신경회로망을 이용한 휴대용 E-Nose 시스템 개발

Design of Portable E-Nose System using Neural Network Algorithm

김정도*, 김동진**, 함유경***, 홍철호****, 변형기*****
Jeong-Do Kim, Dong-Jin Kim, Yu-Kyung Ham and Hyung-Gi Byun

Abstract - We have designed a portable electronic nose(e-nose) system using an array of commercial gas sensors for recognition and analyzing the various odours. In this paper, we have implemented a portable e-nose system using an array gas sensors and personal digital assistants(PDA) for recognizing and analyzing volatile organic compounds(VOCs) in the field. Field screening for pollutants has been a target of instrumental development for number of year. A portable e-nose system can be substantial benefit to rapidly localize the spacial extent of a pollution or to find pollutants source. And, by using PDA, E-nose have a better function such as the easy user-interface and data transfer by internet from on-site to remote computer. We adapted the Levenberg-Marquardt algorithm based on the back-propagation and proposed the method that could be predicted concentration levels of VOCs gases after classification by separating neural network into two parts.

Key Words : portable e-nose, PDA, Field screening, neural network

1. 서 론

우리의 삶과 환경에 영향을 주는 냄새들을 해석하고 이들을 감지하는 후각기관의 역할에 대한 이해는 많은 연구자들의 오랜 소망이었다. 최근 재료 및 전자 공학과 컴퓨터의 눈부신 발전에 힘입어 인간의 감각을 모방하는 전자코(electronic nose)의 개발이 활발하게 추진되고 있다[1]. 특히 식품 분야에 있어서는 전자코를 이용하여 향기 성분을 분석한다든지, 식품의 변질 유무를 판단하거나, 품질 수명기간 예측에 주로 많이 사용하고 있다. 또한 작물의 산지 판별에 많이 응용되고 있다.

이러한 인공 전자코의 기본은 여러 개의 다른 종류의 화학적 가스센서들을 어레이(array)화 하여 사용한다. 이 센서 어레이(sensor array)에 의해 측정된 데이터는 냄새에 따라 구분이 가능한 특징을 보이게 되는데, 이는 각각의 센서가 냄새의 화학적인 성분에 따라 다른 민감도를 가지는 물질에 의해 제조되기 때문이다. 센서들 사이의 상대응답에 의해 만들어진 패턴은 신호처리 기법에 의해 각 냄새를 묘사할 수 있는 일종의 독특한 지문이 될 수 있다[1]. 이러한 전자코 시스템은 기존의 환경 분석 및 계측 시스템이 가지는 여러 가지 문제를 해결해 줄 수 있는 대안으로 제시되고 있다. 현재 환경오염 정도를 측정하는 방법들은 현장에서 샘플을 채취하여 실험실로 옮기고, 오염정도에 따라 샘플을 준비하여 실험결과를 분석하고 해석한다. 이러한 방법들은 많은 시간과 비용을 소비하며, 운반하고 보관할 때 생길지 모르는 샘플들의 변질 때문에 오염정도의 결정과 분포 표시에 많은 문제가 발생한다.

필드 스크린(field screen)은 이러한 문제점을 해결할 수 있는 하나의 대안으로 제시되고 있다. 필드 스크린은 생화학 분석방법과 센서기술들을 이용한 새로운 측정방법으로 환경감시가 절실히 요구되는 분야에 적절히 사용될 수 있다. 특히 전자코 시스템에서는 오염도 및 오염시킨 화학물질의 종류를 알아내거나, 오염 확대 방지를 빠르게 취할 수 있고, 오염원을 찾는데 효과적으로 사용할 수 있다. 또한 연속적인 환경모니터링을 위한 on-site 사용이 가능한 장비이다. 비록 전자코 시스템이 가스 크로마토그라피(gas chromatograph : GC)와 질량 분석기(mass spectrum : MS)같이 전체적인 스펙트럼을 통한 합성성분의 분류는 가능하지는 못하지만, 질과 양을 통한 화학적 특성들을 현장에서 알아낼 수 있어, 자세한 실험실 분석을 위한 기본자료 및 비용을 줄일 수 있게 할 수 있다.

기존에 설계된 전자코 시스템[10]은 일종의 장비의 개념으로, 휴대가 쉽지 않고, 대부분 식품공정의 품질 유지를 위해 사용되는 계측 시스템의 형태라 할 수 있다. 그러나 필드 스크린의 개념과 유비쿼터스(ubiquitous) 환경에서 요구되는 전자코의 개념은, 쉽게 휴대가 가능하도록 소형이어야 하며, 인터넷과의 접속이 용이해야 하며, 전자코에 의해 습득된 정보에 의해 다른 기계등과 쉽게 연결될 수 있어야 한다.

