

A Study on Mixture Classification Using Neural Network

Ismihan Yusubov, Ali Gulbag, Fevzullah Temurtas
Sakarya University, Computer Engineering Department, Esentepe Campus, Sakarya, Turkey

Abstract: In this study, the binary gas mixtures were classified using probabilistic neural network (PNN). A data set consisted of the steady state sensor responses from the quartz crystal microbalance (QCM) type sensors were used for the training of the PNN. The performance of the PNN structure was discussed based on the experimental results.

Keywords: gas mixtures, probabilistic neural network, classification.

Yapay Sinir Aglari Ile Karisim Siniflandirmasi Üzerine Bir Çalisma

Özet: Bu çalismada, ikili gaz karisimleri olasiliksel sinir ağı (PNN) kullanılarak siniflandırılmıştır. Kuartz kristal mikrobalsans (QCM) tipi sensörlerden elde edilen kararlı hal sensör cevaplarını içeren bir veri seti PNN'nin eğitimi için kullanılmıştır. PNN yapısının performansı deneysel sonuçlara dayanarak tartışılmıştır.

Anahtar Kelimeler: gaz karisimleri, olasiliksel sinir ağı, siniflandırma.

Reference to this paper should be made as follows (bu makaleye aşağıdaki şekilde atıfta bulunulmalı): I.Yusubov, A. Gulbag, F. Temurtas, 'A Study on Mixture Classification Using Neural Network', Elec Lett Sci Eng , vol. 3(1), (2007), 33-38

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 siniflandırılması için kimyasal sensör tasarımlarının yapılması, günümüzde devam etmekte olan ve disiplinler arası çalışma gerektiren önemli bir konudur. Özellikle bu çalışma kapsamında olan uçucu organik bileşiklere, belirli seviyelerin üzerinde uzun süre maruz kalındığında 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 değerleri insan sağlığını tehdit eden seviyelere ulaştığında gerekli ikazlar yapılmalı ve gereken önlemler alınmalıdır [1].

Uçucu organik bileşikler esasen aromatikler, alifatikler, ketonlar, klorlu bileşikler ve alkoller olarak gruplandırılmaktadır. Bu çalışmada bu grupları temsilen, aromatikler grubundan benzen, alifatikler grubundan heksan, ketonlar grubundan aseton, klorlu bileşikler grubundan trikloretilen ve alkoller grubundan metanol ele alınmıştır.

Kimyasal sensörler bir arayüzey ve transduserden oluşur. Kimyasal sensörlerin en önemli kısmı olan algılayıcı malzeme, hangi gazı algılayacağını belirleyen önemli bir unsurdur. Uygun bir şekilde algılayıcı madde seçimiyle istenilen bir gazın algılanması mümkündür. Bu çalışmada, algılayıcı malzeme olarak ftalosiyanın ve oksim gibi büyük moleküllü kimyasallar kullanılmıştır. Bu kimyasallar, ısı ve kimyasal kararlılıkları, ince filmlerinin kolay hazırlanabilmesi, yakın

infrared bölgede yüksek soğurma bandına sahip olmaları, kolay çözülebilen katkılanmış türevleri ve elektriksel özelliklerinin katkılama ile büyük oranda değiştirilebilmesi gibi özelliklerinden dolayı yaygın olarak çalışılan organik yarıiletken malzemelerdir [2,3].

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 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 [4].

Sensörlerden alınacak olan tepkiler, değişik türdeki gazların farklı konsantrasyonlarına kompleks bir şekilde bağlıdır. Genellikle sensörler, bir analiz için tam bir seçicilik sağlamamakta ve farklı analitlere değişik tepkiler verebilmektedir. Bu problemin asılabilmesi 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 [5]. Bu yöntemler, istatistiksel çok bileşenli analiz metotları olan “Temel Bileşen Analizi”, “Kümeleme Analizi”, “Ayırma Fonksiyon Analizi” ve yapay zeka teknikleri olan “Yapay Sinir Ağları”, “Bulanık Mantık”, “Genetik Algoritmalar”dır [6].

Bu çalışmada, sensörlerin sürekli hal cevapları kullanılarak, yedi farklı ikili gaz karışımının niteliksel sınıflandırılması olasılıksal sinir ağı (Probabilistic Neural Network-PNN) ile gerçekleştirilmiştir. Gaz karışımlarının miktarsal sınıflandırılması, her bir gaz karışımı için ayrı ayrı çok katmanlı sinir ağı (MLNN) yapıları kullanılarak yapılabilir [7,8]. Böylece, PNN ve MLNN ağı yapıları birlikte kullanılarak gaz karışımlarının hem nitel hem de nicel sınıflandırılması gerçekleştirilebilir.

