

Fuzzy Clustering 알고리즘을 이용한 휴대용 전자 혀 개발

Development of Portable Electronic Tongue using Fuzzy clustering algorithm

김정도*, 함유경**, 정우석***, 정영창****

Joeng-Do Kim, Yu-Kyung Ham, Woo-Suk Jung and Young-Chang Jung

Abstract - A portable electronic tongue(E-Tongue) system using an array of ion-selective electrode(ISE) and personal digital assistants(PDA) for recognizing and analyzing food and drink have been designed. By the employment of PDA, the complex algorithm such as fuzzy c-means algorithm(FCMA) could be used in E-Tongue. FCMA could iteratively solve the cluster centers of pre-determined standard patterns. And the membership between the standard patterns and unknown pattern could be analyzed easily by the present E-Tongue combined with PDA.

Key Words : ISE, E-Tongue, FCMA, PDA

1. 서론

인간의 미각기능을 모방한 전자혀(electronic tongue)는 서로 다른 이온 선택성 전극(ion-selective electrode : ISE)을 가진 센서들을 어레이화하여 사용하는 것으로 센서 어레이를 통해 측정된 데이터는 감지대상 물질의 화학적인 성분을 정량적으로 분석하게 된다. 이는 인간의 미각기능을 대신하여 음식의 맛과 향을 판단하거나, 음식의 종류, 변질의 유무 등을 직접 맛을 보지 않고 향을 맡지 않아도 분석이 가능하여 식품, 음료의 생산 공정이나 식음료 등의 신개발 연구 및 질병을 진단하는 의료용 등 우리 실생활에 유용하게 활용 할 수 있다.

전자혀에서 이용되고 있는 이온선택성 전극은 단일이온에 대해서만 선택적으로 반응하지 않고 다른 이온에 대해서도 부분적으로 반응한다. 따라서 다수의 이온 선택성 전극을 어레이화하여 신호를 측정하고, 측정된 신호를 적절한 알고리즘을 이용하여 분석하는 방법이 채용되고 있다. 보통 신호를 분석하기 위해서 사용되는 알고리즘은 PCA(principal component analysis) 방법이 사용되고 있다. PCA방법은 다중 센서가 사용된 다 차원의 데이터를 인간이 시각적으로 분석 가능한 2차원이나 3차원으로 축소 매핑하는 방법으로 측정된 신호의 특징을 추출할 수 있는 표준 방법으로 사용되고 있다. 하지만, PCA방법은 시각적 분석 방법이기 때문에 측정된 데이터를 클러스터링 할 수 없다. 실제 데이터를 정량적으로 표현하거나 성질을 표현하기 위해서는 별도의 방법을 사용해야 한다. 따라서 본 논문에서는 측정된 입력 패턴을 분석하기 위해 FCMA(fuzzy c-means algorithm)를 사용하였다. FCMA는 비

지도 학습(unsupervised learning) 방법에 의해 클러스터링 작업이 이루어질 뿐만 아니라, PCA와는 달리 차원을 축소하는 것이 아니라 차원을 그대로 가지고 클러스터의 센터와 각 패턴들의 소속도를 구할 수 있다.

본 논문에서는 이온선택성 전극을 어레이하고, 휴대가 용이하도록 하기 위해 PDA(personal digital assistants)를 연결하여 측정된 신호를 분석할 수 있도록 휴대용 전자 혀 시스템을 설계하였다. 정밀 측정을 하기위해 고분해능의 ADC(analog to digital converter)를 사용하였으며, FCMA를 이용하여 표준 패턴의 중심과 표준 패턴 클러스터의 소속도를 구하고 미지의 샘플 패턴의 소속도를 구해 휴대용 전자 혀 시스템의 성능을 평가하였다.

2. 이온 선택성 전극의 다중 배열 센서(MACS) 구조

이온 선택성 전극은 단 한 종류의 이온에만 선택적으로 반응하지 않는다. 즉 하나의 이온에 대해서만 선택적으로 반응하지 못한다는 이야기이다. 따라서 본 논문에서는 이온 선택성 전극을 모듈화하고, 어레이화한 MACS(multi array chemical sensor : 다중 배열센서)를 사용하였다. 전자 혀는 여러 종류의 이온선택성 전극의 이온 농도에 비례하는 전위차를 측정하여 이들의 감응 패턴으로 시료의 맛과 종류를 구분하게 된다. 그림 1은 종래의 전극과 MACS를 나타내었다.