본 연구에서는, 국내에서 개발된 초소형 저 전력 MEMS micro electro mechanical system) 기법으로 개발되어진 가스센서[9]를 이용 하여 크기를 소형화 하여, 휴대가 가능하게 하였다. 또한 인터넷 원격 제어가 가능하고 야외에서 휴대하여 측정과 분석이 가능하도록 설계하기 위해 PDA(personal digital assistants)를 이용하여 휴대가 가능한 인공후각 인식 시스템을 개발 하였다. PDA의 사용은 데이터 취득과 사용자

저자 소개
* 김 정 도 : 호서대학교 전기정보통신공학부 조교수 · 공박
** 김 동 진 : 호서대학교 전기정보통신공학부 박사과정
*** 함 유 경 : (주)맥사이언스
**** 홍 철 호 : 호서대학교 전기정보통신공학부 교수 · 공박
*****변 형 기 : 삼척대학교 정보통신공학과 부교수 · 공박

인터페이스의 편리성 증대뿐만 아니라, 기존에 PC급 컴퓨터에서만 사용가능했던 계산량이 많은 알고리즘을 거의 그대로 사용가능하다는 장점을 가지고 있다. 본 논문에서 사용한 분류 방법으로는 기존의 역전파 알고리즘(back-propagation algorithm)에서 사용하는 최급강하법(steepest descent method), 뉴우톤 학습방법의 장점을 이용하는 LM(levenberg-marquardt) 최적화 알고리즘[2]이 신경회로망의 학습을 위해서 사용되었으며, 분류를 위한 신경회로망과 농도를 추정하는 신경회로망을 별도로 두어 분류신경회로망의 분류결과에 따른 각각의 신경회로망이 농도를 추정하는 새로운 알고리즘을 제안하였다.

2. 휴대용 전자코 시스템

2.1. 제작된 휴대용 전자코 시스템 하드웨어 구성

연구 개발된 휴대용 전자코 시스템은 PDA와의 인터페이스를 통해 다양하고 복잡한 기능들을 수행 할 수 있다.

개발된 휴대용 전자코 시스템의 내부 구성은 측정 대상 가스가 센서 어레이로 즉시 흡입 될 수 있도록 유입구로부터 거리를 짧게 하였고, 측정 후 잔량의 가스가 센서 어레이에 남아 있을 수 있기 때문에 캘리브레이션 공기를 유입시켜 센서 어레이를 회석 시키는 구조로 설계하였다. 그림 1은 휴대용 전자코 시스템의 구현된 모습이다. 휴대용 전자코 시스템은 데이터를 측정하기위해 센서 어레이부와 메인 컨트롤러 부로 나눌 수 있고, 측정 가스를 흡입하고 배출하기 위한 기구부, 센서 어레이를 회석하기 위해 캘리브레이션 공기를 유입하는 필터부로 크게 5가지로 나눌 수 있다.

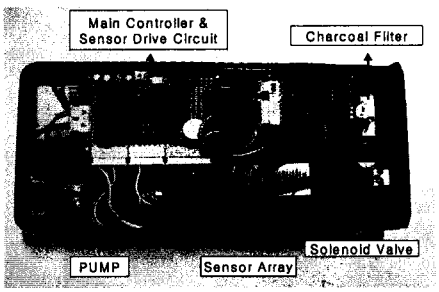

그림 1. 전자코 시스템의 내부구조

센서 어레이부는 가스를 측정하기위해 6개의 센서를 이용하였고, 재질은 EPA (environmental protection agency)의 TO-14A에서 제시한 가스 샘플링에 이용되는 canister의 제작 방법을 사용하였다. 제작된 센서 어레이는 TO-14A에 의해 가스의 성상의 변질과 어레이 내부 표면에의 흡착 등을 방지하기 위하여 스테인리스 스틸 316L을 사용하였고 전해 연마를 수행하여 제작 하였다[8]. 메인 컨트롤러 부는 마이크로 컨트롤러를 사용하여 센서 어레이로부터 측정되는 데이터를 입력받아 PDA로 전송하는 역할을 담당한다. 또한 기구부의 구성되어 있는 솔레노이드 밸브와 공기를 흡입하기 위해 사용된 펌프의 동작을 제어한다.

