

Interpretation von Gassensorarray-Daten mit Echo State Networks

Dr. Hans-Ulrich Kobialka
 Fraunhofer Institut Intelligente Analyse- und Informationssysteme IAIS
 Schloss Birlinghoven, 53754 Sankt Augustin
 hans-ulrich.kobialka@iais.fraunhofer.de

PD Dr. Lygia Therese Budnik
 Zentralinstitut für Arbeitsmedizin und Maritime Medizin (ZfAM)
 Ordinariat für Arbeitsmedizin des Universitätsklinikums Hamburg-Eppendorf

Dr. Ilona Koronczí
 Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

Zusammenfassung: Durch die Verwendung von speziellen rekurrenten neuronalen Netzen (Echo State Networks) ist es möglich, den gesamten zeitlichen Messverlauf eines ARTINOS[®] Sensorarrays auszuwerten, d.h. für die Identifikation und Quantifizierung eines Gefahrstoffes zu nutzen. Im Projekt DEGENA wurde dies für die Erkennung von gefährlichen Gasen in Fracht-Containern erprobt.

1. Einleitung

Das Erkennen von Gefahrstoffen und insbesondere deren Quantifizierung mit einem Vor-Ort-Messgerät ist eine schwierige Problemstellung, da ein solches Messgerät nicht nur portabel sondern auch in der Regel preiswert sein soll. Dies gilt insbesondere im Logistik-Bereich, in dem Begasungsmittel und Ausgasungen aus Waren ein ernstes Gesundheitsrisiko darstellen. Viele Container, die sowohl im Hafen als auch bei den importierenden Firmen antreffen, werden nicht vorschriftsgemäß als begast gekennzeichnet, oder sie erreichen die Endabnehmer der Produkte ohne Entlüftung. Weiterhin gibt es immer wieder Fälle, in denen die Begasung von Fracht-Containern überdosiert wird bzw. mit verbotenen Substanzen erfolgt. Somit stellt die Begasung von Fracht-Containern ein bedeutendes Gefahrenpotential für Lagerarbeiter, Zollbeamte und andere Personen, die mit Containern und ihrem Inhalt in Berührung kommen, dar [1] [2] [3].

Diesem Gesundheitsrisiko steht der ökonomische Schaden gegenüber, der durch Fehlalarme entstehen würde, falls ein Messgerät fälschlicherweise die Überschreitung eines Grenzwertes meldet. In diesem Fall muss ein Fracht-Container nach seinem Öffnen lange Zeit durchgelüftet werden, oder gar eine teure und zeitaufwändige Laboruntersuchung in Auftrag gegeben werden.

Ziel des BMBF-geförderten Projektes DEGENA war es, unter Nutzung des Multigassensors ARTINOS[®] der Firma SYSCA AG (www.sysca-ag.de), Verfahren zur Messdaten-Auswertung zu entwickeln, um in kleinsten Konzentrationen vorkommende gasförmige Gefahrstoffe in Frachtcontainern bei unterschiedlichsten Vor-Ort-Bedingungen quantitativ bestimmen zu können.

Mit den Ergebnissen von DEGENA soll vor Ort mit Hilfe eines Handgerätes festgestellt werden, ob ein Container gefahrlos begangen bzw. entladen werden kann.

Das Identifizieren und Quantifizieren von gefährlichen Gasen ist oft schwierig, da diese schon in geringsten Konzentrationen entdeckt werden müssen, selbst wenn andere, verwandte Stoffe in der Umgebung in weit höherer Konzentration vorhanden sind.

