

## PCA와 ANN을 이용한 VOC 측정기기 개발

이장훈\*, 권혁구, 박승호, 김동진<sup>1</sup>, 홍철호<sup>1</sup>

호서대학교 환경안전공학부, <sup>1</sup>호서대학교 전기정보통신공학부

### The Development of VOC Measurement System Using PCA & ANN

Jang-Hoon Lee\*, Hyuk-Ku Kwon, Seung Ho Park, Dong-Jin Kim<sup>1</sup> and Chol-Ho Hong<sup>1</sup>

*Div. of Environmental and Safety Eng., Hoseo University,*

<sup>1</sup>*Div. of Electrical Information and Communication Eng., Hoseo University*

#### ABSTRACT

Air quality monitoring is a primary activity for industrial and social environment. The government identifies the pollutants that each industry must monitor. Especially, the VOCs (Volatile Organic Compounds), which are very harmful to human body and environment atmosphere, should be controlled under the government policy. However, the VOCs, which have not been confirmed in emission sources are very difficult to monitor. It is needed to develop the monitoring system that allow the continuous and in situ measurement of VOCs mixture in different environmental matrices. Gas chromatography and mass spectrometry are the most prevalent current techniques among those available for the analysis of VOCs. But, they need a large size analytical instrument, which costs a great deal for purchase and operation. In addition, it has some limitations for real-time environmental monitoring such as location problems and slow processing time. Recently, several companies have commercialized a portable VOCs measurement systems, which cannot classify various kinds of VOCs but total quantities.

We have developed a VOCs measurement system, which recognizes various kinds and quantities of VOCs, such as benzene, toluene, and xylene (BTX). Also, it can be used as a stand-alone type and/or fixed type in the vehicle with rack for real-time environmental monitoring.

**Key words :** VOCs, monitoring system, chromatography, BTX

#### 서 론

휘발성 유기화합물(이하 VOCs)은 탄화수소 화합물의 총칭으로 오존 등 광화학 스모그의 원인물질일 뿐 아니라 인체에는 발암성 유해물질이다. 또한 대기 중 악취물질로서 환경 및 건강에 영향을

초래하여 VOCs 감축을 대기관리의 주요 정책수단으로 결정하는 국가가 증가하고 있다(생산기술연구원, 2000).

최근 국내에서는 오존 오염도가 매년 증가하고 도시 지역에서는 단기환경 기준치를 초과하는 사례가 발생함에 따라 오존의 전구물질인 VOCs에 대한 종합적이고도 체계적인 규제관리가 요망되고 있다. 그러나 VOCs는 일반대기오염물질과 다르게 배출원이 고정되어 있지 않고 저장시설, 수송수단

\*To whom correspondence should be addressed.

Tel: +82-41-540-5741, E-mail: jhlee@office.hoseo.ac.kr

및 공정 중에서의 증발과 누출 등 불특정 배출원 으로부터 배출되는 오염물질이므로 개별 VOCs 화합물 배출량 산정 및 분석이 어려운 실정이다. 특히 VOCs 화합물들은 광화학 반응성과 인체에 대한 발암성 및 유해성이 다르므로 개별 VOCs 화합물의 배출현황 및 배출량산정이 매우 중요하며, 배출되는 수많은 화합물을 측정하기 위한 분석기기 및 측정방법의 확립이 매우 시급한 실정이다(최, 2001).

외국에서는 PID 센서만을 이용한 휴대형 VOCs 측정기기가 출시되고 있으나, 분류하는 기능을 가지고 있지 않고, 단지 VOCs 총량을 측정 할 수 있는 기능만을 가지고 있다(한국대기보전학회, 1998).

일부 제품 중에는 휴대용으로 만들어진 MS(Mass Spectrometer)가 있어 분류와 농도 측정을 동시에 할 수 있으나 가격이 고가이므로 영세한 도장 및 페인트 취급업소에서는 사용이 어려운 실정이다(한국대기보전학회, 1997)

본 연구에서는 다종의 가스센서를 어레이화 하여 BTX 가스를 측정하고 인공신경망(Artificial Neural Network : ANN)과 주성분 분석(Principal Component Analysis : PCA) 알고리즘으로 시물레이션과 실험을 통해 농도를 추론하였다. 대기 상에서 Benzene, Toluene, Xylene를 분류·측정하고, 총량 측정이 가능하며, 고정(실시간 환경 Monitoring) 사용뿐 만 아니라 휴대 및 Rack에 의한 차량 탑재로 이동 사용이 가능한 다목적 VOCs 측정 장비를 개발하고자 한다.

