

基于模糊-神经网络的甲醛电子鼻

邓小艳, 黄元庆*

(厦门大学物理与机电工程学院, 福建 厦门 361005)

摘要: 基于模糊-神经网络的甲醛电子鼻, 采用气体传感器阵列和模糊-神经网络结合, 实现了模糊-神经网络在甲醛电子鼻中的定量识别. 并通过实验, 对于 $0.01 \times 10^{-6} \sim 50 \times 10^{-6}$ 浓度范围内的甲醛气体, 甲醛电子鼻定量测报的平均相对误差小, 仅为 0.197 086.

关键词: 模糊-神经网络; 甲醛电子鼻; 气体传感器阵列

中图分类号: TP 183

文献标识码: A

文章编号: 0438-0479(2009)05-0684-04

甲醛是一种具有刺激性气味且有较高毒性的物质, 在我国有毒化学品优先控制名单上高居第二位. 甲醛已经被世界卫生组织确定为致癌和致畸形物质, 是公认的变态反应源, 也是潜在的强致突变物之一.

为了模仿生物系统的嗅觉功能, 人们打破生物和机器的界限, 制造出模仿生物嗅觉功能的人工嗅觉系统, 俗称电子鼻. 工作原理是先由气敏传感器阵列对气味产生响应, 再通过数据采集和处理, 配合模式识别算法判断这种响应来自哪种气味. 这样, 不仅可以辨别简单气体的成分和浓度, 而且可以在复杂的环境中完成复杂气体中各成分的定性、定量分析. 模糊-神经网络同时具备了模糊逻辑对规则的表达能力及神经网络的学习^[1], 这种结合两种算法优点的算法使测量结果更加精确.

本文基于模糊-神经网络和气体传感器阵列的甲醛电子鼻, 可现场定量检测空气中的甲醛. 且对甲醛气体的响应专一, 定量结果精确. 可用于卫生防疫、环境保护、劳动卫生和石化等领域, 也可用于工业生产车间. 这样避免人类在含有甲醛的危害环境下执行任务, 对人类的身体健康起到了最大程度的保护作用.

1 工作原理与主要硬件功能

1.1 甲醛电子鼻工作原理

将标定好的甲醛气体注入传感器阵列所在气室, 传感器阵列的响应通过测试调理电路转化成电压信

号, 由数据采集卡采集信号. 再把采集到的信号送入模糊-神经网络进行训练, 系统的结果直接送入显示系统进行显示(见图 1).

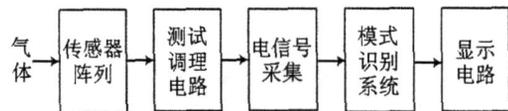


图 1 甲醛电子鼻的结构简图

Fig. 1 The architecture of the formaldehyde e-nose

1.2 传感器阵列

由于单一气体传感器的响应谱线比较宽, 稳定性不好, 响应非线性, 存在较大的交叉敏感性, 即不仅可感应甲醛气体, 而且还可以感应其他气体. 所以外界的干扰气体会破坏传感器原有标定的输出信号与浓度之间的函数关系, 测量结果就会受到影响, 精确度和准确度结果不可靠^[1]. 传感器阵列不仅能够解决交叉敏感性问题, 提高气体传感器的选择性^[2], 而且能够有效地消除各种干扰的影响, 在干扰气体存在下进行定性和定量的测量, 以弥补单一传感器在测量方面的不足.

气体传感器阵列的数量应适中, 因为传感器阵列中气体传感器越多, 虽然能获得越多的外部信息, 但数据如果出现重复, 即数据的冗余程度太大, 造成模式识别算法复杂, 计算量大, 时间长等^[3]. 因此, 合适数量的传感器阵列, 在实现信息的最大化、最简化的同时, 还可以降低硬件成本, 消除由于过多元件可能引入的软件和硬件错误.

气体传感器阵列的性能直接决定了系统的识别能力、识别范围、使用寿命等, 因而如何构成阵列以提高电子鼻系统的性能成为本实验的重要部分. 本气体传

收稿日期: 2008-12-25

基金项目: 国家“大学生创新性实验计划”项目(41)资助

*通讯作者: yqhuang@xmu.edu.cn

传感器阵列,交叉响应特性、阵列稳定性是主要目标.因为甲醛传感器除了对甲醛气体响应,对 H₂ 和 CO 等还原性气体也会有低量的感应.如果各单元对特定气体具有较好的选择性,则阵列对这些气体及混合气体的识别能力就比较强^[4].所以,在传感器阵列中,除了甲醛传感器,还选择了目标气体是 H₂ 和 CO 等还原性气体的传感器.然后通过 PCA 确定数据的主成分进而对传感器数量进行限制,最终确定由 5 个气体传感器组成阵列,即一个瑞士 Membrapor 公司生产的甲醛传感器(CH₂O-S)和 Figaro 公司的 4 个不同型号的 MOS 气体传感器,分别为 TGS2602、TGS2610、TGS2442 和 TGS813.这样传感器阵列不仅在数量上达到最优选择,而且在消除单一气体传感器交叉敏感性方面也是最好的选择.

