

基于单传感器动态检测和神经网络的气体识别

注：本项目受国家自然科学基金资助 项目编号：60374049

摘要：介绍了气体传感器动态检测结合神经网络识别空气中有机气体的新方法。这种方法利用单个 SnO₂ 气体传感器在方波温度调制的状态下实现了对多种有机气体的定性分析。在 0.02Hz 的调制频率、250 ~ 300 的温度调制范围内，测得了传感器对不同浓度异丙醇、乙酰丙酮及其混合气体的动态响应值，再通过小波变换对单个周期测试信号进行特征提取，最后将提取的特征值输入神经网络进行网络训练和定性识别，识别的成功率高达 100%。

关键词：动态检测；小波变换；有机气体；神经网络；定性识别

中图分类号：TP212 文献标识码：A 文章编号：1006-883X(2005)01-0015-004

黄家锐 刘锦淮 ◀◀

一、前言

对易挥发有机气体的检测是环境监测乃至人们的日常生活方面中一个非常重要的问题，已引起各国政府和专家的高度重视。有机气体污染的来源包括能源工业、工业生产、交通运输、小规模焚烧和有机溶剂等多种。暴露于有毒的有机气体及重金属污染环境中会导致各种急、慢性中毒及呼吸道疾病，并影响神经、血液、消化及生殖系统^[1]。因此，为保证人们在相对安全的空气环境中生活、学习和工作，对污染气体的检测显得更加重要。

人工神经网络是由一些简单的处理单元组织的大规模平行网络。在实际应用中，80% ~ 90% 的神经网络的模用了反向传播网络（Back Propagation Network，简称 BP 网络）或它的变化形式。在国内外文文献中，传感器动态检测与人工神经网络相结合对气体识别的研究还未见报道。笔者以 SnO₂ 半导体化学传感器为基础，以异丙醇、乙酰丙酮及其混合气体为研究对象，采用动态检测原理进行快速检测，获取了大量的反应信息，再将这些数据信息通过小波变换进行特征提取，并做归一化处理，最后利用神经网络（BP 网络）较理想的实现了多种有机气体的定性识别。结果显示，该方法可大大提高 SnO₂ 气体传感器对有机气体的选择性和稳定性。

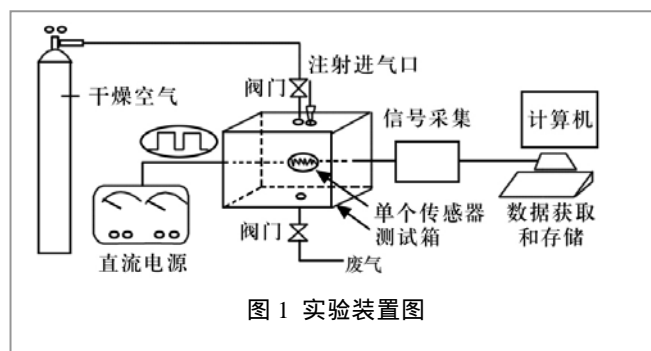


图 1 实验装置图

二、实验部分

1、实验装置

为了获取传感器对待测气体的测试信号，我们设计了图 1 所示的实验装置：

(1) 气体实验箱，内有一个半导体金属氧化物气体传感器。本实验选用了掺杂 SnO₂ 气体传感器 MQ211（云南春光器材厂）；

(2) 数据采集系统, 包括硬件 PCI8335 数据采集卡及采集软件, 可对传感器进行数据采集;

(3) 动态信号发生电路, 用来控制传感器阵列加热电阻的加热周期、占空比、加热电压, 使其满足动态检测的要求;

(4) PC 机, 进行数据预处理及网络训练和识别。

2、动态检测

气体传感器的检测方法分为静态检测和动态检测。本实验采用动态检测的方法, 即对传感器采用一种频率可变、幅度可调、周期性变化的电压加热方式来检测。该方法具有明显提高选择性, 大大减小漂移效应影响、提高稳定性等一系列优点^[2]。

动态检测参数是影响测试效果的重要因素, 合适的参数将使得气敏传感器的敏感膜能够全面反映所测气体的信息。动态检测最主要的三个参数包括: 动态信号周期、占空比、加热电压。在本实验中, 采用 HP 6035A 型直流稳压电源和 HP 3325B 型信号发生器, 输出频率为 0.02Hz、30/(30+20) 的占空比和幅值为 7V 的方波信号以保证传感器的温度调制范围满足 250 ~ 300 , 每次试验运行 80s 后注入有机物标样; 信号采集电路见文献[3], 采集速度 2 点 / s。有机物标样均为分析纯 (由南京化学试剂厂