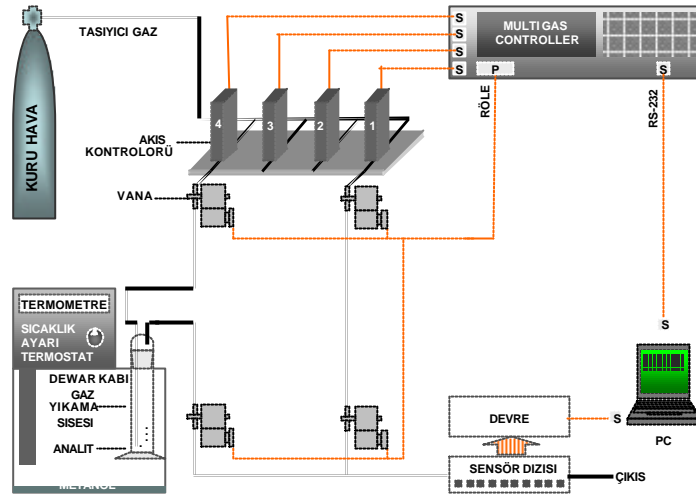
2 Ölçüm sistemi ve sensör dizisi

Bu çalışmada, kimyasal maddelerin buharlarının/kokularının algılanması, tanımlanması ve sınıflandırılması 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.

Oluşturulan sensör dizisindeki QCR’ler, her 6 saniyede bir frekans farklarından (Δf) oluşan veri setlerini seri port üzerinden bilgisayar ortamına aktaran devreye bağlanarak Şekil 1’deki ölçüm düzeni kullanılmıştır.

Dört ayrı kanala ayrılan hava, akis kontrolörlerinden (flow controller) belli debilerle geçirilmektedir. Bu kanallardan üç tanesi yıkama sisesi içinde sıvı halde bulunan maddelere gitmektedir. Diğer kanal ise istenilen konsantrasyonun sağlanması için yıkama sisesinden çıkan kanallarla karışmaktadır. Bu karışım sonunda ise istenilen konsantrasyonda ve debide gaz elde edilmiş olmaktadır. İstenilen konsantrasyonun sağlanmasındaki bir başka faktör olan yıkama sisesindeki sıvının sıcaklığıdır. Özellikle sensör çalışmalarında kullanılan gazların çoğu ölçülmek istenen gazın sıvısından elde edilebilmektedir. Bu işlem için sıcaklığa bağlı olarak bazı sıvıların atmosfer basıncı altında kaç ppm (parts per million) olabileceğini söyleyebilen

Antoine kanunundan faydalanılmaktadır. Antoine kanununa göre sıcaklığa bağlı olarak sıvının buhar basıncı Esitlik 1'deki gibidir [9].



Şekil 1. Ölçüm düzeni [8]

$$\text{Log}P = A - \frac{B}{(t + C)} \quad (1)$$

Burada A,B,C ilgilenilen sıvı için sabitlerdir t ise santigrad derece cinsinden gaz sıvısının bulunduğu ortamın sıcaklığıdır [9]. P ise torr biriminden ilgilenilen gazın kısmi basıncını ifade eder. Buhar basıncının birimi paskal birimine çevrilip 10 ile çarpılması ise ilgilenilen gaz için ortamda kaç ppm olduğu bulunmuş olmaktadır. Gaz numunesi ölçülmek üzere sensör test odasına girmekte ve burada kuartz kristal sensörler tarafından algılanarak egzoz vasıtası ile ortam dışına atılmaktadır. Bu çalışmada kullanılan analitler Tablo 1'de verilmiştir.

Tablo 1. Örnek analit maddeleri

I	UÇUCU KLORLU BİLESİKLER
1	Trikloretilen (Trichloroethylene)
II	AROMATİKLER
2	Benzen (Benzene)
III	ALIFATİKLER
3	n-Hekzan (n-Hexane)
IV	KETONLAR
4	Aseton (Acetone)
V	ALKOLLER
5	Metanol (Methanol)

Örnek analitler, bir gaz yıkama sisesine konulmuştur. Ölçüm süresince gaz yıkama sisesindeki analit, metanol dolu "dewar kabı" içerisinde tutulmuştur. Analiti istenen konsantrasyon seviyesinde elde edebilmek maksadıyla, analitin sıcaklığı (tanalit) dewar kabta bulunan bir termostat ile ayarlanmıştır. Örnek analitler için "Antonie Esitliğinin" katsayıları (A,B,C) Tablo