In ihrem Mess-Signal können sich verwandte Stoffe ganz oder auch nur teilweise überlagern bzw. in ihrer Signalstärke beeinflussen. Die Art und Weise einer solchen Beeinflussung ist je nach Gasgemisch unterschiedlich und kann nur empirisch festgestellt werden. Die Art und Weise dieser gegenseitigen Beeinflussung bestimmt, ob und mit welchen Unsicherheiten die Schätzung einer Gas-Konzentration möglich ist. Da die notwendige empirische Basis viele Messungen mit jeweils großen Datenvolumen umfasst (s.u.), haben wir davon abgesehen, das Problem analytisch durch ein mathematisches Verfahren anzugehen und uns stattdessen für ein statistisches Blackbox-Lernverfahren, „Echo State Networks“ (ESNs) [5] [6] [8], entschieden.

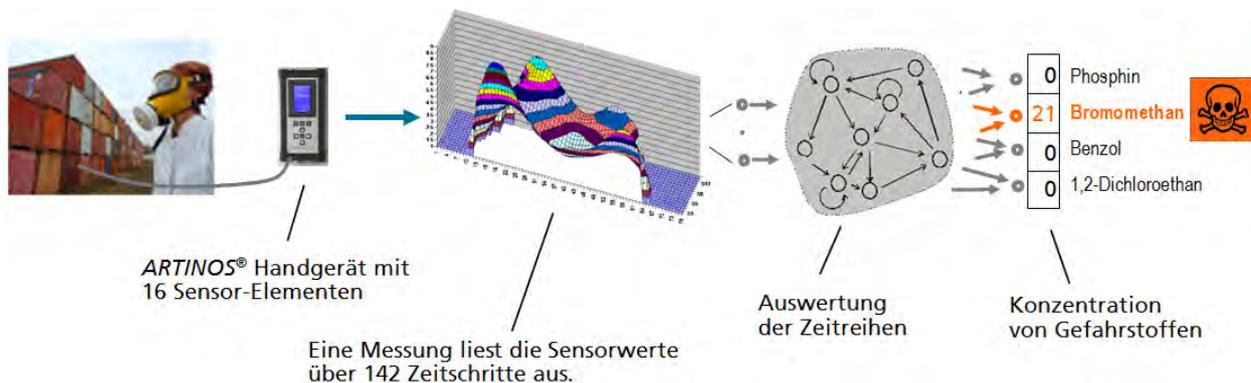


Abb. 1: Die quantitative Bestimmung von Gefahrstoffen durch Auswertung der durch *ARTINOS*® erzeugten Sensorwerte (Zeitreihen).

2. Der Multigasensor *ARTINOS*®

Die Elektronische Nase *ARTINOS*® der Firma SYSCA ist ein Sensorsystem, bei dem die Leitfähigkeitsänderung einer Detektorschicht unter der Einwirkung der zu bestimmenden Gase erfasst und ausgewertet wird. Das gassensorische Herzstück ist ein hochintegriertes Gassensor-Mikroarray (GSMA), welches auf einem einzigen monolithischen Metalloxidfilm (Zinndioxid) basiert, der in eine Vielzahl von Sensorsegmenten unterteilt wird (Abb. 2). Die in ihren gassensorischen Eigenschaften zunächst identischen Sensorsegmente werden unter Anwendung einer Gradiententechnik zweifach wie folgt differenziert:

- einen *Betriebstemperaturgradient* quer über das Array erzeugt durch vier Heizmäander auf der Rückseite (Abb. 2; Temperaturdifferenz ca. 50 K, mittlere Betriebstemperatur zwischen 200°C und 350°C), und
- einen *Schichtdickengradient* einer über dem Metalloxidfilm aufgetragenen gaspermeablen SiO₂-Membran (Abb. 2; die Schichtdicke nimmt quer über das Array von ca. 2 nm auf ca. 25 nm zu).