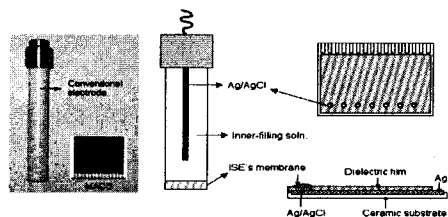


그림 1. 재래식 전극과 MACS

저자 소개

* 김정도 : 호서대학 전기정보통신공학부 조교수·공학

** 함유경 : 맥사이언스

*** 정우석 : 호서대학 전기정보통신공학부 석사과정

**** 정영창 : 호서대학 전기정보통신공학부 교수·공학

3. PDA를 이용한 전자혀 시스템

전자혀 시스템은 MACS로부터 측정된 신호를 PDA로 전달하기 위해 버퍼(buffer), LPF(low pass filter), Multiplexer, ADC, 전원부로 구성된 데이터 획득(data acquisition)부와 마이크로 컨트롤러로부터 전송받은 데이터를 분석하여 현재 측정된 샘플의 종류가 무엇인지를 판단하는 PDA로 구성되어 있다. 아래의 그림 2은 설계된 전자혀 시스템의 전체 구성도이다.

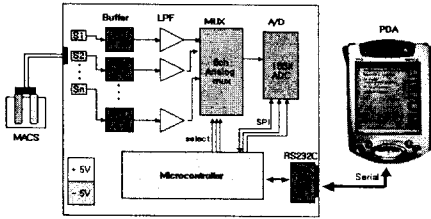


그림 2. 전자혀 시스템의 구성도

4. FCMA (FUuzzy C-Means Algorithm)

본 논문에서는 전자혀를 이용해서 직접 맛을 보지 않고 향을 맡지 않아도 장치가 측정할 수치나 그래프상의 수치 좌표로 식음료의 종류를 판단하기 위해서 FCMA를 이용하였다. FCMA는 하나의 클러스터에 속해져 있는 각각의 데이터 점을 소속정도에 의해서 클러스터에 대한 데이터의 소속정도를 일일이 열거한 데이터 분류 알고리즘이다. FCMA는 식 (1)와 같이 n 개의 입력 패턴들을 식 (2)와 같이 c 개의 클러스터로 분할한다.

$$X_i = [x_1, x_2, \dots, x_n]; X_i \text{는 } i \text{번째 패턴의 입력벡터} \quad (1)$$

$$Z_j = [z_1, z_2, \dots, z_c]; Z_j \text{는 } j \text{번째 클러스터 중심벡터} \quad (2)$$

이렇게 찾아진 클러스터 중심과 각각의 입력 패턴의 Euclidean distance를 구하며, i 번째 입력 패턴이 j 번째 클러스터 중심과의 소속도(W_{ij})는 다음과 같다.

$$W_{ij} \in [0, 1]; \quad 1 \leq i \leq n, \quad 1 \leq j \leq c \quad (3)$$

$$\sum_{j=1}^c W_{ij} = 1; \quad 1 \leq i \leq n \quad (4)$$

$$0 < \sum_{j=1}^n W_{ij} < 1; \quad 1 \leq j \leq c \quad (5)$$

위에서 각각의 패턴들은 서로 다른 소속도와 클러스터를 가질 수 있다. 그리고 식 (4)과 (5)에서와 같이 하나의 패턴에 대한 소속도는 0과 1사이의 실수로 전체 소속도의 총합은 1로 표준화되고, 각각의 패턴 소속도는 목적함수 J_m 이 최소가 되는 클러스터의 패턴을 찾는다.

$$J_m(W, Z) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^c W_{ij}^m d_{ij}^2 \quad (6)$$

$$d_{ij} = \|X_i - Z_j\| : \text{Euclidean distance}$$

목적함수 J_m 에서 d_{ij} 는 입력패턴과 클러스터 중심 사이의 유클리드 거리(euclidean distance)이다. 이것은 각각의 패턴에

대한 유사성을 측정한다. 여기서 m 은 소속 가중치 지수(membership weighting exponent)이고 이 값의 선택에 대한 이론적이고 정당화된 법칙이 존재하지 않기 때문에 일반적으로 $m = 2$ 로 선택한다.

