

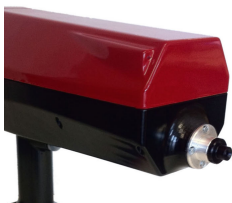


Jörn Frank (Autor)

Klassifikationsmethode für ein Gasdetektorenarray mit Chromatographen zur Identifikation von Gefahrstoffen

Jörn Frank

Klassifikationsmethode für ein
Gasdetektorenarray mit
Chromatographen zur
Identifikation von Gefahrstoffen



Cuvillier Verlag Göttingen
Internationaler wissenschaftlicher Fachverlag

<https://cuvillier.de/de/shop/publications/7371>

Copyright:

Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen, Germany
Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: info@cuvillier.de, Website: <https://cuvillier.de>



Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Grundlagen	5
2.1. Gassensoren	5
2.1.1. Halbleitergassensoren	6
2.1.2. Photoionisationsdetektor	9
2.1.3. Elektrochemische Zellen	12
2.2. Ionenmobilitätsspektrometer	16
2.2.1. Ionenmobilität	17
2.2.2. Prinzip eines Flugzeit-Ionenmobilitätsspektrometers	18
2.2.3. Prinzip eines Doppelröhren-Flugzeit-Ionenmobilitätsspektrometers	20
2.2.4. Ionisierungsprozess	21
2.2.5. Eigenschaften der Spektren	23
2.3. Gaschromatographie	24
2.3.1. Einflussgrößen der Gaschromatographie	25
2.3.2. Methoden der Injektion von Probengas	26
2.4. Verfahren der Mustererkennung und Klassifikation	30
2.4.1. Gestaltung von Klassengrenzen	33
2.4.2. Klassifikationsbäume	37
2.4.3. Random Forest	43
3. Aufbau von mobilen GC-Multisensor-Systemen	46
3.1. Realisierung eines GC-PID-Systems mit kurzer Multikapillare	46
3.1.1. Fluidik der analytischen Komponenten	46
3.1.2. Detektor	49
3.1.3. Datenaufnahme und -verarbeitung	51



3.2. Realisierung eines Multi-Sensoren-Arrays	51
3.2.1. Gasführung	52
3.2.2. Sensorik	55
3.2.3. Elektronik	60
3.2.4. Datenaufnahme und -verarbeitung	64
3.2.5. Umsetzung als Handgerät	64
4. Analyse des Signalverhaltens	66
4.1. Merkmalsextraktion der Einzelsensoren	68
4.1.1. Relative Sensorantwort	70
4.1.2. Anstiegszeit	70
4.1.3. Auswahl der Merkmale	71
4.2. Merkmalsextraktion von GC-Verläufen	72
4.2.1. Filterung nach Savitzky-Golay	73
4.2.2. Peakerkennung bei Chromatogrammen	76
4.3. Merkmalsextraktion von IM-Spektren	76
4.3.1. Signalaufbereitung	77
4.3.2. Peakerkennung bei Ionenmobilitäts-Spektren	79
4.3.3. K0-Wert-Bestimmung	80
4.4. Eingangsmerkmale des maschinellen Lerner	81
4.5. Signaldarstellung für Vor-Ort-Interpretation durch Expertennutzer	82
5. Implementierung einer Datenbasis zur Identifikation von Substanzen	85
5.1. Messdatenaufnahme	85
5.1.1. Messaufbau	86
5.1.2. Kalibriergasgenerator mit Permeationsgefäßen	88
5.1.3. Datenformat	89
5.2. Maschinelles Lernen mit Hilfe realer Messdaten	89
5.2.1. Überwachtes Lernen mit einem Entscheidungsbaum nach CART	90
5.2.2. Überwachtes Lernen mit Random Forest	92
5.2.3. Vergleich der Verfahren	94
5.3. Implementierung eines Random-Forest Klassifikators	95
5.3.1. Datenaustauschformat zwischen überwachtem Lerner und Klassifikations-Programm	96



5.3.2. Implementierung des Klassifikators auf dem Zielsystem	97
6. Evaluation und Ergebnisse	99
6.1. Test des Klassifikators mit unabhängigen Testdaten	102
6.1.1. Bewertung der Klassifikationsraten	105
6.1.2. Diskussion zur Übertragbarkeit des Klassifikators	109
6.2. Klassifikation von GC-Läufen	110
6.3. Untersuchung von GC-IMS-Läufen	113
7. Zusammenfassung	116
A. Anhang	120
A.1. Liste relevanter gefährlicher Stoffe	120
A.2. Dateiformat der Musterdatenbank	122
A.3. Fehlerfortpflanzung der K0-Wert-Berechnung	123
A.4. Bewertung der Random Forest Methode zur Chromatogramm-Auswertung	123