

인공신경망을 이용한 BTX 농도 측정에 관한 연구

정영창* · 김동진* · 홍철호* · 이장훈** · 권혁구**

The study to measure of the BTX concentration using ANN

Jung Young-Chang*, Kim Dong-Jin*, Hong Chol-ho*
Lee Jang-Hun** and Kwon Hyuk-Ku**

요 약 휘발성유기 화합물(Volatile Organic Compounds : VOCs)은 탄화수소 화합물을 총칭한다. 이는 오존 및 광화학 스모그의 원인물질일 뿐 아니라 인체에는 암을 유발시키는 유해 물질이다. 또한 대기 중 악취 물질로서 환경 및 건강에 영향을 초래하는 유해성 물질이다. 본 논문은 대기 중에 포함된 암을 유발시키는 유해성 물질인 BTX(Benzene, Toluene, Xylene)의 존재 유무와 농도 측정에 대해서 연구하였다. 다종의 가스센서를 어레이하여 BTX 가스를 측정하고 인공신경망(Artificial Neural Network : ANN)의 역전파(Back propagation : BP) 알고리즘으로 시뮬레이션과 실험을 통해 농도를 추론하였다. ANN 모듈은 기준 데이터를 시뮬레이션을 통해 학습시키고, 가스를 주입하여 실험 할 때 학습된 델타 모델에 근거하여 추론을 할 수 있는 추론 알고리즘 모듈이다. 이 모듈은 기준데이터를 MATLAB 코드로 시뮬레이션을 하여 생성된 parameter를 가지고 수행했으며, 시뮬레이션 결과를 실험을 통해 비교 테스트하여 검증하였다.

Abstract Air quality monitoring is a primary activity for industrial and social environment. Especially, the VOCs(Volatile Organic Compounds) are very harmful for human and environment. Throughout this research, we designed sensor array with various kinds of gas sensor, and the recognition algorithm with ANN(Artificial Neural Network : BP), respectively. We have designed system to recognize various kinds and quantities of VOCs, such as benzene, toluene, and xylene.

Key Words : VOCs, Sensor array, ANN

1. 서 론

휘발성유기 화합물(Volatile Organic Compounds : VOCs)은 탄화수소 화합물을 총칭한다. 이는 오존 및 광화학 스모그의 원인물질일 뿐 아니라 인체에는 암을 유발시키는 유해 물질이다[1].

본 논문은 대기 중에 포함된 암을 유발시키는 유해성 물질인 BTX(벤젠, 톨루엔, 자일렌)의 존재 유무와 농도 측정에 대해서 연구하였다. 다종의 가스센서를 어레이(Array)하여 BTX 가스를 측정하고 인공신경망 (Artificial Neural Network : ANN)의 역전파(Back propagation : BP) 알고리즘을 이용하여 시뮬레이션 하고 실험을 통하여 농도를 추론하였다.

2. Gas sensor and Sensor array

2.1 가스 센서 동작 원리

대기 중에 포함된 유해가스를 측정하기 위하여 다종의 가스 센서를 어레이하여 구성하였다. 가스 센서는 산소가 흡착되고 감지 가스가 주입되었을 때 산소를 탈착 시키는 과정을 통해서 전기전도도의 변화를 일으킨다. 즉 전위장벽의 변화를 일으켜 센서 내부에 전기적인 변화(센서 저항의 변화)를 이용하여 가스의 농도를 측정할 수 있다.

그림 1은 센서 감지부에 감지 가스가 주입하지 않은 상태에서 산소와 반응하는 모습을 나타낸 것이다. 이에 대한 화학적 반응식은 식 (1)과 같다. 센서 감지부에 산소가 흡착되면 센서 내부의 전기 전도도가 낮아져 전자 흐름을 방해하는 전위장벽이 높아진다.