기구부는 솔레노이드 밸브와 펌프로 구성되어있다. 솔레노이드 밸브는 측정 대상 가스와 캘리브레이션 공기를 분리해서 센서어레이로 유입시키는 역할을 한다. 또한 펌프는 외부에서 유입되는 공기와 측정 대상 가스를 센서어레이로 유입시키고 배출하기 위해 사용하였다. 필터부는 센서 어레이와 마찬가지로 EPA의 TO-14A에서 제시한 것처럼 스테인레스 스틸 316L로 제작 하였고[8], 내부에는 압축 활성탄을 충진하여 외부에서 유입되는 공기의 불순물을 제거하는 역할을 한다. 외부에서 유입되는 공기를 이용하여 캘리브레이션 공기로 사용하기 때문에 내부에 충진 된 활성탄은 교체가 사용가능하도록 설계하였다.

2.2. PDA와 소프트웨어

연구 개발된 휴대용 전자코 시스템의 PDA는 메인 컨트롤러부에서 측정된 데이터를 전송받아 가스를 분류하고 농도를 추정한다. 분류 방법으로는 기존의 역전파 알고리즘에서 사용하는 최급강하법, 뉴우톤 학습방법의 장점을 이용하는 LM 최적화 알고리즘[2]이 신경회로망의 학습을 위해서 사용되었으며, 분류를 위한 신경회로망과 농도를 추정하는 신경회로망을 별도로 두어 분류신경회로망의 분류결과에 따른 각각의 신경회로망이 농도를 추정한다. 또한 농도의 경계치를 설정하여 원격지에서 자동으로 경보를 울리거나, 인터넷을 통해 전송이 가능한 기능을 부가하였다. 스케줄링 기능을 포함시켜서 원하는 시간에 예약 측정이 가능하게 하였다.

그림 2는 툴루엔 20ppm을 주입하고 측정된 데이터를 전송받아 그래프로 그린 것이다. 각 센서들의 반응을 이용해서 가스의 종류와 농도를 판단할 수 있다.

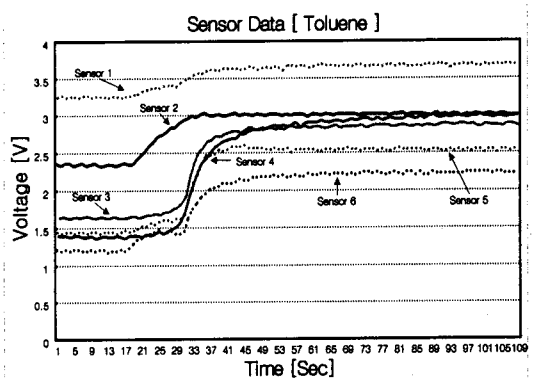

그림 2. 센서 측정 데이터

본 연구에서는 에탄올, 메탄올, 툴루엔을 대상가스로 실험을 하였다. 실험결과 대상 가스 3가지에 대해서 종류와 농도분석이 가능하였고, 대상 가스 중 툴루엔은 휘발성 유기화합물(Volatile Organic Compounds : VOCs)로 정부의 규제 대상이다. VOCs에 대해서도 총량적으로 분석 및 분류가 가능하다. 개발된 시스템은 에탄올, 메탄올, 툴루엔의 경우 10ppm이상 측정이 가능하며, VOCs 가스 총량의 경우 약 1ppm이상 측정이 가능하다.

3. 휴대용 전자코 시스템이 인식 알고리즘

3.1. LM-BP 신경회로망의 학습방법

신경회로망에서 사용 될 수 있는 비선형 최적화 알고리즘들은 크게 최급강하법, 뉴우톤 방법, 가우스-뉴우톤(Gauss-

Newton) 방법으로 대변된다. 하지만 최급강하법은 수렴성에 문제점을 가지고 있다. 더 좋은 수렴성을 가지는 뉴우톤 방법은 오차 함수에 대한 2차 도함수를 사용해야 한다는 것 때문에 실제 신경망의 적용에서는 2차 도함수 대신에 1차 도함수를 이용하는 가우스-뉴우톤 방법이 사용된다.

최급강하법은 다음과 같이 정의된다.

$$w_{i+1} = w_i - \lambda \nabla F(w_i) \tag{1}$$

이 방법은 최적해와 멀리 떨어져 있는 초기상태에서는 빠르게 최적해 근처까지 도달한다. 하지만 최적해 근처에 존재하는 무수히 많은 국부적 해에 빠져 일정 오차를 벗어나지 못할 경우가 많다.