1.3 数据采集硬件

本实验的数据采集硬件要求 5 路 16 位模拟输入,2 路 16 位模拟输出,至少 7 条数字 I/O,测量精度要求高.通过分析和对比,发现 NI 的 M 系列多功能高速数据采集卡 PCF6251 是最适合本实验装置的.PCF6251 数据采集卡具有 16 路 16 位模拟输入,采样率最高达每秒 1.25 × 10⁶ 个样本,2 路 16 位模拟输出,24 条数字 I/O,2 个 32 位计数器,完全能够满足本实验装置中对传感器阵列中 5 个传感器的信号进行数据采集的要求.并且 NI 公司为了方便数据采集工作而设计了 DAQ Assistant(数据采集助手)模块,它由许多与数据采集相关的子程序组成,无需程序员处理一些数据采集底层的事物,让程序员集中精力于数据的处理和分析上^[5].它具有测试效率高,可展性强和操作简便的优点.

2 软件部分

2.1 数据采集

自行编写 NI 的 LabVIEW 数据采集程序,配合前文介绍的数据采集卡,对传感器阵列通过调理电路后变化的电压进行采集.程序如图 2 所示.

程序中使用 3 个模块,分别是:延时模块、数据采集模块和记录模块,外加一个显示控件,完成数据采集、存储和显示的工作.图中的 Elapse Time 模块是延时模块,负责为程序提供一个计时器,整个程序被放在一个 while 循环中.当延时模块计时超过 360 s 时,图中的大于号运算输出一个 Boolean 值,把 while 循环的值设置为 True,使程序中止;DAQ Assistant 是数据采集助手,它是数据采集的核心,双击它可以打开数据采集窗口.在这个对话框可以新建采样项目,然后在

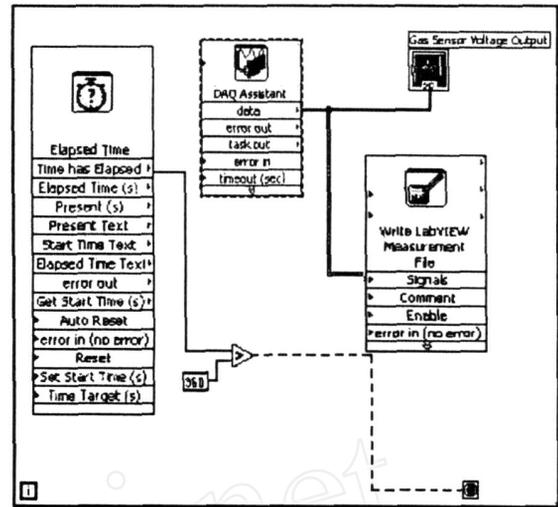


图 2 数据采集程序

Fig. 2 The procedure of data collection

面板上设置采集参数.从采集模块输出的信号一路提供给显示控件,让使用者监视测量情况,一路提供给记录模块;Write LabVIEW Measurement File 是把采集模块传送过来的电压信号写成以制表位分隔的数据文件,其扩展名为 lvm,该文件可以使用 Excel 打开.

2.2 模糊-神经网络

模糊-神经网络是近年来基于模糊理论发展起来的一种新的预测方法.常规的前向型网络只含有求和节点,这给处理某些复杂问题带来了困难.为此,本文采用高木-关野模糊系统,使用一种混合型的 pi-sigma 神经网络^[6].用这种网络实现的模糊型辨识,可方便地在线修正隶属函数和结论参数,很适合于复杂系统的模糊预测和控制.

