클링공동워크샵 논문집(1996) 174쪽, 價格 : 15,000원
- \* 자원리사이클링 총서I(1997년 1월) 311쪽, 價格 : 18,000원
- \* '97 미주 자원재활용기술실태조사(1997년) 107쪽, 價格 : 15,000원
- \* 日本의 리사이클링 産業(1998년 1월) 395쪽, 價格 : 22,000원, 발행처-文知社
- \* EARTH 2001 Proceeding (2001) 788쪽, 價格 : 100,000원  
(The 6th International Symposium on East Asian Resources Recycling Technology)
- \* 오재현의 자동차 리사이클링기행(2003년 2월) 312쪽, 價格 : 20,000원, 발행처-MJ미디어
- \* 리사이클링백서(자원재활용백서, 1999년) 440쪽, 價格 : 15,000원, 발행처-文知社
- \* 리사이클링백서(자원재활용백서, 2004년) 578쪽, 價格 : 27,000원, 발행처-淸文閣
- \* 리사이클링백서(자원재활용백서, 2009년) 592쪽, 價格 : 30,000원, 발행처-淸文閣
- \* EARTH 2009 Proceeding (2009) 911쪽, 價格 : 100,000원  
(The 10th International Symposium on East Asian Resources Recycling Technology)
- \* 리사이클링백서(자원재활용백서, 2014년) 435쪽, 價格 : 35,000원, 발행처-S&M미디어(주)