뉴우톤 방법은 보통 다음과 같이 정의된다.

$$w_{i+1} = w_i - H^{-1}(w_i) \nabla F(w_i) \tag{2}$$

여기서

$$\nabla F(w_i) = \frac{\partial F}{\partial w_i} : \ Gradient, \tag{3}$$

i는 i번째 가중치(Weight)

$$F = \sum_{k=0}^{N} e_k^2 \text{는SSE(square-sumerror)}, \tag{4}$$

$$H = \nabla^2 F(w) \text{는 Hessian matrix} \tag{5}$$

이 뉴우톤 방법은 최소해 가까운 상태에서는 적은 반복만으로도 해에 도달할 수 있으나 최소해가 멀리 존재하고 있을 경우에는 반복의 방향이 결정되어 있지 않기 때문에 최급 강하법보다 더 많은 반복을 필요로 한다.

LM 알고리즘은 동적으로 최급강하법과 뉴우톤 방법의 문제를 해결할 수 있다. 즉 크게 수렴하는 경우에는 최급강하법에 가중치를 크게 주어 반복하고 수렴이 느려지게 되면 뉴우톤 방법에 가중치를 주어 국부적 최소치로 수렴시킨 후 다시 최급강하법에 의해 바르게 최적해 쪽으로 가게 하는 것을 반복시키는 방법이다.

즉, 다음과 같은 수식에 의해 신경회로망의 반복학습이 가능하게 한다.

$$w_{i+1} = w_i - (H + \lambda I)^{-1} \nabla F(w_i) \tag{6}$$

여기서 $\lambda = 0$: 뉴우톤 방법, $\lambda \to \infty$: 최급강하법이 되며 λ는 동적으로 조절된다.

하지만 실제 LM알고리즘을 사용하는 BP신경망(LM-BP) 에서는 뉴우톤 방법의 H가 2차 도함수를 사용하기 때문에 이를 1차 도함수로 근사화시켜 사용하는 가우스-뉴우톤 방법이 이용된다.

즉, 뉴우톤 방법에서는 H는 다음과 같이 구해질 수 있는데

$$H = [\nabla^2 F(w)]_{ij} = \frac{\partial^2 F(x)}{\partial w_i \partial w_j} \tag{7}$$
$$= 2 \sum_{k=0}^{N} \left[\frac{\partial e_k(w)}{\partial w_i} \frac{\partial e_k(w)}{\partial w_j} + e_k(w) \frac{\partial^2 e_k(w)}{\partial w_i \partial w_j} \right]$$

(7)식에서의 두 번째 항은 충분히 무시할 수 있는 항이므로 무시하여 첫 번째 항만으로 근사화시킨다.

$$[\nabla^2 F(w)]_{ij} \cong 2 \sum_{k=0}^{N} \frac{\partial e_k(w)}{\partial w_i} \frac{\partial e_k(w)}{\partial w_j} \tag{8}$$
$$= 2 J^T(w) J(w)$$

여기서, $J_{ki} = \frac{\partial e_k}{\partial w_i}$: Jacobian 행렬 (9)

이 근사화를 사용함으로서, 우리는 2차 도함수의 필요성을 제거할 수 있다. 그리고 (6)식에서의 $\nabla F(w_i)$는

$$\nabla F(w_i) = J^T(w_i) e(w_i) \tag{10}$$

으로 정의될 수 있기 때문에 수정된 실제 LM-BP 알고리즘은 (11)식으로 최종 정리된다. (11)식에서 m번째 반복 스텝에서 조정되는 가중 파라미터이다.

$$w_{m+1} = w_m - [J^T(w_m) J(w_m) + \lambda_m I]^{-1} J^T(w_m) e(w_m) \tag{11}$$

여기서, $\lambda = 0$는 순수한 가우스-뉴우톤이고 $\lambda \to \infty$는 학습률을 가지는 최급강하법이다.

전형적으로 λ_k=0.01로 시작되며 만약 SSE가 충분히 작지 않으면 새로운 $\lambda_k = \lambda_k \cdot \theta$로 대치된다. 여기서 θ는 $1 < \theta < 10$의 상수로서 λ를 증가시키기 위한 일종의 배율기이다.