在图 3 的网络中,S、P 和 · 分别表示相加、相乘和模糊相乘运算. X_j 是传感器阵列中 5 个传感器的信号,为模糊神经网络的输入变量; p_jⁱ 为真值参数; Y 为模糊神经网络的输出变量,与待测气体的浓度相对应.由网络的结构可知该网络的输出为

$$Y = \frac{\prod_{i=1}^m w^i y^i / \prod_{i=1}^m w^i}{\left[\prod_{i=1}^m [u_{A_1^i}(x_1) \cdot u_{A_2^i}(x_2) \cdot u_{A_3^i}(x_3) \cdot u_{A_4^i}(x_4) \cdot u_{A_5^i}(x_5) (p_0^i + p_1^i x_1 + p_2^i x_2 + p_3^i x_3 + p_4^i x_4 + p_5^i x_5)] \right] / \left[\prod_{i=1}^m [u_{A_1^i}(x_1) \cdot u_{A_2^i}(x_2) \cdot u_{A_3^i}(x_3) \cdot u_{A_4^i}(x_4) \cdot u_{A_5^i}(x_5)] \right]}$$

公式中的加权系数 wⁱ 包括了规则 Rⁱ 作用于输入所取得的所有真值, u_{A_jⁱ}(x_j) 是模糊集 A_jⁱ 的隶属度.

将输入变量 X_j 的模糊子集划分为 {NL, ZO, PL}, 分别表示负大、零附近和正大,各模糊子集 A_jⁱ 的隶属函数均为高斯型, x 取值为 [0, 5], 即:

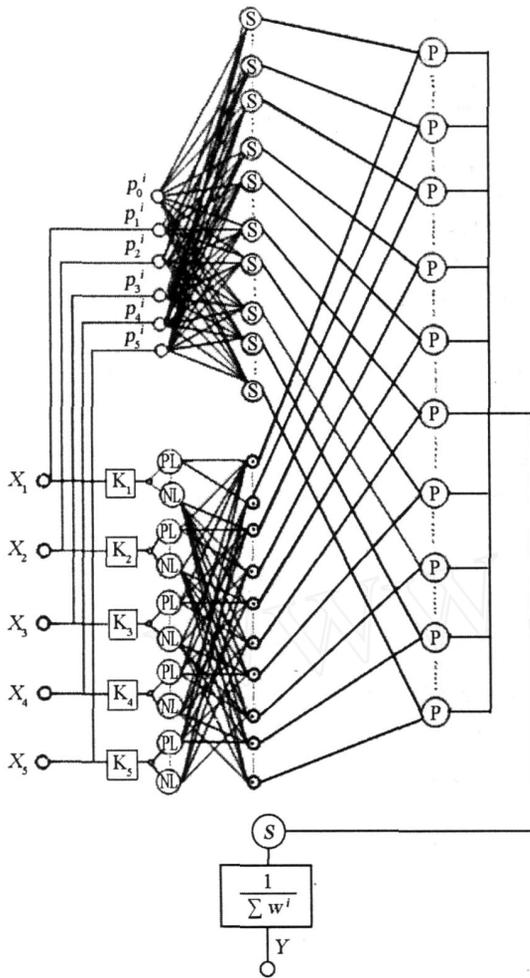


图3 模糊-神经网络结构

Fig.3 The construction of the fuzzy neural network

$$u_{PL}(x) = \begin{cases} 1, & x > 5 \\ \exp(-\frac{(x-5)^2}{3}), & x = 5 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

$$u_{NL}(x) = \begin{cases} 1, & x < 0 \\ \exp(-\frac{x^2}{3}), & x = 0 \\ 0, & x > 5 \end{cases}$$

$$u_{ZO}(x) = \exp(-\frac{(x-2.5)^2}{1.5}).$$

由此,5个输入变量的模糊分割均为3,得到 $3^5 = 243$ 条模糊规则:

R^1 : If x_1 is PL, x_2 is PL, x_3 is PL, x_4 is PL, x_5 is PL,

Then $y^1 = p_0^1 + p_1^1 x_1 + \dots + p_5^1 x_5$;

... ..

R^{243} : If x_1 is NL, x_2 is NL, x_3 is NL, x_4 is NL, x_5 is NL,

Then $y^{243} = p_0^{243} + p_1^{243} x_1 + \dots + p_5^{243} x_5$.

y^i 为系统根据规则 R^i 所得的输出.

借助模糊系统的规则来反映电子鼻系统传感器阵列中各个传感器的整体组合效果,通过混合型 pi-sigma 神经网络的学习,把隐含的规则通过神经网络的权值和神经元的转换函数表达出来.这样,在一定的算法程序作用下,传感器的响应信号被定量的提取和映射,从而形成模式响应面,并迅速地对待测甲醛气体浓度做出定量判断^[7].

