

Разпознаване и определяне на концентрацията на летливи органични съединения във въздушна среда

Георги Георгиев, Звездица Ненова

Recognition and determination of concentration of volatile organic compounds in air: The volatile organic compounds (VOCs) are chemical pollutants, which are subject to air quality control in offices, schools and homes. Xylene-o, benzene and toluene are analytes in these three types of indoors. In this paper an artificial neural network is used for recognition of VOCs. The approximation functions of sensor characteristics are obtained by the method of least squares for each of the compounds. The obtained regression models are used for determination of the gas concentration. The virtual instrument based on LabVIEW is created for recognition and determination of the concentration of xylene-o, benzene and toluene.

Key words: *volatile organic compounds, pattern recognition, artificial neural networks, function approximation, virtual instruments.*

1. ВЪВЕДЕНИЕ

През последните години с нарастване на количеството на отделяните вредни емисии се повишават изискванията към мониторинга на околната среда и осигуряването на здравословни и безопасни условия както на работното място, така и в училищата и дома. Високите нива на редица химически замърсители са причина за понижаване на качеството на въздуха. Значителен дял от замърсителите имат летливите органични съединения (VOCs). Това налага решаването на задачата за разпознаване и определяне на тяхната концентрация от съвременните системи за контрол на параметрите на въздушната среда [1].

При разпознаване на газови замърсители голямо приложение намират изкуствените невронни мрежи (ИНМ) с един неврон в изходния слой, при които целевите резултати се дефинират посредством една променлива с различни нива. Това е един от основните начини, който се използва за кодиране на присъствие и отсъствие на газови съединения [2, 3]. Друг подход се свързва с дефинирането на всяко съединение посредством отделен изходен неврон като газовото присъствие и отсъствие се указват със стойности +1 и -1.

При определяне на газовата концентрация най-често използван е регресионният анализ. В този случай методът се използва за формиране на зависимост между търсената концентрация на анализирания газ и измерения параметър на сензорния елемент [4-6].

В настоящата работа е представена структура на изкуствена невронна мрежа за разпознаване на ксилен-о, бензен и толуол, обучена по алгоритъма на обратното разпространение на грешката. Представени са изходните експериментални сензорни характеристики и регресионни зависимости за определяне на газовата концентрация, получени по метода най-малките квадрати. С помощта на програмния продукт LabVIEW е разработен виртуален инструмент за разпознаване и определяне на концентрацията на указаните VOCs във въздушна среда при работа с MySQL база данни.

2. ИНМ ЗА РАЗПОЗНАВАНЕ НА VOCs ВЪВ ВЪЗДУШНА СРЕДА

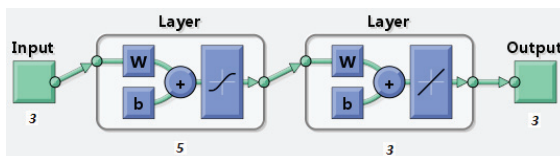
Извършено е обучение на ИНМ по алгоритъма на Levenberg-Marquard в среда на програмния продукт Matlab R2009b като са използвани експериментални данни за изходните съпротивления на газови сензори от серията AS-ML на фирмата AppliedSensor [7], съответно RsV за сензор тип AS-MLV, RsC - за AS-MLC и RsN - за AS-MLN, при различни концентрации във въздушна среда на ксилен-о, бензен и толуол. Получена е трислойна архитектура на невронната мрежа с входен, скрит и изходен слой. Използвани са тангес-сигмоидална и линейна функции на активация в

скрития и изходен мрежови слоеве. Наборът от входни данни съдържа 270 наблюдения, съответно по 90 за всеки от изследваните газове. В процентно съотношение данните са разделени за обучение, валидиране и тестване на невронната мрежа, съответно на 60%, 20% и 20%. Това съотношение се препоръчва за подобряване на мрежовата производителност и предпазване на ИНМ от преобучение [8]. Присъствието и отсъствието на всеки газ са дефинирани посредством кодови комбинации от единици и нули. Проведени са тестове с различен брой скрити неврони като е търсена мрежова структура с по-малък брой неврони и минимална средноквадратична грешка (MSE). В табл.1 са представени мрежовите целеви параметри и параметрите, използвани при обучение на ИНМ.