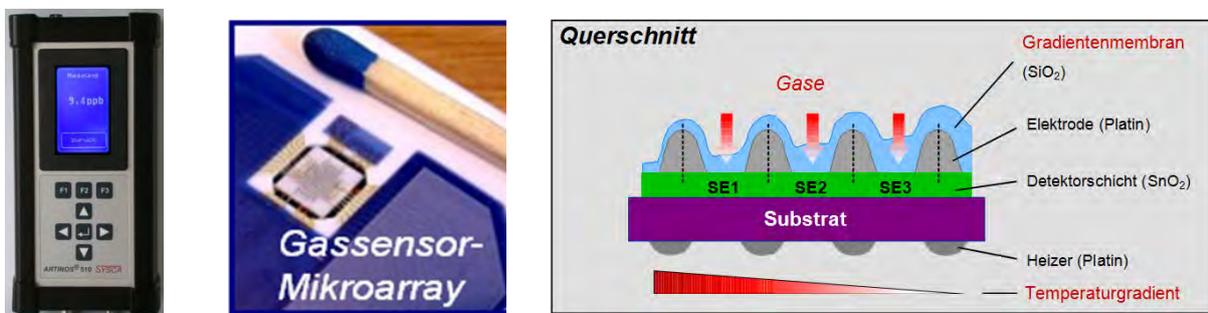


Abb. 2: Das *ARTINOS*® Handgerät, das darin enthaltene Gassensor-Mikroarray und die in dem Mikroarray realisierte Gradiententechnik.

Hieraus resultiert ein individuelles Empfindlichkeits- und damit Ansprechverhalten jedes einzelnen Sensorsegments, welches die Grundlage für die Gaserkennung bildet. Die Tatsache, dass die einzelnen Sensorsegmente über die selbe chemische Zusammensetzung verfügen, ist ein Alleinstellungsmerkmal gegenüber anderen Elektronischen Nasen auf Basis von Metalloxid-Sensoren und bietet den herausragenden Vorteil, dass eine eventuell auftretende Sensordrift durch physikalisch-chemische Veränderungen des Detektorfeldmaterials alle Sensorelemente in gleichem Maße betrifft und somit per Software unproblematisch ausgeglichen werden kann [4]. Das ARTINOS® Handgerät enthält ein miniaturisiertes Mikroarray mit 16 Sensorsegmenten.

3. Echo State Networks

Zur Erreichung dieser ambitionierten Zielsetzung wurden im Projekt DEGENA „Echo State Networks“ (ESNs) [5] [6] [8] eingesetzt, einem vom Fraunhofer IAIS patentierten Lernverfahren für künstliche rekurrente neuronale Netze (RNNs). RNNs (und damit auch ESNs) haben im Gegensatz zu sog. Feedforward Neuronalen Netzen (FNNs) Rückkopplungsschleifen. Ein RNN stellt mathematisch ein dynamisches System (vergleichbar einer Menge von Differenzialgleichungen) und somit eine Funktion auf der Zeitreihe der eingelesenen Messwerte dar.