*호서대학교 전기정보통신공학부
**호서대학교 환경안전공학부

$$\frac{1}{2}O_2 + (SnO_{2x}) \rightarrow O^- ad(SnO_{2x}) \quad (1)$$

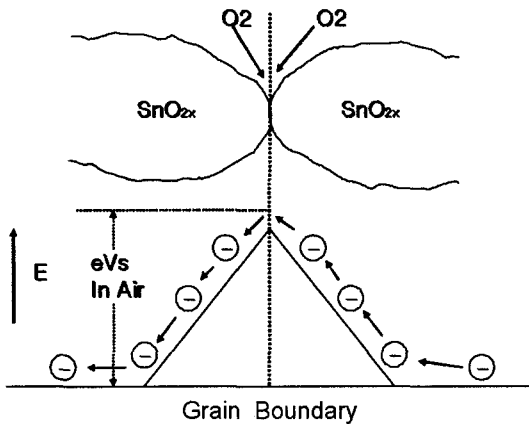
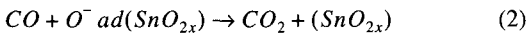


그림 1. 센서 감지부 산소 흡착

센서 감지부에 감지 가스가 주입되면 센서 표면에 흡착되어 있던 산소와 감지가스가 화학적인 반응을 일으켜 산소를 탈착시키게 된다. 이때 센서 내부의 전기 전도도는 높아지고 전위장벽이 낮아진다. 그림 2는 센서 감지부에 감지 가스가 주입된 상태에서의 반응을 나타내었고 화학적 반응식은 식 (2)와 같다.



센서 표면에 산소를 흡착하고 탈착하는 반응을 통해 식 (3)과 같이 센서의 저항변화를 나타낼 수 있다. 센서 저항의 변화는 가스 농도에 지수적으로 비례하는 것을 알 수 있다[2][3][4].

$$R_s = A[C]^{-\alpha} \quad (3)$$

where : R_s = 저항, C = 가스 농도,
 A = 상수, α = 기울기

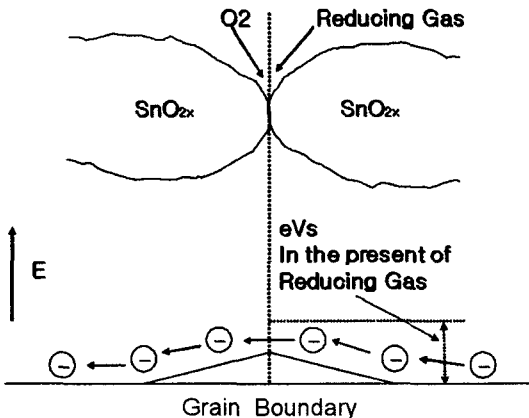


그림 2. 센서 감지부 감지가스 주입

2.2 센서 어레이

가스 센서는 감지 가스에 대해 아주 민감하고 빠른 반응을 보여준다. 그러나 단일 가스에 대한 특정한 반응을 보여주는 선택성이 부족하다. 이러한 문제를 보완하기 위해 다종의 센서를 어레이 하여 사용하였다.

센서 어레이는 EPA(Environmental Protection Agency : 미국 환경 보호청)의 TO-14A에서 제시한 가스 샘플링에 이용되는 Canister의 제작 방법을 사용하였다. 제작된 센서 어레이는 TO-14A에 의해 가스의 성상의 변질과 어레이 내부 표면에서의 흡착 등을 방지하기 위하여 스테인리스 스틸 316L을 사용하였고 전해 연마를 수행하여 제작하였다[5].

가스 및 공기의 흐름을 단순하게 하기 위하여 센서 어레이 내부의 가스의 통로를 직선으로 하였고 통로의 주변에 센서를 위치하도록 하였다. 또한 센서의 감지부가 가스를 충분히 받아들일 수 있게 노출시켰으며, 센서 연결부를 통해 누출되는 가스를 차단하기 위해 O-ring을 사용하였다.

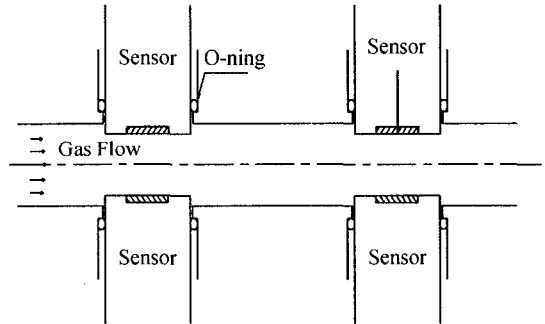


그림 3. 센서 어레이 설계

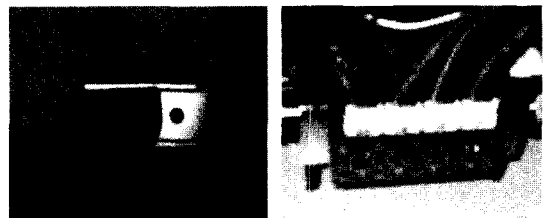


그림 4. 제작된 센서 어레이

3. 인공신경망(ANN)

ANN의 구조는 입력 층(Input Layer), 은닉 층(Hidden Layer), 출력 층(Output Layer)으로 구성된다. 이들은 처리 요소(Processing Element)들을 모아 층을 이루고 있다.