## 방법 및 재료

### 1. 분류 알고리즘

PCA와 인공 신경망 알고리즘(Back Propagation)을 기반으로 다음의 요구 사항분석을 통하여 다음과 같이 크게 3가지 파트로 설계되었다(Michael, 2000; Andrew *et al.*, 2001).

#### 1) 외부 데이터와의 접속 인터페이스 개발

프로토 타입 시스템은 집중화된 데이터베이스를 관리하여 측정된 계기에서 받는 데이터를 공유하고 측정 데이터를 저장, 관리할 수가 있어야 하는데 이러한 역할을 수행하기 위해서 데이터 베이스

인터페이스 및 관리 시스템을 구축하였다.

#### 2) 주성분 분석(Principal Components Analysis)의 구현

주성분 분석 방식은 측정된 데이터를 가시화 하는데 유용하게 사용될 모듈이며, 특징적으로 많은 Matrix Operation이 요구되어지는 모듈이다. 이러한 PCA 및 Matrix Operation 코드를 각각 분리된 C++ 코드형태로 설계 및 개발되었으며, Matrix 연산 부분은 PCA모듈 내에 내장되어 설계·개발하였다.

#### 3) 인공지능 신경망(Artificial Neural Network, Back propagation)의 구현

인공 신경망 모듈은 기존의 측정 데이터의 학습을 통한 실지 측정 시에 기존의 학습된 베타 모델에 근거하여 추론을 할 수 있는 추론 알고리즘 모듈이다. 이 모듈은 기존의 MATLAB 코드로 학습을 하여 생성된 학습 모델을 가지고 수행하였으며, 이렇게 학습된 결과를 가지고 테스트를 통하여 검증하였다.

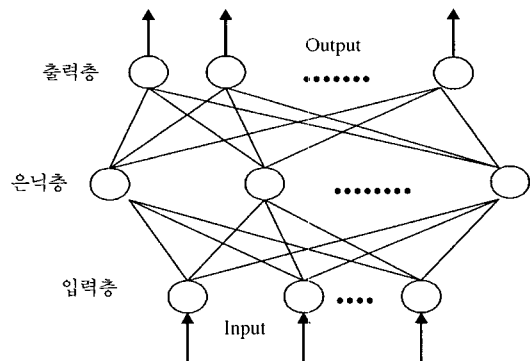


Fig. 1. Neural network configuration.

### 2. 가스 센서의 선정 및 원리

본 연구 과제에서는 반도체식 센서계열인 SnO<sub>2</sub> 계열인 Figaro사의 NMOS-type인 TGS 26xx 4종을 2개씩 사용하였다. NMOS-type 센서는 감지 가스의 농도가 증가할 때 센서 표면에 흡착된 산소를 탈착 시켜 전기 전도도를 낮춘다.

아래 Fig. 2는 센서 감지부에 산소가 흡착되는 상태를 도식화하였다. 센서 감지부에 산소가 흡착



젠, 톨루엔, 자일렌 각각의 단일가스에 대한 Test를 하였다. 표준가스로는 각각 1, 5, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100 ppm을 이용하여 측정되어졌다. 또한 일정한 유량으로 센서어레이에 공급하기 위해 MFC (Micro Flow Controller)를 이용하였다.