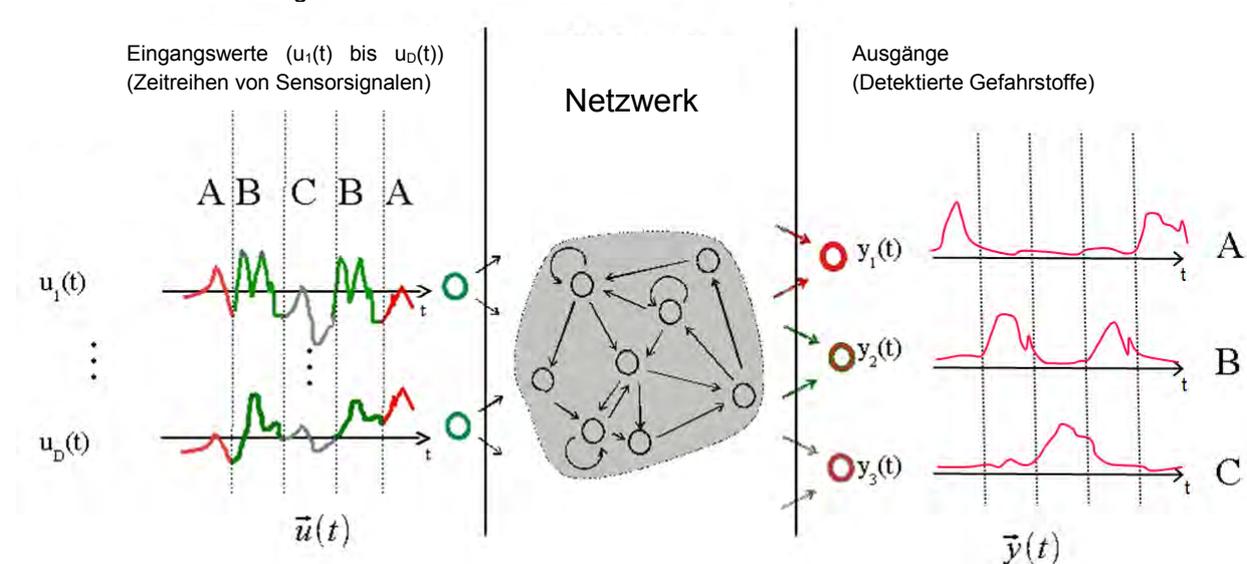


Abb. 3 Ein Echo State Network, das Gefahrstoffe (A, B, C) auf Grund charakteristischer zeitlicher Verläufe in den Sensorsignalen erkennt.

Die obige Abbildung zeigt schematisch den Lösungsansatz für die Erkennung und Quantifizierung von Gefahrstoffen mit Hilfe eines ESN. Die 16 Signale des ARTINOS-Sensorarrays ($u_1(t)$ bis $u_{16}(t)$) regen das Netzwerk an. Das Netzwerk besitzt für jeden zu detektierenden Gefahrstoff einen Ausgang $y_x(t)$, dessen Amplitude die Konzentration dieses Stoffes in der gemessenen Gasprobe angibt. Treten die Stoffe A, B und C nacheinander (wie in der Abbildung dargestellt) oder gleichzeitig auf, so werden die entsprechenden Ausgänge $y_x(t)$ entsprechend angeregt.

Die Verwendung von ESNs zur Erkennung und Quantifizierung von Gefahrstoffen bietet folgende Vorteile:

- Die Verwendung von ESNs ermöglicht es, die gesamte Zeitreihe des ARTINOS® Sensorarrays auszuwerten. D.h., das 16-dimensionale Signal von ARTINOS® wird nicht zu einem Zeitpunkt in einem Messzyklus betrachtet, sondern der gesamte zeitliche Messverlauf wird für die Identifikation und Quantifizierung eines Gefahrstoffes ausgewertet. Dadurch wird der gesamte Informationsgehalt des gemessenen Signals genutzt.

- Das supervisierte Lernen/Trainieren eines ESNs ist vergleichsweise einfach. Es werden mittels linearer Regression nur die Verbindungen zu den Ausgangsknoten $y_x(t)$ gelernt.
- ESNs können sehr groß (mehrere tausend Knoten) sein und haben somit die Kapazität, auch komplexe zeitliche Signalverläufe zu lernen und zu unterscheiden.

4. Ergebnisse

Es wurde eine Reihe von unterschiedlichen Messkampagnen und Experimenten durchgeführt. An dieser Stelle beschränken wir uns auf die Beschreibung des folgenden Experiments.

Es wurde untersucht, ob sich in Container-Atmosphären (Probebeutel aus einer Vielzahl von Fracht-Containern) Zielgase korrekt quantifiziert werden können. Als Zielgase wurden Formaldehyd und Ammoniak ausgewählt, da bis dato keine Vor-Ort-Analytik für Formaldehyd bestand, und Ammoniak auch von großer Relevanz im Sinne des Arbeitsschutzes ist. Es zeigte sich zudem, dass die Sensitivität von *ARTINOS*[®] für diese beiden Gase gut ist, d.h. beide Gase liefern ein starkes Signal.