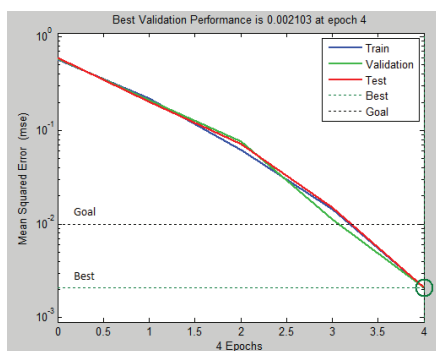
Таблица 1. Целеви параметри и параметри при обучение на ANN

Целеви параметри		Параметри при обучение на ANN	
VOCs	Кодова комбинация	show	25
		epoch	1000
Xylene-o	1 0 0	lr (learning rate)	0.05
Benzene	0 1 0	goal (mean squared error magnitude)	0.01
Toluene	0 0 1	min_grad	1e-05

Базирайки се на проведените тестове и получените стойности на MSE, за разпознаване на ксилен-о, бензен и толуол е синтезирана мрежова структура с 5 неврона в скрития слой, при която се постига минимална средноквадратична грешка 0.0021. Структурата на ИНМ за разпознаване е представена на фиг.1.



Фиг.1. Структура на ИНМ за разпознаване на VOCs

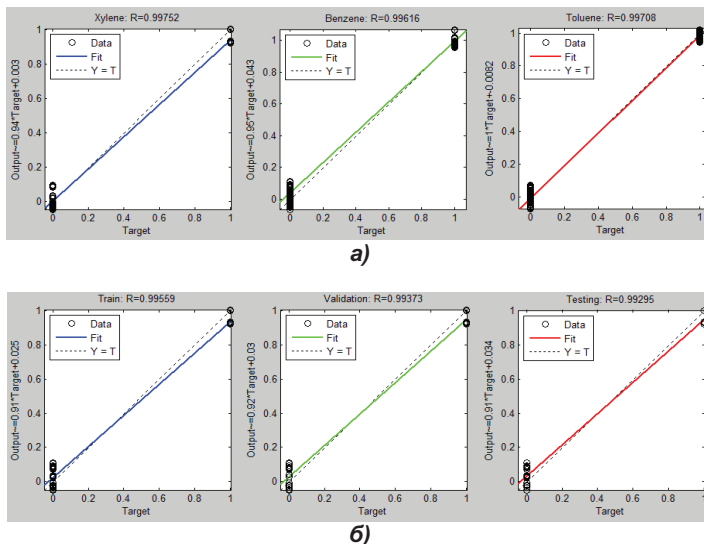


Фиг.2. Изменение на MSE при обучение на ИНМ

Като оценка на процеса на мрежовата производителност е използвано изменението на MSE спрямо броя на итерациите за обучение на ИНМ, представено

на фиг.2. За кривите на обучение, валидиране и тестване се наблюдава намаляване на средноквадратичната грешка – индикация, че няма преобучение на невронната мрежа [9] като при четвъртата итерация е достигнат минимален градиент.

На фиг. 3 са показани получените линейни регресионни зависимости между мрежовите изходни резултати и целеви параметри за всяко съединение и за процесите на обучение, валидиране и тестване. За представените зависимости се наблюдава добро групиране на данните около нивата, кодиращи газовото присъствие и отсъствие.