## 6. 비교 Test

개발된 장비의 비교 분석 방법으로는 실험실내에서의 표준가스 및 임의 발생가스를 사용하였으며, Field에서의 공정 중 발생하는 VOCs를 직접 개발된 측정기로 Test하고 이를 Tedlar Bag에 포집하여 GC/MS와 비교 분석하여 기기를 교정하였다 (U.S EPA, 2000). 분석기기는 On-line ATD (Turbo-matrix, Perkin Elmer) + GC (AutoSystem XL, Perkin Elmer) + MS (Turbomass, Perkin Elmer)를 이용하였고, 표준물질로는 BTEX Mixture 10 ppm (Supelco Inc.)을 사용하였다. 사용되어진 Column (DB-1)은 60m × 0.32 mm이며, Oven은 200°C로 하였으며, 총 작동시간은 15분으로 하였다. MS의 Ionizing은 EI (Electron Impact) Mode이고, Scan Mode는 Full Scan 33.00~200.00이었으며, Scan 및 Inter Scan Time은 각각 0.30 min과 0.10 min이었다.

ATD의 분석조건으로 Air Monitoring Trap Type으로 하였고, Low와 High의 온도는 각각 -30°C와 350°C하였다. Tube와 Valve는 각각 300°C와 210°C로 하였으며 Transfer는 210°C로 하였다. Sampling Time은 2~30 min으로 하였고, Purge 및 Desorb Time은 1 min으로 하였으며, Trap Hold Time은 5 min으로 분석하였다. 또한 GC Column Head Pressure는 9.5 psi로 운전되었으며, Inlet 및 Outlet Split은 각각 0 ml/min과 15 mL/min이었으며 Desorb Flow는 50 ml/min으로 분석하였다 (U.S EPA, 2001).

## 결과 및 고찰

### 1. 단일가스 Test

아래의 Figs. 5, 6, 7은 단일가스에 대한 센서들의 반응이다. 기준 데이터베이스를 만들기 위해 표준가스 B, T, X를 MFC (Mass Flow Controller)를 통해 제작된 하드웨어에 주입시켜 센서의 측정값을 사용해서 각 센서의 농도별 기준 데이터를 얻을

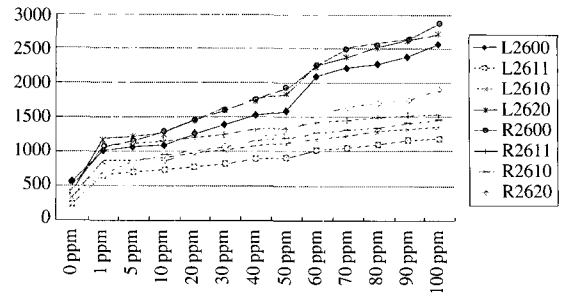


Fig. 5. Reaction level of MOS sensors (Benzene).

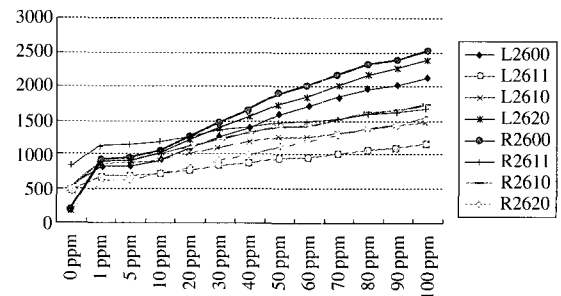


Fig. 6. Reaction level of MOS sensors (Toluene).

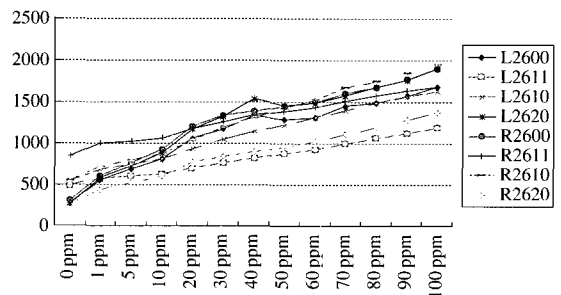


Fig. 7. Reaction level of MOS sensors (Xylene).

수 있었다.