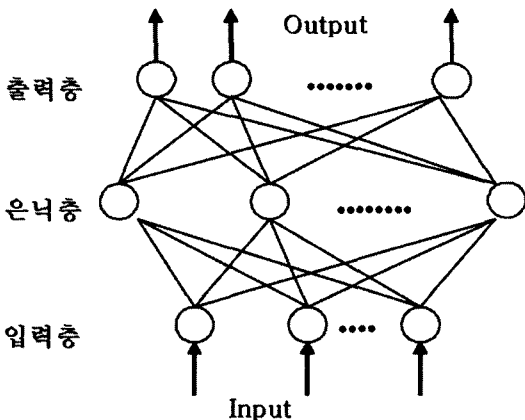


그림 5. 인공신경망의 구조

처리 요소는 활성화 함수(Activation Function)라 하는데 이것은 연결 가중치(Connection Weight)와 전이함수(Transfer Function)이다. 입력을 받아들여 연결 가중치를 사용하여 입력 값을 계산하고, 가중치를 고려한 입력 값을 전이 함수를 이용하여 출력 값으로 변환한다.

인공신경망의 각 처리 요소들의 출력 값들은 인공신경망의 출력 결과를 결정하게 된다. 인공신경망을 이용하여 원하는 출력 값을 얻기 위해서는 연결 가중치를 조절해야만 한다. 모든 인공신경망은 주어진 자료들을 이용하여 처리 요소들 간의 연결 가중치를 스스로 조정하게 되는데 이 과정을 학습이라 한다. 학습 방법의 가장 기본적인 분류는 지도 학습(Supervised Learning)과 자율 학습(Unsupervised Learning)이다. 지도학습은 각 입력 값에 대해 원하는 목표 출력 값을 대응시켜 학습시키는데 반하여 자율학습은 목표 출력 값(Target Output) 이 학습 자료에 주어지지 않는 것으로 주어진 입력 패턴 자체를 기억시키거나 유사한 패턴들을 군집화(Clustering) 시키는 데 많이 이용된다.

본 논문에서는 ANN의 역전파 알고리즘을 사용하였다. 역전파 알고리즘의 학습에는 입력 패턴과 이에 대응하는 목표 패턴의 쌍으로 이루어진 학습 패턴이 이용되는데 입력 패턴을 입력 층에 인가하고 임의의 초기치로 주어진 연결 강도에 의해 출력되는 출력 패턴과 목표 패턴을 비교하여 그 오차만큼을 역으로 전파하여 연결 강도를 수정한다. 이러한 작업은 모든 학습 패턴에 대해 이루어지고 학습 패턴에 대한 오차의 총합이 기준치 이하로 떨어지는 순간에 학습을 멈춘다. 이와 같이 학습이 완료된 인공 신경망의 학습 패턴은 불완전한 패턴이나 학습되지 않은 패턴이 입력되더라도 적절한 출력 값을 낸다.

본 논문에서는 기존의 측정 데이터의 시뮬레이션을 통해 학습시키고 실험 시에는 학습된 델타 모델에 근거

하여 추론을 할 수 있는 추론 알고리즘 모델이다. 기준 데이터는 MATLAB으로 시뮬레이션하여 생성된 모델을 이용하여 농도를 추론하였다[6][7].

4. 실험 및 결과

가스의 농도를 측정하기 위해 기준 데이터베이스를 만들고 인공신경망을 이용하여 시뮬레이션을 하여 연결 가중치 및 연결강도를 구했다. 또한 시료 가스는 순도 99.99%의 산소를 캐리어 가스로 사용하여 순도 99.9%의 BTX 가스와 혼합하여 MFC(Mass Flow Controller)를 통해 일정 흐름으로 제작된 하드웨어에 주입하였다.