3.2. LM-BP를 이용한 인공후각 인식 시스템의 구현

가스의 종류와 그의 농도를 동시에 추정 할 수 있는 LM-BP 알고리즘을 사용한 인공후각 인식시스템은 오프 라인에서는 물론 환경 모니터링을 비롯한 인공후각 인식시스템의 산업응용에 기본이 되는 온 라인측정이 가능한 알고리즘으로 구현하였다. 인공후각 인식시스템은 평상시에는 온 라인 연속 감시를 하게 되며, 만약 어떤 기준치가 넘는 데이터가 입력되면 바로 이미 훈련된 분류 신경회로망에 의해 분류를 시작하게 된다. 분류 알고리즘은 LM-BP 알고리즘에 의해 오프 라인으로 학습된 가중치를 사용하여 전 방향 계산을 하게 된다. 70%이상의 가스가 분류 가능할 경우 분류된 가스별로 해당 농도 추정 신경회로망에 의해 농도를 계산한다. 예를 들어 벤젠으로 분류된 경우, 벤젠의 농도를 학습하여 보간 능력을 가진 벤젠농도 추정 신경망에 의해 농도를 구하게 된다. 만약 분류 가능 가스가 10종류라고 한다면 10개의 농도 추정신경회로망이 독립적으로 존재하게 된다. 분류가 70%이하로 되었을 경우는 분류가 힘들다고 판단하고 총량적으로 농도를 표시하도록 하였다.

분류 및 농도추정이 완료 되었을 때 PDA에 측정 결과를 저장하고 결과를 출력한다. 또한 인터넷을 통해 결과에 대한 정보를 전송한다. 그림 3은 신경회로망에 의한 분류와 농도 추정에 대한 방법을 보여주고 있다.

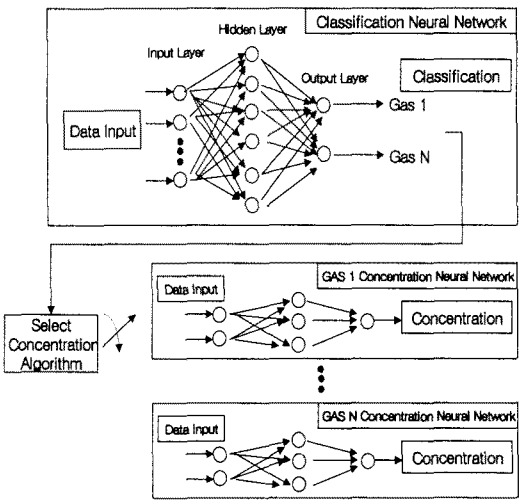

그림 3. 인공후각 인식시스템의 신경회로망 구성도

4. 실험 결과

본 연구에서 실험에 사용된 가스는 3종류로 에탄올, 톨루엔, 메탄올로서 이들은 주로 인체에 유해하다고 알려진 대표적인 VOCs 가스들이다. 이들은 서로 화학적 성분 면에서 비슷한 특성을 가지고 있어 이들을 분류하는 것은 보통 GC와 MS가 사용되어 왔으나, 이들 가스는 포집이 어려울 뿐만 아니라, 시간이 지나면 공기보다 무거운 특성에 의해 측정 당시의 상태와 다른 농도를 보이는 가스라 할 수 있다.

분류 신경회로망의 학습을 위해 가스별로 10개의 농도를 받아 총 50개의 패턴을 학습을 위한 패턴으로 사용하였다. 농도 신경회로망의 경우 3개의 가스를 사용하였기 때문에 3개의 독립적인 분류 신경회로망이 존재하며, 각 신경회로망에 별도로 10개의 농도 데이터가 사용되어 학습되었다.

분류 신경망의 경우 중간층 뉴런이 35개 사용되었으며 출력층 뉴런은 3개의 가스를 학습시켰기 때문에 3개가 사용되었다. 농도 신경망들은 각각 10개의 중간층 뉴런이 사용되었다.

표 3. 신경회로망에 의한 분류와 농도 추정 실험 결과

Tager GAS (Concentration)	Result of Classification (Output Neuron)	Estimated Concentration (ppm)
Ethanol (80 ppm)	0.9997(Ethanol) -0.0236(Methanol) 0.0022(Toluene)	82.529
Methanol (10 ppm)	0.0024(Ethanol) 0.9877(Methanol) 0.0011(Toluene)	12.414
Toluene (20 ppm)	-0.0091(Ethanol) 0.2325(Methanol) 0.9987(Toluene)	21.610

