

A Study on Binary Gas Mixture

Ali Gülbağ¹, Uğur Erkin Kocamaz¹, Kader Uzun¹

¹Sakarya University, Department of Computer Engineering, Sakarya, Turkey

Abstract: In this study, quantitative classification of trichloroethylene and carbontetrachloride was tried using steady state responses of sensors. For this purpose, Artificial Neural Networks (ANN) were used. ANN was used for gas concentration estimation and quantitative classification of the gas mixture. For gas concentration estimation, the gas sensor transient state responses were taken and for quantitative classification of the gas mixture, the gas sensor steady state responses were taken. A feed-forward multi-layer neural network with hidden layers trained by a back-propagation and Levenberg-Marquardt learning algorithms has been implemented. Acceptable performance is obtained for this system and the appropriateness of ANN for the quantitative classification of volatile organic compounds is observed.

Keywords: Binary gas mixture classification, artificial neural networks

İkili Gaz Karışımları Üzerine Bir Çalışma

Özet: Bu çalışmada, sensörlerin kararlı durum sinyalleri kullanılarak trikloretilen ve karbontetraklorid gazlarının nicel sınıflandırılması yapılmasına çalışılmıştır. Bu amaçla, Yapay Sinir Ağları (YSA) kullanılmıştır. YSA, gaz konsantrasyon tahmini ve gaz karışımı sınıflandırması için kullanılmıştır. Gaz konsantrasyon tahmini için, gaz sensörlerinin geçici durum cevabı ve gaz karışımı sınıflandırması için, sensör kararlı durum cevapları alınmıştır. Bir ileri-beslemeli çok-katmanlı gizli-katmanlı yapay sinir ağı, geriye-yayılım ve Levenberg-Marquardt öğrenme algoritmalarıyla gerçekleştirilmiştir. Bu sistem için başarılı performanslar elde edilmiş ve YSA'nın uçucu organik bileşimlerin nicel sınıflandırılması için uygunluğu gözlenmiştir.

Anahtar Kelimeler: İkili gaz karışımı sınıflandırılması, yapay sinir ağları

Reference to this paper should be made as follows (bu makaleye aşağıdaki şekilde atıfta bulunulmalı):

A. Gulbag, U. E. Kocamaz, K. Uzun, 'A Study on Binary Gas Mixture', Elec Lett Sci Eng , Vol. 1 (1) , (2005), 7-12

1 Giriş

Kimyasal sensörler, kimyasal bir girişi elektriksel ya da optik sinyale çeviren aygıtlardır. İnsan sağlığının ve çevrenin korunması amacıyla bazı kimyasal maddelerin niceliklerinin algılanması ve sınıflandırılması için kimyasal sensör tasarımlarının yapılması günümüzde devam etmekte ve disiplinler arası çalışma gerektirmektedir. Özellikle, bu çalışma kapsamında olan uçucu organik bileşiklere, belirli seviyelerin üzerinde uzun süre maruz kalındığı takdirde insan sağlığı açısından zararlı etkileri mevcuttur. Uçucu organik bileşiklerin kullanıldığı her alanda aynı etkiler söz konusudur. Çalışılan ortamda uçucu gazların konsantrasyonu kontrol altında tutulmalı, her zaman konsantrasyon değerleri bilinmeli, konsantrasyon değeri, insan sağlığını, tehdit eden seviyeye ulaştığında gerekli ikazlar yapılmalı ve gereken önlemler alınmalıdır [1].

Kimyasal sensörlerle ilgili olarak iki alanda çalışmalar yürütülmektedir. Bunlardan birincisi yüksek algılama özelliğine sahip sensör tasarımı çalışmaları, ikincisi ise sensör dizileri üzerinde yapılan çalışmalardır. İlk alandaki çalışmalar, önemli sensör parametreleri olan duyarlık ve

* Corresponding author; Tel.: +(90) 264 3460353 (327), E-mail: agulbag@sakarya.edu.tr

seçiciliğin, sensörlerin yaşlanma, tekrar üretilebilme, cevap zamanı ve ortam etkilerinden (sıcaklık, nem) kaynaklanan kararlılık düzeyinin iyileştirilmesine yönelik, diğer alandaki çalışmalar ise tek bir sensörle uçucu organik bileşiklerin tam seçicilikle algılanması mümkün olmadığı için farklı tip sensörlerden oluşan sensör dizileri ve veri işleme tekniklerine yöneliktir.