10개의 센서로 구성된 어레이로 들어온 가스는 센서의 측정값은 저항 값으로 출력된다. 측정된 10개의 데이터를 직렬통신(RS-232)을 통해 컴퓨터로 전송한다. 컴퓨터에 전송된 측정값은 ANN 알고리즘을 이용하여 가스의 농도를 추론한다.

4.1 기준 데이터 생성

본 논문은 ANN의 역전파 알고리즘을 사용하였다. 또한 ANN 알고리즘의 지도학습방법으로 각 입력 값에 대해 원하는 출력 값을 대응시켜 학습을 시켰다. 이렇게 학습을 하기위해 기준 데이터를 생성하고 데이터베이스 해야 한다.

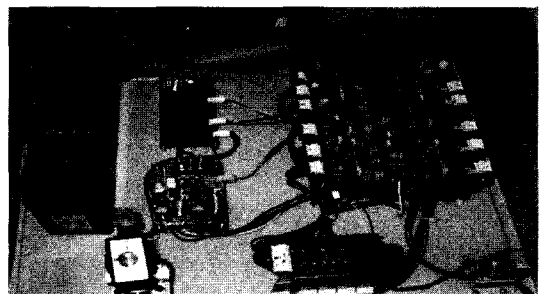


그림 6. 제작된 하드웨어



그림 7. 실험 장비

가스의 농도에 대한 기준 데이터를 만들기 위해 센서 어레이로 대상 가스를 각각 일정 농도(0ppm~100ppm) 사이에 일정 간격으로 주입으로 만들어 실험을 하였다. 실험을 통해 얻어진 측정값을 데이터 베이스하여 대상 가스 각 농도별 센서 측정값 얻었다. 이를 기준 데이터로 하여 측정에 필요한 파라메타를 얻을 수 있었다.

그림 8은 대상 가스인 BTX 중 벤젠 가스를 농도별로 주입하여 얻어진 기준 데이터이다. 각 농도별로 선형적인 출력을 얻을 수 있었다.

그림 9은 대상 가스인 BTX 중 톨루엔 가스를 농도별로 주입하여 얻어진 기준 데이터이다.

그림 10은 대상 가스인 BTX 중 자일렌 가스를 농도별로 주입하여 얻어진 기준 데이터이다.

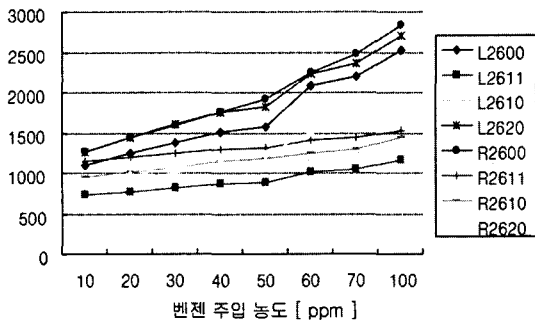


그림 8. 벤젠 기준 데이터

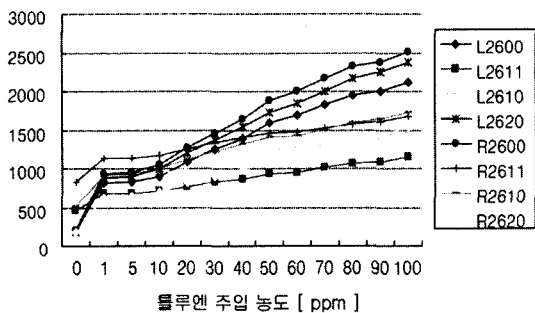


그림 9. 톨루엔 기준 데이터

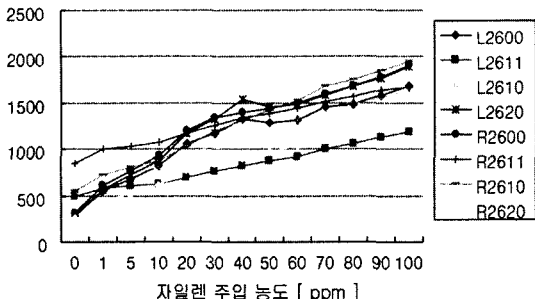


그림 10. 자일렌 기준 데이터

4.2 시뮬레이션 결과

실험을 통해 얻어진 데이터베이스를 기준으로 ANN 알고리즘을 통해 시뮬레이션을 하여 연결 가중치를 조정하고 수정된 파라메타는 표 1과 같다.