Es wurden Probebeutel aus 156 Frachtcontainern gefüllt und daraus durch Mischung mit verschiedenen Konzentrationen an Formaldehyd und Ammoniak insgesamt 1073 Luftproben erzeugt. Diese Luftproben wurden mit *ARTINOS*[®] vermessen und die gemessenen Sensor-Daten mit Echo State Networks ausgewertet.

In der Auswertung mittels ESNs konnten die beiden Gase sehr gut von dem chemischen Hintergrund (d.h. den in einem Frachtcontainer enthaltenen chemischen Substanzen) separiert, und in ihrer Konzentration bestimmt werden (siehe Abb. 4). Jede Messung der insgesamt 985 Trainings- und 188 Test-Messungen hatte einen unterschiedlichen chemischen Hintergrund aus einem der vielen gemessenen Frachtcontainer. Dies und mögliche Störungen im Messvorgang erklären die Schwankungen des Messwertes in der unterstehenden Abbildung.

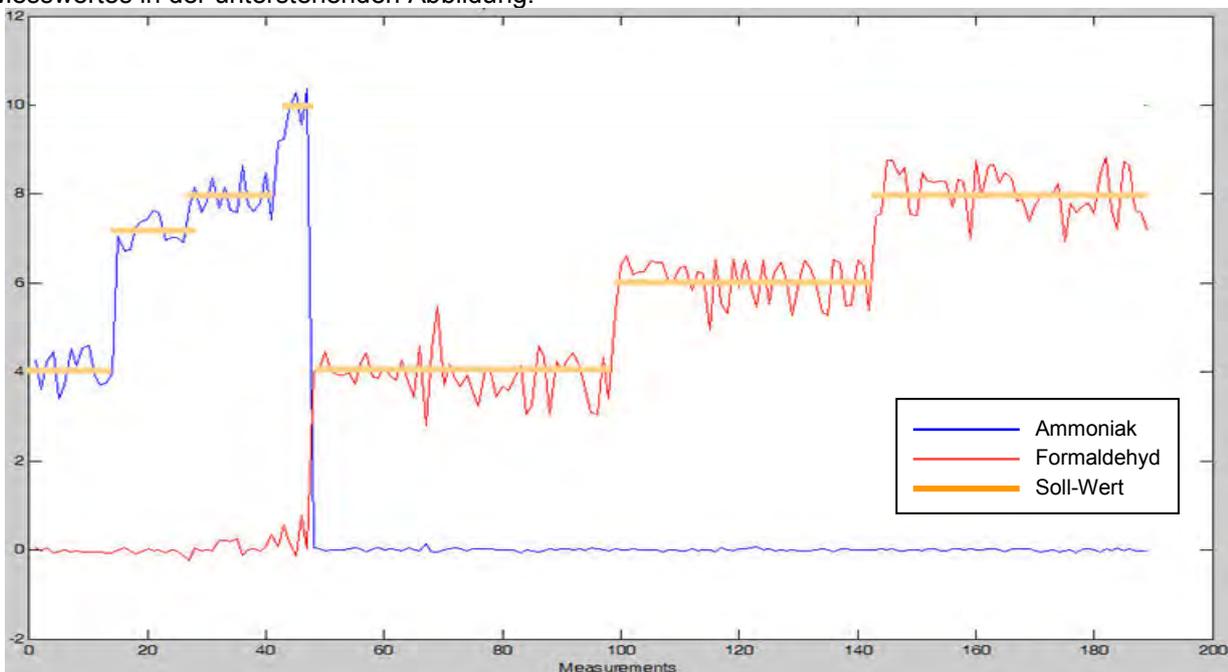


Abb. 4: Testergebnisse für die Bestimmung von Ammoniak und Formaldehyd in 188 Messungen. Jede dieser 188 Messungen ist eine 16-dimensionale Zeitreihe, wie in Abb. 1 dargestellt. Das trainierte ESN liefert für jede Zeitreihe die dargestellten Schätzwerte für Ammoniak und Formaldehyd.