FCMA는 식(6)의 목적함수의 최소가 되는 퍼지 그룹의 중심을 찾는 데 목적함수의 해를 구하려면 다음 식 (7)과 (8)을 이용하여 찾을 수 있다.

$$W_{ij} = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \left[\frac{d_{ij}}{d_{ji}} \right]^{2(m-1)}} \quad (7)$$

$$Z_j = \frac{\sum_{i=1}^n W_{ji}^m X_i}{\sum_{i=1}^n W_{ji}^m} \quad (8)$$

FCMA는 식 (7)과 식 (8)에 의해 분석적으로 해결되어지지 않는다. 식 (6)의 목적함수를 최소화하기 위해 반복적으로 식(7)과 식 (8)을 수행하여 최적의 값을 얻을 수 있다. 이러한 최적의 값을 얻기 위해 다음과 같은 학습과정을 통해서 각 클러스터들의 중심과 소속도를 구할 수 있다.

1. 클러스터의 개수를 정하고 지수의 가중을 선택하고 초기 소속함수를 결정한다.
2. 식 (7)을 이용하여 새로운 소속도를 계산한다.
3. 식 (8)을 이용하여 클러스터의 중심을 계산한다.
4. 새로 구해진 클러스터의 중심을 이용해서

$\|Z(k) - Z(k+1)\|$ 을 구한다.

만일 $\|Z(k) - Z(k+1)\| > \epsilon$ 면 $k = k+1$ 로 하고 다시 처음으로 돌아가고 그렇지 않다면 알고리즘을 종료한다.

이러한 과정을 통해 미리 얻어진 표준 패턴들에 대한 클러스터의 중심과 각 표준 패턴들의 클러스터 소속도를 구할 수 있다. 여기서 구해진 클러스터 중심들은 미리 컴퓨터에 저장되어 미지의 샘플이 입력되었을 경우에 미지의 샘플에 대한 소속도를 구하기 위해 사용된다.

$$d_j = \|S - Z_j\| \quad (9)$$

여기서 S 는 미지의 샘플 벡터이며 $j = 1, 2, \dots, c$ 이며 표준 패턴의 중심과 샘플 패턴과의 소속도는 다음 식 (10)에 의해서 구할 수 있다.

$$V_j = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \left[\frac{d_{ij}}{d_i} \right]^2} \quad (10)$$

식 (10)에서 V_j 는 j 번째 클러스터의 대한 샘플 벡터의 소속도를 나타낸다.

4. 실험 및 결과

본 논문에서 설계된 휴대용 미각 시스템을 이용하여 식음료를 분류 하였다. 식음료 중 녹차, 우롱차, 홍차에 대해 각각 3회를 측정하여 표준 패턴을 얻었고, 얻어진 표준 패턴을 이용하여 미지의 샘플을 분류하기 위해 표준 패턴의 중심과 소속도를 구하였다. 아래 표 1은 휴대용 전자혀 시스템의 MACS를 통해 측정된 녹차, 우롱차, 홍차의 표준패턴을 나타내었다.

표 1. 표준 패턴

Tea	Cl	Na	K	NH4	Mg	NO3	PH
Green 1	14.9	88.1	61.4	69.1	8.4	21.3	27.7
Green 2	18.4	100.1	61.0	69.4	9.5	14.0	27.5
Green 3	20.0	109.8	69.4	73.6	12.0	13.5	27.6
Urong 1	-56.2	68.4	74.7	99.5	22.1	10.2	17.4
Urong 2	-47.2	73.8	77.9	99.4	22.2	11.3	22.4
Urong 3	-39.1	64.1	75.8	94.2	20.1	14.4	22.1
Red 1	-34.1	79.8	99.4	100.1	19.4	14.2	38.9
Red 2	-26.3	79.2	100.7	99.9	16.7	19.0	38.9
Red 3	-20.8	70.3	90.4	89.2	12.7	21.9	36.8

휴대용 미각 시스템을 통해 얻어진 표준 패턴을 FCMA 학습과정을 통해 표준 패턴의 중심과 표준 패턴의 클러스터 중심을 구했다. 표준 패턴의 클러스터 중심과 표준 패턴 사이의 소속도는 표 2과 같이 찾았다.