Sensörlerden alınacak olan tepkiler, değişik türdeki gazların farklı konsantrasyonlarına kompleks bir şekilde bağlıdır. Genellikle sensörler, bir analit için tam bir seçicilik sağlamamakta ve farklı analitlere değişik tepkiler verebilmektedir. Bu problemin aşılabilmesi ve diğer cevaplardan aranan cevabın doğru bir biçimde ayırt edilebilmesi maksadıyla çeşitli yöntemlere başvurulur. Eldeki veri setinin türüne, büyüklüğüne, ulaşılmak istenen bilginin türüne (nicel, nitel) bağlı olarak çeşitli “Veri İşleme Metotları” ve “Örüntü Tanıma Teknikleri” yöntemleri kullanılır. Bu yöntemler, istatistiksel çok bileşenli analiz metotları olan “Temel Bileşen Analizi”, “Kümeleme Analizi”, “Ayrırma Fonksiyon Analizi” ve yapay zeka teknikleri olan “Yapay Sinir Ağları”, “Bulanık Mantık”, “Genetik Algoritmalar” dır.

2 Ölçüm Sistemi

Kuartz kristal rezonatör (QCR) elektriksel enerjiyi mekanik enerjiye çeviren transduserdir. Kuartz kristal rezonatörleri, 1964 yılında King tarafından ilk olarak kimyasal sensör olarak kullanılmıştır [2]. QCM’in rezonans frekansındaki değişim Δf ,

$$\Delta f = -C_f \Delta m \quad (1)$$

olarak bulunur. Burada Δm ilave olunan kütle C_f de sonsuz kalınlıktaki quartz tabakanın duyarlık sabiti olup

$$C_f = \frac{f_0^2}{r_q \cdot N_{AT}} \quad (2)$$

ile verilir. Burada f_0 kuartzın rezonans frekansı, ρ_q kuartzın yoğunluğu (2649 kg/m^3), N_{AT} de AT kesilmiş kuartz için frekans sabitidir ve kuartzın kalınlığı doğrultusunda yayılan shear yatay dalgalar için dalga hızının yarısına eşittir [3,4]. Kalınlığı rezonans dalga boyunun yarısına eşit kuartz kristal için N_{AT} ,

$$N_{AT} = \frac{v}{2} = 2h_s f_0 \quad (3)$$

ile verilir.

Bu çalışmada, kimyasal maddelerin buharlarının/kokularının (analitlerin) algılanması, tanımlanması ve sınıflandırması maksadıyla algılayıcı eleman olarak biri referans olmak üzere on adet “Kuartz Kristal Rezonatörden” (QCR) oluşturulan sensör dizisi kullanılmıştır. Algılayıcı elemanlar olan kuartz kristallerin yüzeyleri, çeşitli algılayıcı kimyasal maddeler ile kaplanmıştır. Algılayıcı kimyasal maddeler ile kaplanan kuartz kristallerinden oluşan 9 adet sensör ile ölçülmüş, dış ortamdan iyi bir şekilde izole edilmiş kapalı bir muhafaza içerisine yerleştirilmiş ve muhafazanın herhangi bir yerinden gaz kaçağı olmamasına özen gösterilmiştir. Sensör dizisi, geri dönüşümün sağlanması için 10 dk. süresince sadece kuru hava; ardından 10 dk süresince kuru havayla taşınan her bir analitin zamanla artırılan belli [1000, 2000, 3000, 4000, 5000 ppm]

konsantrasyon seviyelerine dönüşümlü bir şekilde maruz bırakılarak ölçümler gerçekleştirilmiştir. Farklı analitlerin ve konsantrasyonlarının, dizideki kuartz kristalleri yüzeyindeki farklı algılayıcı kimyasal tabakalar tarafından değişik oranlarda absorplanmasına bağlı olarak, QCR'lerin rezonans frekans değerleri değişik oranlarda kaymaktadır. Kuartz kristallerin kayan frekansları, referans sensörünün ölçülen frekansından çıkarılmak suretiyle, dizideki her bir sensörün frekans farkları (Δf), her 2 sn'de bir seri port üzerinden bilgisayar ortamına aktarılarak veri setleri elde edilmiştir.