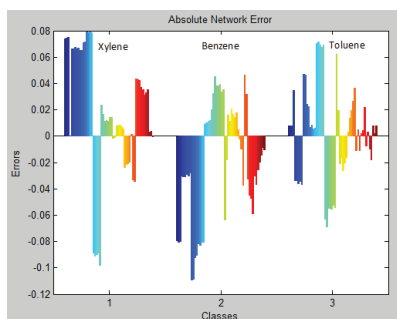
Фиг.3. Линейни регресионни зависимости между мрежовите изходни резултати и целеви параметри за ксилен-о, бензен и толуол **а)** и за процесите на обучение, валидиране и тестване на ИНМ **б)**

Confusion Matrix

	1	2	3	
1	17 31.5%	0 0.0%	0 0.0%	100% 0.0%
2	0 0.0%	19 35.2%	0 0.0%	100% 0.0%
3	0 0.0%	0 0.0%	18 33.3%	100% 0.0%
	100% 0.0%	100% 0.0%	100% 0.0%	100% 0.0%
	1	2	3	Target Class

Фиг.4. Матрица на коректните и некоректни класификации

Матрицата на коректните и некоректни класификации, представена на фиг. 4, показва коректно класифициране на наблюденията, включени в тестовата извадка (всички наблюдения са разположени по главния диагонал на матрицата, а останалите ѝ елементи са нули).

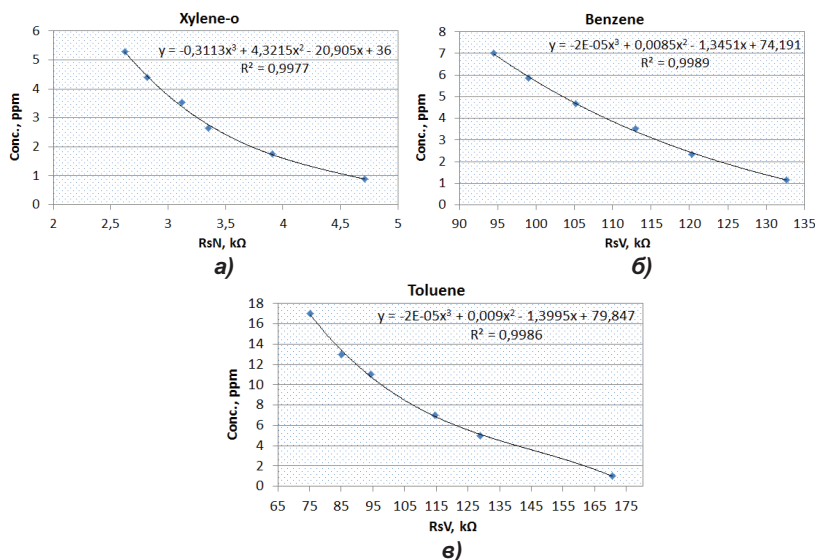


Фиг.5. Изменение на абсолютната мрежова грешка

Абсолютната мрежова грешка, показана на фиг. 5, се дефинира като разлика между мрежовите изходни и целеви резултати (1 или 0). Получената грешка за наблюденията от тестовия набор от данни варира в диапазона от -0.1094 до 0.0790.

3. ОПРЕДЕЛЯНЕ НА КОНЦЕНТРАЦИЯТА НА VOCs

На фиг. 6 са представени сензорните характеристики при различни концентрации на анализирани газове.



Фиг.6. Изходни сензорни характеристики и апроксимиращи функции на ксилен-о а), бензен б) и толуол в)

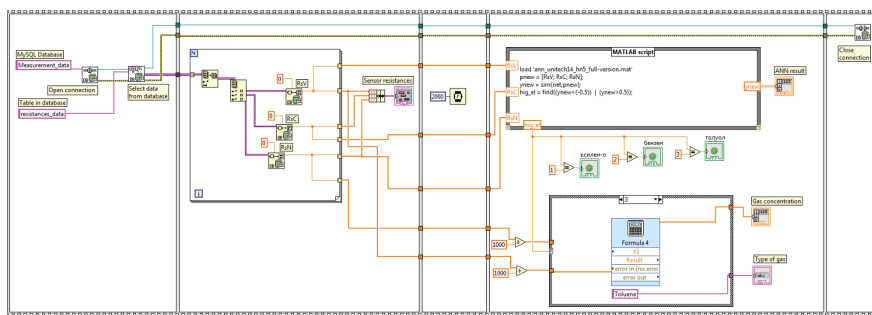
По тях, по метода на най-малките квадрати, са получени регресионни зависимости, чрез които експерименталните характеристики се апроксимират с висок коефициент на детерминираност R^2 . Тези зависимости са полиноми от трета степен.