Die Konzentrationsskala in Abb. 4 wurde logarithmisch gewählt. Stufe 4 entspricht 1 ppm, Stufe 6 = 10 ppm, Stufe 7 = 50 ppm, Stufe 8 = 100 ppm und Stufe 10 = 1000 ppm.

Der Arbeitsplatzgrenzwert (AGW, TRGS 900) für Ammoniak beträgt 20 ppm (20 ml/m^3 : 14 mg/m^3) [9]. Für Formaldehyd gibt es z.Z. keinen AGW. Der MAK-Wert (DFG-Kommission) beträgt 0,3 ppm ($0,37 \text{ mg/m}^3$), und der Spitzenwert der EU-Kommission (OEL) beträgt 1 ppm.

Bei Ammoniak liegt *ARTINOS*[®] mit der Empfindlichkeit deutlich unter dem Grenzwert (20 ppm). Formaldehyd kann mit *ARTINOS*[®] ab 1 ppm erkannt werden (Grenzwert 0,5 ppm). Allerdings gibt es für die Messung von Formaldehyd kein alternatives Handmessgerät, welches seiner Spezifität nahe kommt..

5. Weitere Untersuchungen

Neben wurden Formaldehyd und Ammoniak wurden auch die Konzentrationsbestimmung für andere Gase untersucht. Zum einen wurden typische Begasungstoffe für Frachtcontainer (Brommethan und Dichlorethan), und eine Reihe von anderen Gasen (Phosphin, Decan, Octenol, Aceton, Essigsäure) verwendet. Diese wurden untereinander und mit Container-Atmosphären gemischt und vermessen. Ähnlich zu dem oben beschriebenen Experiment, wurden mit den aufgezeichneten Sensordaten mittels Echo State Networks Auswertungsmodelle gelernt und auf Testdaten erprobt.

Diese Experimente haben gezeigt, dass durch den Einsatz von Echo State Networks der Nachweis für viele Gase sich verbessern lässt. Es hat sich aber auch gezeigt, dass unter schwierigen Messbedingungen (wie z.B. in Fracht-Containern) eine ausreichende Zuverlässigkeit nur erreicht werden kann, indem ein nicht unerheblicher Messaufwand betrieben wird.

Dieser Aufwand drückt sich nicht nur in der Anzahl der notwendigen Messungen (mindestens mehrere hundert) aus, sondern auch in der Sorgfalt bei dem Messvorgang bzw. bei dem Entfernen von Fehlmessungen. Dies verlangt automatische Kontrollen während des Messvorgangs, aber auch Plausibilitäts-Überprüfungen im Nachgang. Letzteres geschah durch den Einsatz von Echo State Networks in Kombination mit Techniken der Outlyer-Detection, insbesondere RANSAC (<http://de.wikipedia.org/wiki/RANSAC-Algorithmus>).

Weitere Arbeiten zeigten, dass sich die Auswerte-Ergebnisse sowohl mit Techniken des Ensemble Computings (d.h. durch eine Kombination von mehreren Echo State Networks), als auch mittels Feature Selection [7] weiter verbessern lassen.

Für die Modellbildung und Portierung auf den DSP des *ARTINOS*[®]-Handgerätes wurde wie folgt vorgegangen.

Das Training eines Echo State Networks (ESN) erfolgt mittels Matlab auf einem PC. Aus einem trainierten ESN wurde eine Datei erzeugt, die mittels Speicherkarte auf den DSP des *ARTINOS*[®]-Handgerätes übertragen wurde. Das auf dem DSP ausgeführte Auswertungs-Programm liest diese Datei, wertet mit dem ESN die Signale des *ARTINOS*[®]-Sensors aus, und zeigt die Gaswerte dem Benutzer an. Für die Auswertung der *ARTINOS*[®]-Sensorsignale auf dem DSP wurde ein C++-Modul geschrieben.