표 1. ANN Parameter

Input Nodes	10	Alpha	0.95
Layer number	4	Eta	1.05
Weights	[-2, 2]	Gain	1.1

4.3 ANN의 평가

ANN의 시뮬레이션을 통해 얻은 파라메타(표 1)를 이용하여 알고리즘을 모듈화 하였다. 모듈화 된 ANN 알고리즘은 주입된 가스의 농도를 실시간으로 추론하고 분석할 수 있다.

표 2와 그림 11은 벤젠가스를 농도별(0ppm~1000ppm)로 주입하였을 때 ANN 알고리즘의 추론 결과를 보여준다. 벤젠 단일 가스를 주입한 결과 주입가스의 농도를 비교적 정확하게 추론하였으며 주입하지 않은 대상가스에 대해서도 추론의 결과를 나타냈는데 이는 거의 존재하지 않을 정도의 적은 양으로 추론하였다.

톨루엔은 벤젠과 같은 방법으로 일정 농도별(0ppm~1000ppm)로 가스를 주입하여 추론하였다. 표 3과 그림 12에 추론 결과를 나타내었다.

자일렌도 같은 방법으로 가스를 일정 농도별(0ppm~1000ppm)로 주입하여 추론하였고 표 4와 그림 13에 추론 결과를 나타내었다. 자일렌의 경우에는 주입하지 않은 가스에 대해서도 아주 정확한 추론의 결과를 보여 주었다.

표 2, 3, 4에서 보여준 것과 같이 BTX의 단일 가스를 주입하여 측정된 값을 ANN 알고리즘으로 추론한

표 2. 벤젠 주입 시 ANN 알고리즘 평가

주입농도	ANN 추론 결과		
	벤젠	톨루엔	자일렌
산소(0ppm)	0.0001	0.001	0.4559
6 ppm	5.337	0.6564	0.1605
13 ppm	13.9383	0.192	0.1952
51 ppm	52.5999	0.0354	0.2407
103 ppm	105.8519	0.0141	0.2653
250 ppm	253.1568	0.0023	0.0317
500 ppm	503.1568	0.0023	0.03177
1000 ppm	999.4508	0.365	0.3237

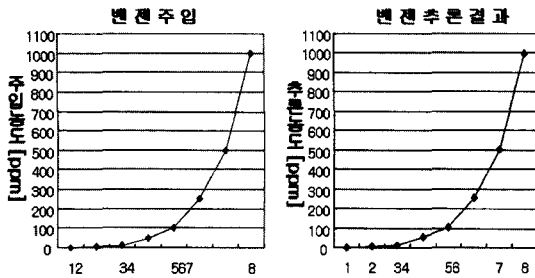


그림 11. 벤젠 주입 및 ANN 추론 결과

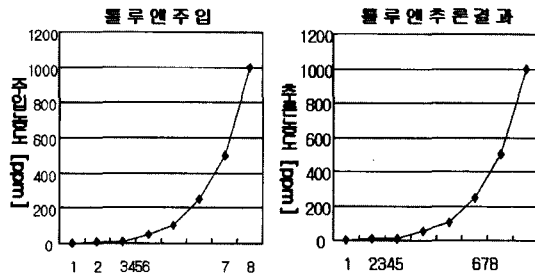


그림 12. 톨루엔 주입 및 ANN 추론 결과

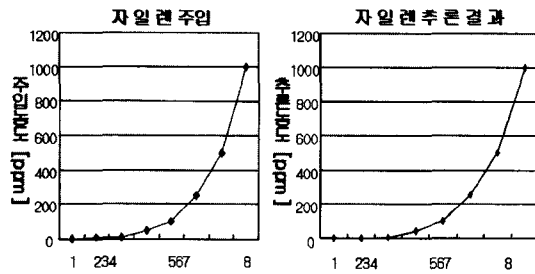


그림 13. 자일렌 주입 및 ANN 추론 결과

결과는 약간의 오차를 가지고 있지만 비교적 정확한 결과를 얻었다. 주입농도와 추론 결과를 비교해보면 낮은 농도 보다 높은 농도에서 더 좋은 결과를 얻을 수 있었으며 전체적으로 1~4ppm 정도의 오차를 가지고 추론 하였다는 결과를 보였다. 또한 주입 가스가 아닌 다른 가스에 대해서도 0.5ppm 이하의 아주 작은 양의 가스가 있다는 결과를 얻었다. 이는 측정 당시의 환경적인 외란(온도 및 습도 등)에 의해 발생하는 것이다.