4. ВИРТУАЛЕН ИНСТРУМЕНТ

В среда на продукта LabVIEW е създаден виртуален инструмент (ВИ) за прочитане на измерени данни от MySQL база данни (БД) "Measurement_data", разпознаване и определяне на концентрацията на ксилен-о, бензен и толуол. Предният панел и блоковата на ВИ са представени на фиг. 7.



а)



б)

Фиг.7. Преден панел а) и блокова диаграма б) на виртуален инструмент за разпознаване и определяне на концентрацията на VOCs

След прочитане от БД, данните се конвертират в тип, поддържан от LabVIEW. Преобразуваните данни се подават като входни параметри към matlab script, посредством който се зареждат параметрите на обучена невронна мрежа и се извършва разпознаване на съответното съединение. На база на изходния мрежови резултат - по-голям от 0.5 или по-малък от -0.5, наблюденията се отнасят към съответна класификационна група. Посредством формираните регресионни модели се определя газовата концентрация. Цифрови индикатори визуализират измерените

сензорни съпротивления, изходния резултат от ИНМ и пресметнатата концентрация на разпознатото съединение, което се указва и посредством светлинен индикатор.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложената изкуствена невронна мрежа и получените регресионни модели успешно решават задачите за разпознаване и определяне на концентрацията на ксилен-о, бензен и толуол във въздушна среда. Разработеният ВИ предоставя възможност за реализиране на указаните функции посредством удобен потребителски интерфейс. Съхраняването на измерените сензорни данни в MySQL база данни осигурява информационна защита и оторизиран потребителски достъп.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Георгиев Г., Ненова З., Контрол на замърсители на въздушната среда в затворени помещения. Международна научна конференция „УНИТЕХ '12“, 16-17 ноември 2012., Габрово. Сборник доклади. Том II, с.11-371 - 11-376.

[2] Artificial Intelgence: Foundations of Computational Agents. Neural Networks, 2010. (http://artint.info/html/ArtInt_183.html#nnet-ex).

[3] Huiling T., Guangzhong X., Yadong J., Gas Identification Using Gas Sensor Array and Self Organization Competitive Neural Network, Ministry of Education The Key Laboratory of Novel Transducers, China.

[4] Chen Ch., Shih J.-Sh., Multi-Channel Piezoelectric Quartz Crystal Sensor with Principal Component Analysis and Back-Propagation Neural Network for Organic Pollutions from Petrochemical Plants. Journal of Chinese Chemical Society, 2008, 55, p.979-993.

[5] Shih J., Hsu H., Multi-Channel Surface Acoistic Wave (SAW) Sensor Based on Artificial Back Propagation Neural (BPN) and Multivariable Linear Regression Analysis (MLR) for Organic Vapours. Journal of Chinese Chemical Society, 2007, 57, p.401-410.

[6] Thomson Learning, Chapter 3: Multiple Regression Analisys: Estimation, p.73-122. (http://www.swlearning.com/pdfs/chapter/0324289782_3.PDF).

[7] AppliedSensor. Quick Reference Manual – Test Kit AS-ML Sensor Components, 2009. (<http://www.appliedsensor.com>).

[8] Mathworks. Improve Neural Network Generalization and and Avoid Overfitting. 2014. (<http://www.mathworks.com>).

[9] Mathworks. Analyze Neural Network Performance After Training. 2014. (<http://www.mathworks.com>).

За контакти:

Проф. д-р инж. Звездица Ненова, Катедра “Основи на електротехниката и електроенергетиката”, Технически университет - Габрово, тел.: 066-827 376, e-mail: nenova@tugab.bg

Ас. инж. Георги Георгиев, Катедра “Основи на електротехниката и електроенергетиката”, Технически университет - Габрово”, gsm: 0877522029, e-mail: givanow@abv.bg

Докладът е рецензиран.