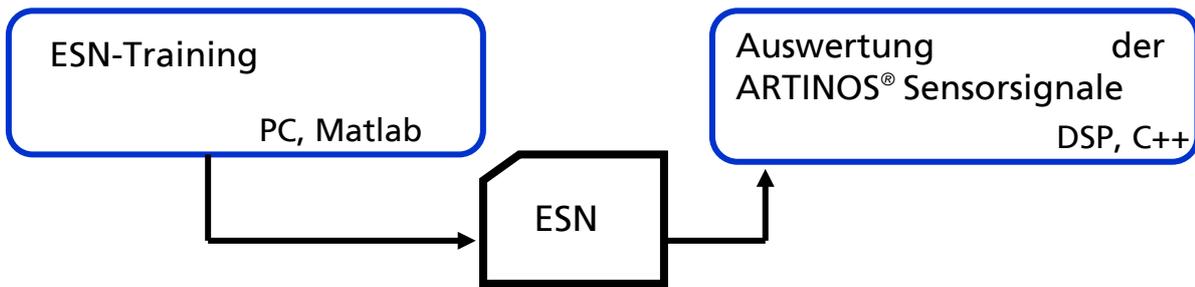


Abb. 5: Das auf einem PC trainierte ESN wird als Datei auf den DSP übertragen.

6. Fazit

Durch das Projekt DEGENA konnte gezeigt werden, dass durch die Verwendung von Echo State Networks für den Multigassensoren *ARTINOS*[®] die Nachweisgrenzen für etliche in Frachtcontainern vorkommende Stoffe signifikant herabgesetzt werden konnten. Der Nachweis eines Stoffes und die Genauigkeit der Konzentrationsschätzung sind allerdings abhängig von dem jeweiligen chemischen Hintergrund.

Die Verbesserung des Nachweises und natürlich auch die Verfügbarkeit eines Handgeräts stellen einen signifikanten Fortschritt für die Gefahrstofferkennung in Frachtcontainern dar.

Die Autoren danken dem BMBF für die Förderung des Projektes DEGENA im Rahmen des Programmes ‚KMU Innovativ‘.

Literaturreferenzen

- [1] Baur X, Poschadel B, Budnik LT.: *High frequency of fumigants and other toxic gases in imported freight containers – an underestimated occupational and community health risk*. Occupational Environmental Medicine 67:207-212 (2009)
- [2] Budnik LT, Fahrenholtz S, Preisser A, Veldman RW, Baur X.: *Neue Untersuchungsergebnisse von Schadstoffbelasteten Import-Containern und -Waren*, Zbl Arbeitsmedizin 59(6): 170-171. (2009)
- [3] Budnik LT, Fahrenholtz S, Kloth S, Baur X.: *Halogenated hydrocarbons and other volatile organic contaminants provide analytical challenges in global trading*. Journal of Environmental Monitoring 12. 936-942.(2010)
- [4] Goschnick, J. *An electronic nose for intelligent consumer products based on a gas analytical gradient microarray*. Microelectronic Engineering, 2001, 57-58, 693-704.
- [5] Jaeger, H., Haas, H.: *Harnessing Nonlinearity: Predicting Chaotic Systems and Saving Energy in Wireless Communication*. Science, April 2, 2004:78-80.
- [6] Jaeger, H., Maass, W., Principe J. (eds): *Special Issue Echo State Networks and Liquid State Machines*, Neural Networks Volume 20, Issue 3, pp 287-432 (2007)
- [7] Kobialka, H.-U.; Kayani, U.: *Echo state networks with sparse output connections*. In: Artificial neural networks - ICANN 2010. Berlin [u.a.]: Springer, 2010. (Artificial neural networks - ICANN 2010 1), S. 356-361
- [8] Lukosevicius, M., Jaeger, H.: *Reservoir computing approaches to recurrent neural network training*. Computer Science Review, 3(3):127-149 (2009)
- [9] *Technische Regel für Gefahrstoffe 900 „Arbeitsplatzgrenzwerte“ (TRGS 900)*
<http://www.baua.de/de/Themen-von-A-Z/Gefahrstoffe/TRGS/TRGS-900.html>