5. 결 론

가스 센서는 단일 가스에 대해 특정한 반응을 보이는 선택성이 부족하여 이를 보완하기 위해 센서 어레이를 설계 제작하여 사용하였다. 가스의 농도는 실험을 통해 측정된 데이터를 가지고 기준 데이터를 만들어 시뮬레이션과 실험을 통해 감지 가스의 농도를 추론하였다.

표 3. 톨루엔 주입 시 ANN 알고리즘 평가

주입농도	ANN 추론 결과		
	톨루엔	벤젠	자일렌
산소(0ppm)	0.8283	0.0018	0.0045
5 ppm	7.9444	0.0095	0.001
10 ppm	8.8432	0.0086	0.0001
50 ppm	48.0926	0.1568	0.0549
100 ppm	99.8818	0.05	0.0173
250 ppm	251.0087	0.0266	0.1189
500 ppm	503.357	0.0208	0.1427
1000 ppm	999.4675	0.1094	0.6788

표 4. 자일렌 주입 시 ANN 알고리즘 평가

주입농도	ANN 추론 결과		
	자일렌	벤젠	톨루엔
산소(0ppm)	0.001	0.0022	0.0001
5 ppm	0.7851	0	0.0004
10 ppm	8.7137	0	0.0001
50 ppm	46.0726	0	0
100 ppm	98.9892	0	0.4042
250 ppm	250.9199	0	0
500 ppm	501.6298	0	0
1000 ppm	999.444	0	0

ANN 알고리즘을 이용하여 기준 데이터를 시뮬레이션 하고 학습을 시켜 추론 모듈을 만들었다. ANN 알고리즘 모듈은 실시간으로 측정되는 센서 데이터를 가스의 농도로 추론하여 결과를 얻는 알고리즘 모듈이다.

본 논문에서는 인간에게 유해한 물질인 VOCs 중 BTX의 농도를 ANN 알고리즘 추론 모듈로 실시간으로 추론 하였다. ANN 알고리즘 추론결과 실제 주입농도에 비해 1~4ppm 정도의 오차가 있었고 주입하지 않은 다른 가스에 대해서도 0.5ppm 미만의 오차를 보일 정도로 비교적 정확한 농도를 추론할 수 있었다. 그리고 낮은 농도에서는 높은 농도에서 추론한 결과에 비해 오차가 더 컸다. 이러한 오차는 실험을 할 당시의 여러 가지 환경적인 외란에 의해 발생하는 것이다. 보다 안정적이고 정확한 결과를 얻기 위해서는 외란적인 요소들을 줄여야 하고 실험을 통해 많은 데이터베이스를 획득해야 하는 문제점이 있다. 이러한 문제점을 해결하기 위해 좀더 많은 실험과 데이터베이스의 구축이 필요하다.

참고문헌

- [1] 나규환, 이장훈, 이종화, 정명규, 감상규, 황갑수, “환경 독성학 개론”, 동화기술, pp.186-218, 1997.
- [2] Figaro ENG. Inc, “Technical Information on Usage of TGS Sensors for Toxic and Explosive Gas Leak Detector”, Figaro ENG. Inc, 1996.
- [3] S. M. Sze, “Semiconductor Devices Physics and Technology”. Bell Telephone Laboratories Inc, 1985.
- [4] Joseph J. Carr, “Sensors and Circuits”, Prentice-Hall Inc, pp. 304-316, 1993.
- [5] US EPA, “Compendium of Methods for the Determination of Toxic Organic Compounds in Ambient Air”, US EPA, Method TO-14A, January, 1999.
- [6] 이상원, “학습하는 기계신경망”, Ohm, 1993.
- [7] Jacke M. Zurada, “Introduction to Artificial Neural Systems”, West Publishing Co., 1992.