3 İleri-Beslemeli Yapay Sinir Ağları

Yapay sinir ağları, sensörlerin kararlı durum cevaplarından faydalanarak, ikili gaz karışımının konsantrasyonunu saptamak amacıyla kullanılmıştır.

Konsantrasyon tahmini için kullanılan yapay sinir ağı yapısında kullanılan eşitlikler (4), (5) ve (6)'da verilmiştir [5]. Denklemlerden de görülebileceği gibi gizli katman ve çıkış katmanı sinirleri için kullanılan aktivasyon fonksiyonları tek kutuplu sigmoid aktivasyon fonksiyonudur.

$$net_j(t) = b_j(t) + \sum_{i=0}^n w_{ji}(t)x_i \quad (4)$$

$$O_j(t) = f(net_j(t)) = \frac{1}{1 + e^{-net_j(t)}} \quad (5)$$

$$PPM(t) = \frac{1}{1 + e^{-\left(b(t) + \sum_{j=0}^m w_j(t)O_j(t)\right)}} \quad (6)$$

Burada, $b_j(t)$ gizli katman sinirlerinin biasları, $w_{ji}(t)$ gizli katman sinirlerinin ağırlıkları, $b(t)$ çıkış katmanı sinirlerinin biasları, $w_j(t)$ çıkış katmanı sinirlerinin ağırlıkları, x_i , $i = 1, 2, \dots, n$ değerleri sensör cevapları, m gizli katman sinir sayısıdır.

Sigmoid aktivasyon fonksiyonları, lineer ve basamak aktivasyon fonksiyonlarına göre daha fazla uygulama alanına sahiptir. Tek kutuplu Sigmoid aktivasyon fonksiyonu için denklem aşağıdaki şekilde verilir [5];

$$f(x) = Sigmoid(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (7)$$

Geriye yayılım metodu (BP: back-propagation) yapay sinir ağlarının eğitiminde oldukça yaygın bir şekilde kullanılan bir metottur [6]. Momentumlu geri yayılım algoritması aşağıdaki eşitlikte verildiği şekilde i ve j yapay sinirleri arasındaki ağırlık için $\Delta w_{ji}(k)$ ağırlık değişimini verir;

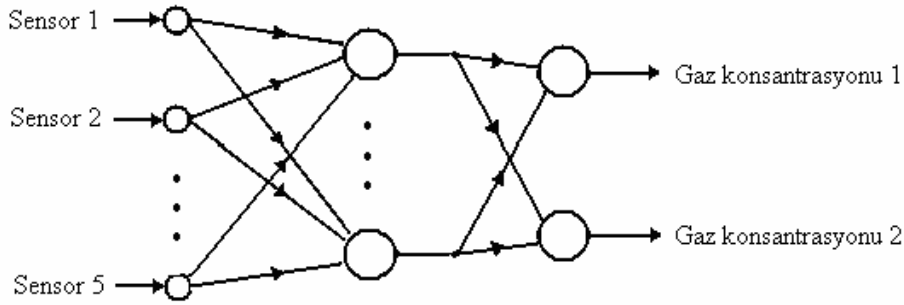
$$\Delta w_{ji}(k) = -a \frac{\partial E}{\partial w_{ji}(k)} + m \Delta w_{ji}(k-1) \quad (8)$$

Burada, α öğrenme kat sayısı, μ momentum katsayısı, E toplam anlık karesel hata ve $\Delta w_{ji}(k)$ ilgili iterasyondaki ağırlık değişimidir. Çalışmanın bu kısmında öğrenme katsayısı olarak 0,3 ve momentum katsayısı olarak 0,7 kullanılmıştır.