3 实验

3.1 气体浓度的标定

本文使用上海海欣色谱仪器有限公司 GC-960 气相色谱仪对甲醛气体浓度进行标定.送入气相色谱仪标定后的甲醛气体浓度分别为 75.092 00、65.795 75、55.625 15、45.445 55、35.004 55、25.125 05、15.987 55、5.652 55、0.940 67、0.846 60、0.752 54、0.650 59、0.478 89、0.205 25、0.175 93、0.161 27、0.146 61、0.113 97、0.081 32、0.048 68、0.016 03、0.014 19、0.012 34、0.009 25 mg/m^3 .将这 24 种不同浓度的甲醛气体作为待测气体.

表1 20组检测样本的输出

Tab.1 The results of the twenty test samples

(mg/m^3)

	预测值	实际值	相对误差		预测值	实际值	相对误差
1	0.01398	0.00925	0.511351	11	0.78209	0.75254	0.039267
2	0.01808	0.01234	0.465154	12	0.89381	0.84660	0.055764
3	0.02329	0.01419	0.641297	13	1.09052	1.04067	0.047902
4	0.02907	0.01603	0.813475	14	5.95277	5.86255	0.015389
5	0.05809	0.04868	0.193303	15	15.90791	15.98755	0.004981
6	0.07825	0.08132	0.377644	16	25.11905	25.12505	0.000239
7	0.10220	0.14661	0.234704	17	35.60955	35.60455	0.00014
8	0.29502	0.20525	0.437369	18	45.54123	45.23555	0.006949
9	0.46196	0.47889	0.035353	19	55.92505	55.62515	0.005391
10	0.62097	0.65059	0.045528	20	65.69565	66.49575	0.010528
平均相对误差:							0.197086

3.2 模糊-神经网络系统的输出

本文用 C 语言实现了算法程序,并对数据关联问题做了实际验证.根据训练得到的模糊预测模型,发现各样本数据的预测值与实际值都吻合得较好,为了检验建模的效果,抽取了 20 组数据作为检测样本,结果发现预测值与实际值相比,相对误差较小,在传感器阵列响应范围内只有极个别点的相对误差较大.检测样本及其他详细数据见表 1.

4 结 论

用基于混合型 pi-sigma 神经网络的模糊系统和气体传感器阵列对 $0.01 \times 10^{-6} \sim 50 \times 10^{-6}$ 浓度范围内未知浓度的气体进行测报,测报结果平均相对误差小,仅为 0.197 086,说明模糊-神经网络能够取得更好的识别效果.从表 1 中可以看出,测报误差较大的浓度范围是 $0.009 25 \sim 0.205 25 \text{ mg/m}^3$,这可能是由于样品浓度超出气体传感器响应的最小范围,气体传感器阵列中响应的最小范围为 0.20 mg/m^3 .

实验中发现,将甲醛和其他气体混合通入传感器

阵列气室时,经过模糊-神经网络模式识别系统后,电子鼻对其他气体不响应,只能识别甲醛气体.即在干扰气体存在下,甲醛电子鼻测报的正确率达到 100%.

参考文献:

- [1] 周建辉,王磊,姚成虎.模糊神经网络在电子鼻系统定量识别中的应用[J].计算机测量与控制,2005(2):160-161.
- [2] 于梅芳,王士卿.气体传感器阵列[J].传感器技术,2005(2):6-9.
- [3] 辜克兢.模式识别在气体样品分类中的研究[D].厦门大学,2007.
- [4] 赵景波,赵德安,蒋春彬.基于神经网络的电子鼻肺癌早期诊断系统[J].电子技术应用,2006(7):8-10.
- [5] Robert H Bishop. Learning with LabVIEW 7 express [M]. Beijing:Beijing Publishing House of Electronics Industry,2005.
- [6] 王士同.模糊系统、模糊神经网络及应用程序设计[M].上海:上海科学技术文献出版社,1998.
- [7] 张良谊,温丽菁,周峰,等.用于测定空气中甲醛的电子鼻[J].高等学校化学学报,2003(8):1381-1384.

Formaldehyde Electronic Nose Based on the Fuzzy Neural Network

DENG Xiao-yan, HUANG Yuan-qing*

(School of Physics and Mechanical & Electrical Engineering, Xiamen University, Xiamen 361005, China)

Abstract: This paper reports an electronic nose for the determination of formaldehyde based on the fuzzy neural network. By combining a gas sensor array with the fuzzy neural network, the fuzzy neural network model is applied to the quantitative analysis in the formaldehyde electronic nose, which is realized in this paper. The experiment shows a small mean relative error of 0.197 086 in the range of $0.01 \times 10^{-6} \sim 50 \times 10^{-6}$.

Key words: fuzzy neural network; formaldehyde electronic nose; gas sensor array