### 2. Data Base Modeling Test

일반적인 대기는 질소를 가장 많은 비율로 하여 산소 및 아르곤 외 기타 많은 다른 가스들로 조합이 된 혼합물 형태의 가스 상태이다. 이러한 대기는 혼합형 가스로 모델링 될 수가 있으며 이러한 혼합 가스들 중에서 VOC 계열 3가지 가스인 벤젠, 톨루엔, 자일렌 가스를 검출 및 분석해 내하고자 하였다. 즉 혼합된 형태의 데이터에서 찾고자 하는

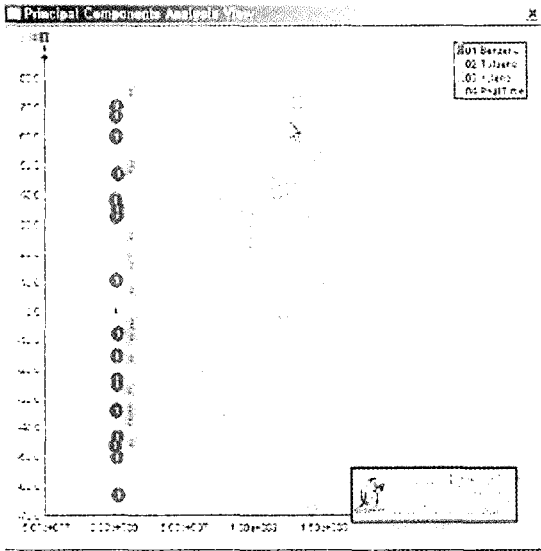


Fig. 8. Result of PCA (1).

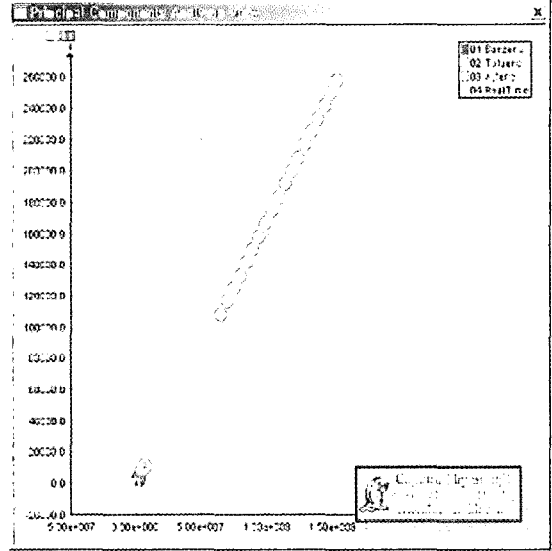


Fig. 9. Result of PCA (2).

목적 대상 변수가 3개인 문제로 정리될 수 있다.

$$Y_{\text{일반대기}} = B_{ppm} + T_{ppm} + X_{ppm} + O_2 + N_2 + \text{OtherGas}$$

$$Y_{\text{Sensor}} = B_x + T_x + X_x + O_2 + N_2 + \text{Noise}$$

이렇게 수식화 된 형태를 실험을 통하여 데이터를 얻어내는 동시에 실험을 통하여 얻어낸 데이터를 가상적으로 생성을 하고, 가상적으로 생성해낸 데이터를 어떠한 입력 형태로 구성을 해야 추론 및 분석을 하는데 있어서 적합한 구조인지를 파악하고자 하였다. 각각에 사용된 테스트 수행에 대한 데이터베이스의 적합도는 주성분 분석법과 인공지능 학습률에 비례하여 평가하였다.

1) 테스트 1

기본적으로 기존 실험 데이터를 기반으로 한 B, T, X 주인자만을 고려한 가상 데이터를 구성하였다. 인공지능 학습 결과 학습 시간 10분(학습 용이), 신경망 오차 0.01 ppm 이하로 출력되었다.

2) 테스트 2

B, T, X 데이터베이스 생성시 농도 및 센서 데이터를 선형으로 데이터는 증가하였다. 인공지능 학습 결과로는 학습 시간 10분(학습 용이)이며 오차 0.01 ppm 미만으로 출력 결과가 나왔다. 테스트 1과