실험은 3가지의 대상 가스의 일정 농도(에탄올 80ppm, 메탄올 10ppm, 톨루엔 20ppm)를 추출하여 미리 학습된 분류 신경망과 농도 신경망을 이용하여 분류 및 농도를 얻었다. 분류 신경망에 있어서는 표 1에 나타난 결과처럼 대상 가스가 에탄올 80ppm인 경우 에탄올일 확률 99.97%, 메탄올 10ppm는 98.77%, 톨루엔 20ppm인 경우 99.87%로 아주 정확하게 분류하였다. 또한 농도 신경망에서는 에탄올 80ppm일 경우 82.529ppm, 메탄올 10ppm일 경우 12.414ppm, 톨루엔 20ppm일 경우 21.610ppm으로 정확한 농도를 얻을 수 있었다. 그러나 메탄올 10ppm에 대해서 25%의 오차를 보이고 있다. 그러나 에탄올 80ppm의 경우에는 3%정도의 오차를 가지고 있다. 따라서 낮은 농도 보다는 높은 농도 쪽에서 적은 오차를 보이고 있다는 것을 알 수 있다. 또한 측정당시의 환경적인 영향에 의해 발생할 수 있으며, 측정 시 측정자에 의해서 발생한다.

5. 결 론

본 연구에서는 유럽 및 미국 등지의 환경 분석분야에서 새로운 대안으로 제시되고 있는 필드 스크린의 개념과 유비쿼터스의 개념을 이용한 전자코 시스템의 설계를 위해 분석을 위한 주 프로세서로 상용화된 PDA를 사용하여 구성하였으며, 이렇게 설계된 전자코 시스템을 토대로 하여 필드 스크린이 가능한 알고리즘을 제안하였다. PDA를 이용하여 제어함으로서 사용자 인터페이스가 쉬워졌으며, on-site 측정이 가능할 뿐만 아니라 또한 인터넷과의 연동이 가능하도록 되어 있으며, 스케줄링 기능 및 경계치 설정에 의한 경고기능 등이 포함되어 있다.

사용된 알고리즘과 전자코 시스템은 실험 결과에서 알 수 있듯이 on-site 측정이 가능하며 ppm 단위에서는 비교적 정확한 결과를 보여 줌을 알 수 있었다.

하지만, 아직 전자코에 대한 연구는 다른 신호처리 분야에 비해 뒤지고 있는 것이 현실이다. 전자코가 유비쿼터스 환경에서 사용되기 위해서는 냄새에 대한 정성적 표현을 표준화할 수 있는 연구 등이 선행되어야 할 것으로 사료된다.

참 고 문 헌

[1] H.-G. Byun, Persaud K.C.,J.-D. Kim and D.-D. Lee, "Implementation of RBF network's performance for application to odour sensing system", Olfaction & electronic Nose Conference, PP. 237-240, 1999

[2] K. C. Persaud , and Travers P., "Multielement arrays for sensing volatile chemicals," Intelligent Instruments and Computers, vol. 147, 1991

[3] "Application of a multilayer perceptron based on the Levenberg-Marquardt algorithm to odour pattern classification and concentration estimation using odour sensing system", 7th ISEON'2000, July 2000, Brighton.U.K

[4] J.-D. Kim, H.-G. Byun & C.-H. Hong, "Mobile Robot with Artificial Olfactory Function", Trans. on Automation and Systems Eng. Vol. 3, No. 4, 223-228, December, 2001

[5] 최찬석, 김정도, 변형기, "Unsupervised clustering 방법을 갖는 인공 냄새 인식 시스템의 구현", 센서학회지, 제10권, 제6호, pp. 310-316, 2001

[6] 변형기, 이준섭, 김정도, "필드 스크린을 위한 휴대용 전자코 시스템의 구현",센서학회지, 제13권, 1호, pp. 41-46, 2003

[7] J. W. Gardner, Philip N. Bartlett, "Electronic Noses Principles and Applications", Oxford Science Publications, 1991

[8] US EPA,Compendium of Methods for the Determination of Toxic Organic Compounds in Ambient Air, US EPA, Method TO-14A, 1999.

[9] 송갑득, 박영일, 이상문, 이윤수, 최낙진, 주병수, 서무교, 허증수, 이덕동, "단일전극을 가진 마이크로 가스센서의 제작 및 특성", 센서학회지, 제11권, 제6호, pp. 350-342, 2002

[10]홍철호, 김동진, 이장훈, 권혁구, "센서어레이를 이용한 휘발성유기 화합물 측정기기 개발", 환경독성학회지, 제19권, 제1호, pp. 41-47, 2004