Gaz karışımının miktarsal sınıflandırması için, 5 girişli ve 2 çıkışlı bir YSA yapısı kullanılmıştır. Herbir girişte ilgili QCM sensör frekans değişimi değeri bulunmaktadır. Herbir çıkış bir gazın konsantrasyon değerini ifade etmektedir. Şekil 1’de miktarsal sınıflandırma için kullanılan YSA yapılarının kullanımı gösterilmiştir. Eğitim algoritması olarak ayrıca Levenberg-Marquardt (LM) geri yayılım algoritması da kullanılmış ve sonuçlar kıyaslanmıştır. LM algoritması aşağıdaki formülde verilmiştir[5];

$$\mathbf{W}(k) = \mathbf{W}(k-1) - (\mathbf{H}(k) + m\mathbf{I})^{-1} \mathbf{g}(k) \quad (9)$$

burada, $\mathbf{H}(k)$ is Hessian matrisi, $\mathbf{g}(k)$ ortalama karesel hatanın gradyeni, m sayısal sabit değer ve \mathbf{I} birim matristir.



Şekil-1 YSA mimarisi kullanılarak miktarsal sınıflandırma

4 Performans Değerlendirme Metodu

Metotların performansını karşılaştırma ve performans değerlendirmesi için ortalama mutlak hata (mean relative absolute error), $E(RAE)$ [7] değeri kullanılmıştır;

$$E(RAE) = \frac{1}{n_{test}} \sum_{t \in test} \left(\left| \frac{PPM_{predicted} - PPM_{true}}{PPM_{true}} \right| \right) \forall PPM_{true} \neq 0 \quad (10)$$

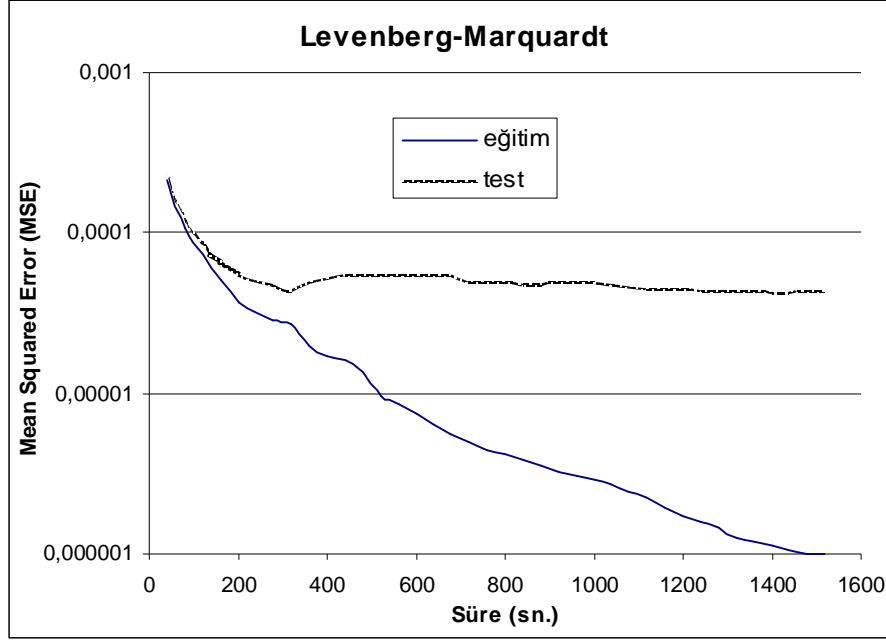
Burada, $PPM_{predicted}$ tahmin edilen konsantrasyon, PPM_{true} gerçek konsantrasyon ve n_{test} test veri sayısıdır.