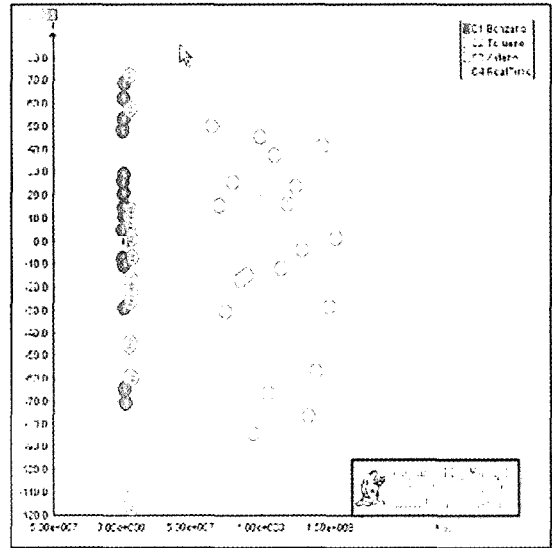


Fig. 10. Result of PCA (3)

동일하므로 주성분 분석결과는 첨부하지 않았다.

3) 테스트 3

B, T, X의 주인자를 고려하여 선형으로 농도 증가 즉 선형으로 센서 데이터 증가, B와 T의 센서 데이터 값을 같게 놓고, T의 센서 데이터에서 센서

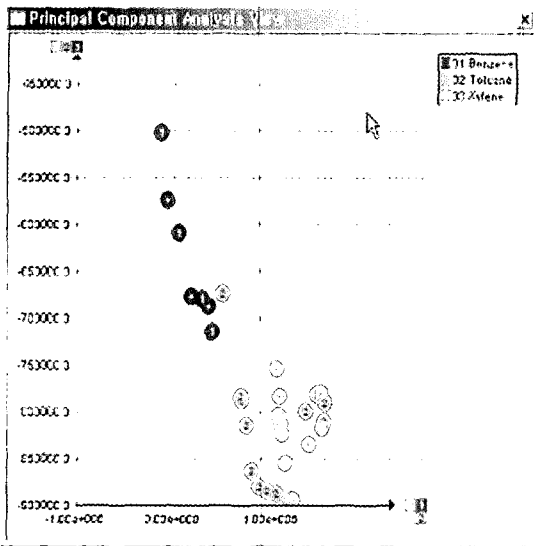


Fig. 11. PCA result for adapted new method.

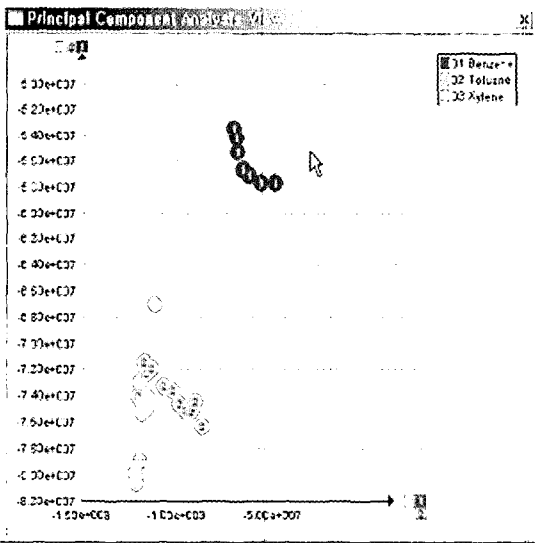


Fig. 12. PCA result for added weights.

번호가 홀수인 값은 100을 증가 시켰다.

인공지능 학습 효율은 좋았으며 농도 값도 거의 유사하게 정확히 산출하였다.

4) 테스트 4

현재까지 결과 중에서 이상적이라고 판단된 형태로 데이터 베이스를 생성하였으며, 이를 주성분

Table 1. Results of test

Item	Efficiency
Solvent	Benzene, Toluene, Xylene
Time	10 sec
Resolution	1 ppm
Accuracy	±2% (B, T, X)
Repeatability	±2% full-scale response
Sample flow rate	350 cc/min ± 5%
Sample collection	absorption
Operating temperature	-10°C ~ +40°C
Operating humidity	0 ~ 95%
Display	LCD (64 × 128)
Data output	RS 232C
Power	AC 220V
Dimensions (H*W*D)	176 × 430 × 410 mm

분석법으로 수행한 결과는 Fig. 10과 같다. 테스트 1부터 4까지의 결과로 유추해낸 데이터 베이스의 주성분 분석 결과는 Fig. 9와 같으며 이렇게 생성된 결과는 컴포넌트 1 (Benzene)과 컴포넌트 2 (Toluene)가 매우 근접해 있음을 알 수가 있다.