표 2. 표준 패턴의 소속도

Tea	Green	Urong	Red
Green 1	0.93	0.03	0.04
Green 2	0.99	0.00	0.00
Green 3	0.95	0.02	0.03
Urong 1	0.01	0.94	0.05
Urong 2	0.00	0.97	0.03
Urong 3	0.02	0.88	0.10
Red 1	0.02	0.07	0.92
Red 2	0.01	0.02	0.98
Red 3	0.05	0.13	0.82

위와 같이 구해진 표준 패턴의 클러스터 중심을 PDA에 저장하고 미지의 샘플 패턴을 측정하였다. 측정된 샘플 패턴은 표 3와 같이 얻을 수 있었다. 그런데 실험 중에 MACS의 센서 하나(NO₃ 센서)가 이상 동작을 하였고, 센서가 파손되었다는 것을 알았다. 정상적인 동작을 하는 MACS의 출력 패턴과 하나의 센서가 파손된 MACS의 출력 패턴을 가지고 식 (9)을 이용하여 소속도를 구해 보았다.

표 3. 미지의 샘플 패턴

	Cl	Na	K	NH4	Mg	NO3	PH
Sample 1	-42.5	66.32	75.2	98.8	21.0	10.9	21.8
Sample 2	-38.7	64.9	77.5	100.6	22.3	0.0	23.2

이렇게 미지의 샘플 패턴 두개를 표준 패턴 클러스터의 중심과의 소속도를 구해보면 아래 표 4와 같은 결과를 얻을 수 있다. 실험 결과 정상적인 미지의 샘플 패턴은 96% 우롱차로 분류되어 FCMA에 의해 학습된 표준 패턴을 분류한 것과 완벽하게 일치하였다. 또한 센서 하나가 이상 동작한 패턴을 이용해서 소속도를 구한 결과 80% 우롱차로 분류하였다. 이는 표준 패턴에 대한 학습이 잘 되었고, 센서의 오동작에도

샘플 패턴을 정상적으로 분류해 낼 수 있다는 것을 의미한다. 설계된 휴대용 전자혀 시스템의 성능에 있어 측정 및 분류가 완벽하게 구현되었고 휴대용 전자혀 시스템의 안정성이 입증되었다.

표 4. 미지의 샘플 패턴의 소속도

Tea	Green	Urong	Red
Sample 1	0.006	0.96	0.03
Sample 2	0.034	0.80	0.16

4. 결론

본 논문은 이온 선택성 전극을 모듈화한 MACS를 사용하여 시스템의 크기를 축소시켰고, PDA를 이용하여 측정된 데이터를 분석할 수 있는 휴대용 전자혀 시스템을 설계하였다. 또한 FCMA를 통해 표준 패턴(녹차, 우롱차, 홍차)을 학습시켜 표준 패턴에 대한 클러스터의 중심과 소속도를 구해 PDA에 저장하고, 미지의 샘플 패턴에 대해서 어떤 종류의 음료인지를 결정했다.

설계된 휴대용 전자혀 시스템과 사용된 알고리즘은 실험 결과에서 알 수 있듯이 미지의 샘플 데이터에 대해 정확하게 분류하였고, 설계된 시스템의 성능이 우수하다는 것을 입증했다. 그러나, 설계된 전자혀 시스템을 이용하여 모든 식음료에 대해서 실험을 해 본 것은 아니므로, 향후 다양한 연구와 실험을 통해 얻어진 데이터를 바탕으로 모든 식음료에 적용해야 할 것이다. 또한 시스템의 크기도 현재의 PDA보다는 더 작아져야 하며, 맛에 대해 정상적인 표현을 표준화 할 수 있는 연구가 이루어져야 할 것이다.

참고 문헌

- [1] R. W. Cattrall, "Chemical Sensors", Oxford University Press, pp. 4-23, 1997.
- [2] D. T. Sawyer, A. Sobkowiak, J. L. Robert jr., "Electrochemistry for Chemists", John Wiley & Sons inc., pp. 24-52, 1995.
- [3] J. W. Gardner, Philip N. Bartlett, "Electronic Noses Principles and Applications", Oxford Science Publications, 1991
- [4] A. V. Legin, A. M. Rudnitskaya, Yu.G. Vlasov, Di Natale C., D'Amico A., "The features of the electronic tongue in comparison with characteristics of the discrete ion-selective sensors", Sensors and Actuator B, V.58, pp.464-468, 1999
- [5] L. Lvova, S. S. Kim, A. Legin, Yu. Vlasov, G. S. Chaa, H. Nam, "All-solid-state electronic tongue its application for beverage analysis", Analytica Chimica Acta, Vol. 468 Iss. 2, pp. 303-314, 2002