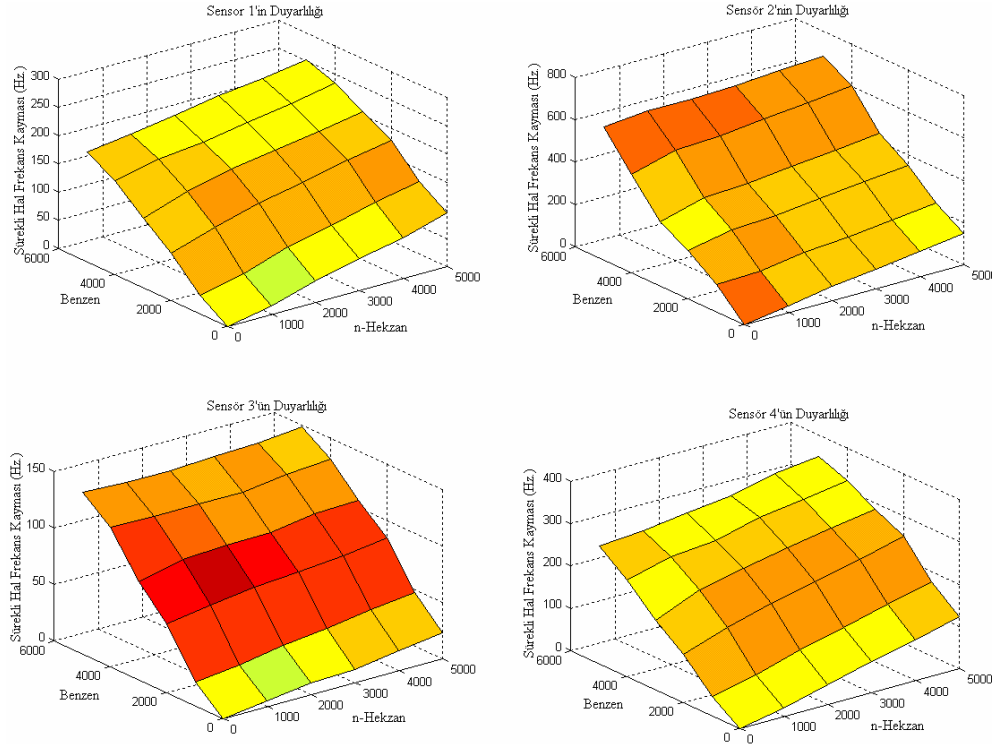
2’de verilmiştir. Bu katsayılar kullanılarak ölçülecek olan analitin konsantrasyon seviyesi (ppm) hesaplanır.

Tablo 2. Örnek analitlerin Antonie katsayıları

ANTONIE KATSAYILARI			
ANALIT	A	B	C
Trikloretilen	7,02808	1315,04	230
Benzen	6,90656	1211,083	220,79
Hekzan	6,87024	1168,20	224,21
Aseton	7,23157	1277,03	237,33
Metanol	8,0724	1574,99	238,87

Sensör dizisi, geri dönüşümün sağlanması için 10 dakika süresince sadece kuru hava, ardından 10 dakika süresince kuru havayla taşınan her bir analitin zamanla artırılan belli konsantrasyon seviyelerine dönüşümlü bir şekilde maruz bırakılarak ölçümler gerçekleştirilmiştir. Farklı analitlerin ve konsantrasyonlarının, dizideki kuartz kristalleri yüzeyindeki farklı algılayıcı kimyasal tabakalar tarafından değişik oranlarda adsorplanmasına 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 6 saniyede bir seri port üzerinden bilgisayar ortamına aktarılarak veri setleri elde edilmiştir.

Sekil 2’de sensörlerin örnek benzen-n-hekzan gaz karışımına olan duyarlılıkları verilmiştir.



Sekil 2. Sensörlerin benzen-n-hekzan gaz karışımına olan duyarlılıkları.

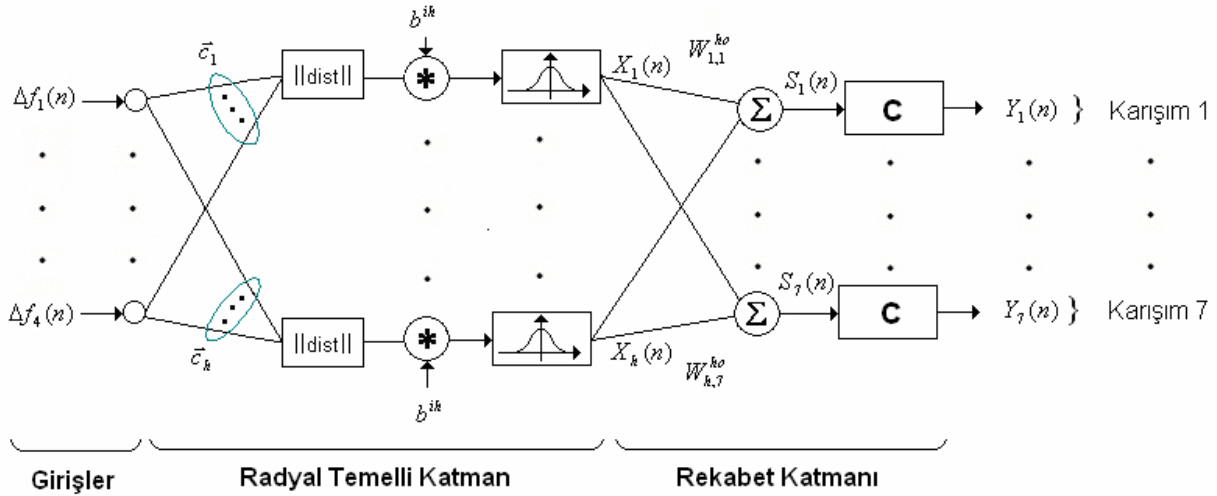
3 İkili gaz karışımının olasılıksal sınır ağları kullanılarak sınıflandırılması