이러한 문제를 해결하기 위해서 센서들간의 거리를 입력으로 하는 방식을 취하였다.

Fig. 11은 기존의 센서 데이터를 직접 넣는 방식에 비해서 매우 효과적으로 분류가 되는 것을 보여주고 있다. 이러한 주성분 분석 결과를 바탕으로 좀더 주 인자에 영향을 주는 인자 각각에 대해서 가중치를 부과한 후 주성분 분석법을 다시 수행하였다.

주 인자 각각에 대해서 가중치를 넣었을 경우에 Fig. 12의 결과가 나왔다. Benzene는 다른 두 인자에 비해서 효과적으로 클러스터링 되었으며, Xylene 역시 기존에 비해서 Toluene과 서로간에 분리가 되었다.

위의 주성분 분석 결과를 비추어 보았을 때 센서 자체에서 측정된 데이터를 사용하기보다는 센서 데이터와 센서간의 데이터의 결과를 동시에 데이터 베이스로 구성하는 것이 훨씬 효과적이라는 결론을 얻게 되었다.

3. 성능 비교 Test

현재 VOC 측정기기의 형식승인·정도검사에 관한 관련 규정이 없는 상태이기 때문에 GC/MS (Turbomass/Perkinelmer사)와 비교 분석하였다.

VOCs 중 B, T, X 3종의 가스에 대해서 실험을

한 결과 ANN은 비교적 정확한 농도를 추론하였다. 하지만 온도 및 습도 등 환경적인 외란에 의해 추론한 농도 값의 오차를 보인다. 보다 안정적이고 정확한 결과를 얻기 위해서는 외란적인 요소들을 줄여야 하고 실험을 통해 많은 데이터베이스를 구축해야 하는 문제점이 있다. 이러한 문제점을 해결하기 위해 좀더 많은 실험과 데이터베이스의 구축이 필요하다.

## 결 론

금속산화물 반도체식 가스센서를 이용하여 어레이를 구성하고 후각인식 알고리즘을 개발 및 적용하여 벤젠, 톨루엔, 자일렌을 분류하며 그 농도를 계측할 수 있는 측정기의 개발에 대한 결과는 다음과 같다.

1. 다종의 가스 센서를 어레이화하여 B, T, X의 각 단계별 측정된 데이터를 신호처리 기법에 의해 분류하고 클러스터링 하는데 성공하였다.

2. 상용화된 전기화학식 반도체 센서를 이용하여 VOC를 ppm 수준까지 측정할 수 있었으며, full scale에서  $\pm 2\%$ 이내의 정확성을 보였다. 이는 고정(실시간 환경 Monitoring) 사용뿐 만 아니라 휴대 및 Rack에 의한 차량 탑재로 이동 측정이 가능할 것으로 사료된다.

3. 개발된 측정기를 응용·변형시킴으로 화생방 가스 감지, 악취감지 및 측정, 의료 및 향료산업, 식품 분야 등 다양한 분야에 파급효과가 있을 것이라고 예상된다.

## 참 고 문 헌

- 국내 VOC관리의 현황과 문제점, 한국대기보전학회 측정 분석분과회 워크샵, 1997.
- 생산기술연구원, 대기오염 자동측정기의 이론과 실무, 2000.
- 최한영, 실내 환경 측정분석, 동화기술, 2001.
- 휘발성유기화합물의 측정기술, 한국대기보전학회 측정분석분과회기술 강습회, 1998.
- Andrew D Back and Andreas S. Weigend Application of Independent Component Analysis to Extracting Structure from Stock Returns, 2001.
- Michael T. Health Scientific Computing An Introductory Survey, 2000.
- U.S EPA. Determination of VOCs in Ambient air using Active Sampling to Sorbent Tube, 1999.
- U.S EPA. Sampling of Principal Organic Harzardous Constituents from Combustion Source using Tedlar Bags, 2000.
- U.S EPA. Volatile Organic Compounds by Gas Chromatogram and GC/MS, 2001.