5 Sonuçlar

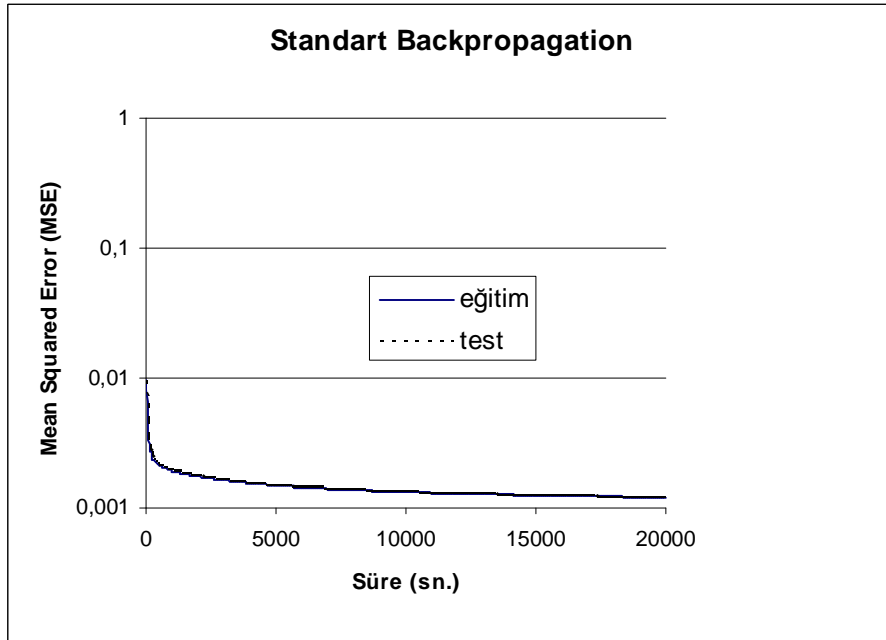
İleri beslemeli yapay sinir ağları kullanılarak sensör kararlı durum cevaplarından gaz konsantrasyonu tahmin sonuçları elde edilmiştir.

Kullanılan yapay sinir ağları için optimum gizli katman sinir sayısını bulmak amacıyla değişik gizli katman sayıları denenmiştir. Gizli katman sinir sayısı, YSA performansına etkisini hesaplanarak (ulaşılabilir MSE'ye göre) optimum sinir sayısı olarak 50 alınmıştır.

Standart geriye-yayılım ve Levenberg-Marquardt öğrenme algoritmalarının ortalama karesel hata-süre ilişkisi eğitim ve test setleri için Şekil 2 ve Şekil 3'te gösterilmiştir. Eğitim algoritmalarının performansları ayrıca Tablo 1'de özetlenmiştir.



Şekil-2 LM algoritması için MSE-süre grafiği



Şekil-3 Standart geri-yayılım algoritması için MSE-süre grafiği

Tablo-1 X ve Y gazları için YSA tahmin sonuçları

	Geri-Yayılım	LM
E(RAE) (%) (Trikloretilen)	3.28	1.18
E(RAE) (%) (Karbontetraklorid)	3.13	1.01
Ortalama E(RAE) (%)	3.20	1.01
MSE	1E-6	1E-3
Eğitim Süresi (sn)	20000	1450

Yapay sinir ağları kullanılarak sensör kararlı hal cevapları ile elde edilen gaz konsantrasyon tahmin sonuçları oldukça iyi sonuçlar vermiştir. Farklı eğitim algoritmaları kullanılarak yapılan çalışmada LM algoritmasının temel geri-yayılım algoritmasından daha iyi performans sağladığı ve daha hızlı yakınsadığı gözlenmiştir. Test ve eğitim setlerinin grafiklerinden, LM algoritmasının eğitim setini ezberlemeye başladığı buna karşılık Geri-yayılım algoritmasının daha kararlı ilerlediğini görmekteyiz.

References (Referanslar)

1. Caliskan, E., Yüksek Lisans Tezi, Mayıs 2004.
2. Göpel, W., Sensors and Actuators B, 18-19, 1-21 1994 .
3. Benes, E., J. Appl. Phys. 56(3) , 608-626, 1984.
4. Schokley, W., Curran, D.R., Koneval, D.J., J. Acoust. Soc. America. 41, 981-993, 1966.
5. MATLAB® Documentation (2002) Neural Network Toolbox Help, Version 6.5, Release 13, The MathWorks, Inc.
6. Riedmiller, M., Advanced supervised learning in multilayer perceptrons from backpropagation to adaptive learning algorithms, Int. J. of Computer Standards and Interfaces, Special Issue on Neural Networks, 5, (1994)
7. Caliskan, E., Temurtas, F., Yumusak, N.: Gas Concentration Estimation using Fuzzy Inference Systems, SAU FBE Dergisi, Vol. 8 (1) (2004)