Bu çalışmada, bir istatistiksel yapay sınır ağı modeli olan olasılıksal yapay sınır ağları (Bkz. Şekil 3) kullanılarak belirlenmiş yedi farklı ikili gaz karışımının niteliksel sınıflandırması yapılmıştır. Tablo 3’de hangi ikili gaz karışımlarının kullanıldığı ve niteliksel sınıflandırma için karışım indeksleri verilmiştir.

Tablo 3. Gaz karışımları ve niteliksel sınıflama için karışım indeksleri

Gaz Karışımları	Karışım İndeksleri
Benzen-Trikloretilen	1
Trikloretilen-Aseton	2
Trikloretilen-Hekzan	3
Trikloretilen-Metanol	4
Hekzan- Metanol	5
Benzen- Hekzan	6
Metanol-Benzen	7

Gaz karışımlarının sınıflandırılmasında sensorlerin sürekli hal cevapları esas alınmıştır. Her bir gaz karışımı için iki ölçüm yapılmıştır. Bu ölçümlerden biri yapay sınır ağının eğitimi diğeri ise test aşamasında kullanılmıştır.



Şekil 3. İkili gaz karışımlarının sınıflandırılması için kullanılan PNN yapısı.

Karışımların nitel sınıflandırmasını yapan olasılıksal yapay sınır ağı (PNN) modeli, 1960 adet eğitim verisiyle eğitilmiş ve 3920 adet test verisiyle test edilmiştir. Ağın çıktısı, karışım indeksini göstermektedir. Ağın eğitimi birkaç dakika içerisinde tamamlanmıştır.

4 Sonuçlar ve Öneriler

PNN ağı 1960 adet eğitim verisinin tümünü doğru olarak sınıflandırmıştır. 3920 adet test verisinde ise sadece 5 yanlış sınıflandırma yapmıştır. Bu sonuç, ağın genelleme kabiliyetinin yüksek olduğunu göstermektedir.

Gaz karisimlerinin miktarsal siniflandirmasi, her bir gaz karisimi için ayri ayri çok katmanli sinir agi (MLNN) yapilari kullanilarak yapilabilir [7,8]. Böylece, PNN ve MLNN ag yapilari birlikte kullanilarak gaz karisimlerinin hem nitel hem de nicel siniflandirilmesi gerçeleştirilebilir.

References (Referanslar)

1. Çaliskan, E., Yüksek Lisans Tezi, Sakarya Üniversitesi, Mayıs 2004.
2. Sadaoka, Y., Matsuguchi, M., Sakai, Y., Mori, Y., Effect of Crystal Form on the conductance in oxidative gases of Metal free and some Metal Phthalocyanines, Sensors and Actuators B 4 (1991) 495-498.
3. Shilbub, S.I., Gould, R.D., Frequency dependence of electronic conduction parameters in evaporated thin films of cobalt phthalocyanine, Thin Solid Films 254 (1995) 187-193.
4. Temurtas, F., Doktora tezi, Sakarya Üniversitesi, 2000.
5. Esen, N., Kara Harp Okulu Savunma Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 2004.
6. Gulbag, A., Doktora tezi, Sakarya Üniversitesi, 2006.
7. Gulbag, A., Temurtas, F., A study on quantitative classification of binary gas mixture using neural networks and adaptive neuro fuzzy inference systems, Sens. Actuators B, 115 (2006) 252–262.
8. Gulbag, A., Temurtas, F., An Intelligent Gas Concentration Estimation System using Neural Network Implemented Microcontroller, Lect. Notes Artif. Int., 3339 (2004) 1206-1212.
9. Tasaltin, C., Yüksek Lisans Tezi, Marmara Üniversitesi, 2000