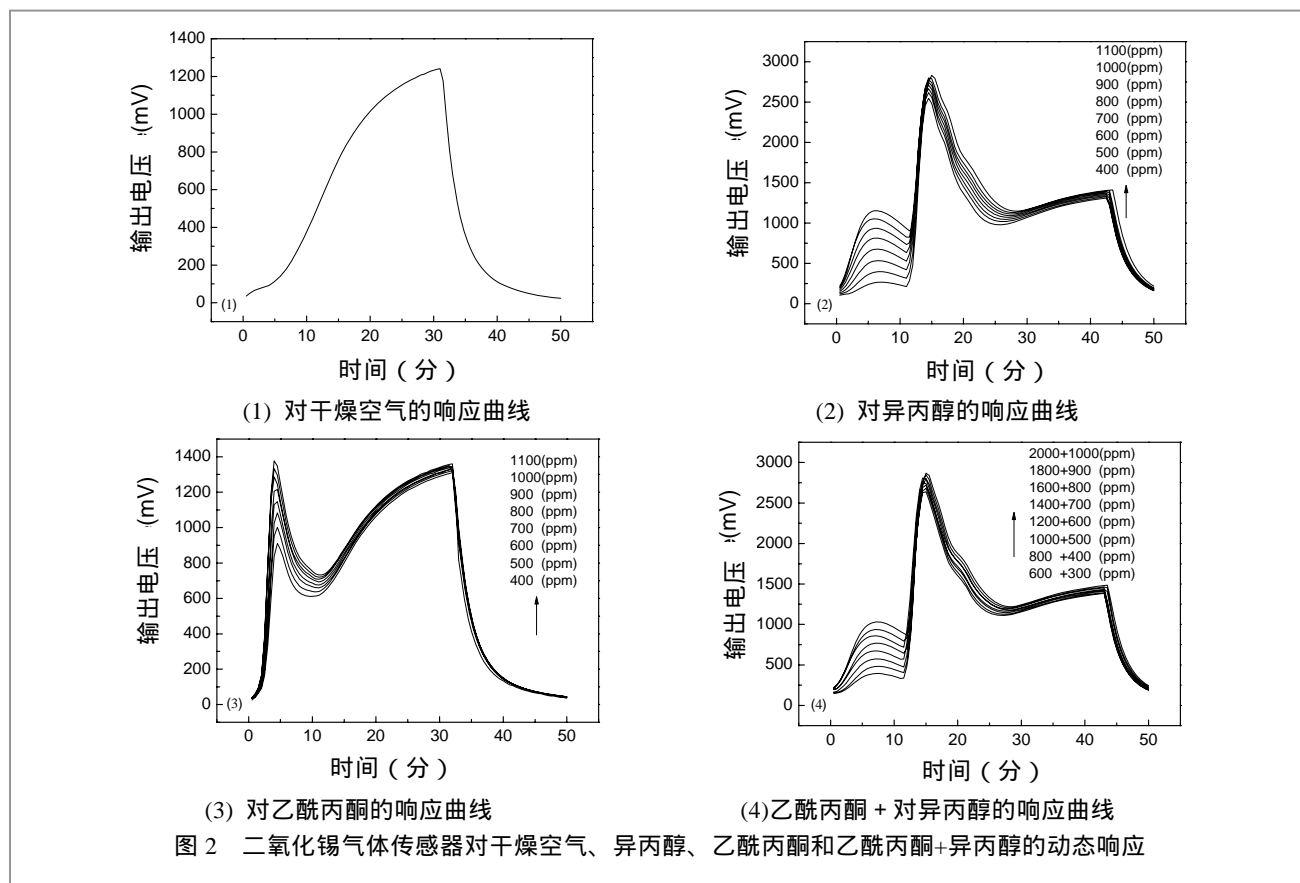
提供)。

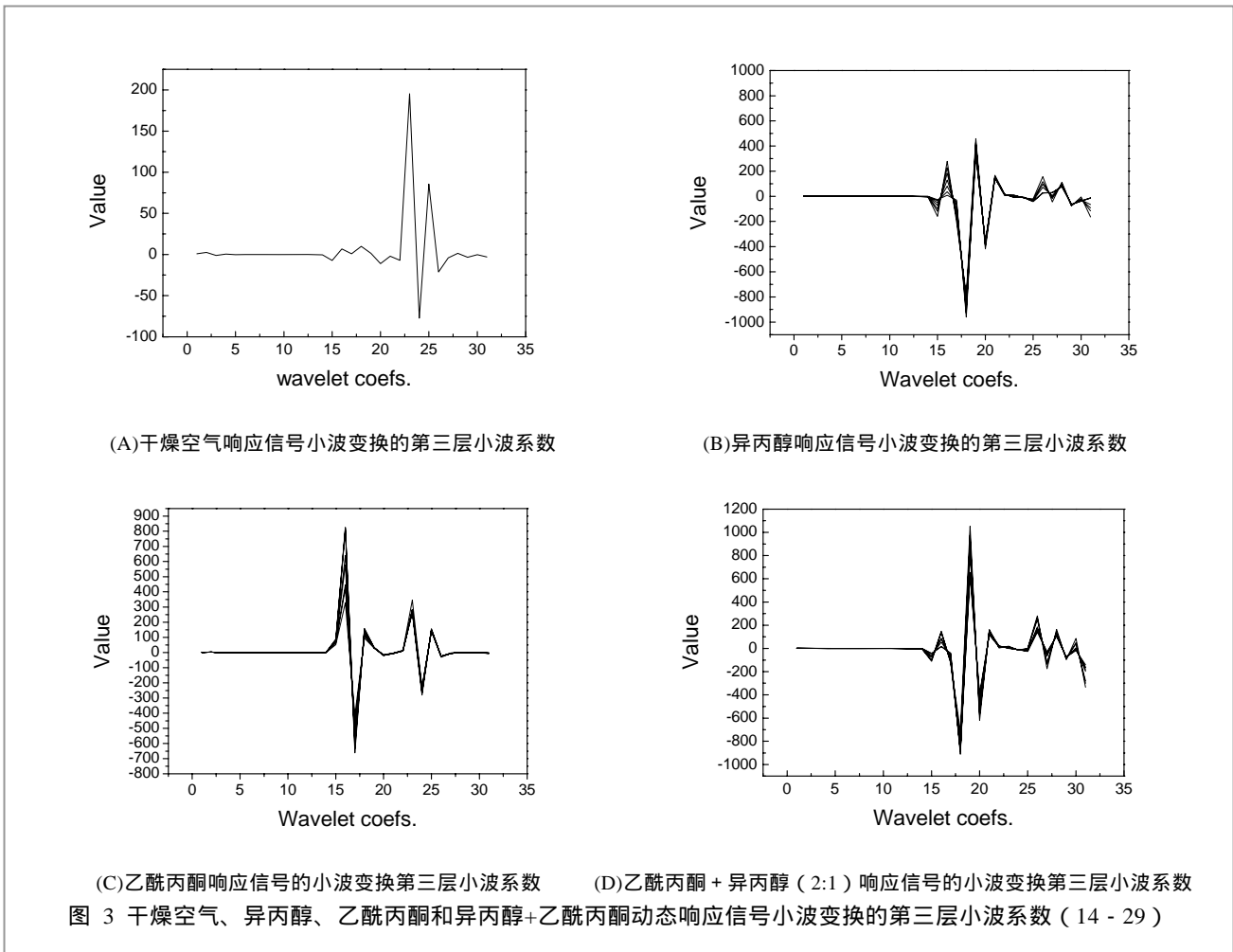
三、结果与讨论

1、动态响应信号

图 2 是 MQ211 气体传感器对干燥空气的动态响应曲线和对不同浓度的异丙醇、乙酰丙酮及其混合气体的动态响应曲线。已有实验证明^[4], 对传感器采用恒定的加热温度 300 , 除观察到测试起始和终止时的传感器的电阻变化, 很少得到起它有关被测气体在传感器表面反应过程的化学信息。

图 2 描述了在 250 ~ 300 内, 温度调制频率为 0.02Hz 下, 不同浓度的异丙醇、乙酰丙酮和其混合气体的动态响应曲线。从图 2 可以看出, 不同种类气体的动态响应曲线明显不同, 可以清楚地被区别; 随着浓度的变化, 同种气体的动态响应曲线也出现规律性的变化, 即响应曲线中特征峰值随着气体的浓度增大而增加。但是, 当待测气体的浓度增大到一定程度时, 特征峰值的增加量相对减小。这都说明动态信号中包含丰富的反应过程的特征化学信息。从空气的响应信号可以得出, 在本文的实验条件下, 传感器对异丙醇和乙酰丙酮比较敏感。





2、特征提取

气体传感器动态响应过程中包含很多特征瞬变，如漂移、趋势和突变等，这些特征变化很可能是非常有用的信息。在信号处理领域中，傅里叶分析是众多频域分析方法中发展最充分、最常用的方法。但是，傅里叶分析的一个严重缺陷在于不能表达时域信息，所以应用很受局限，后来提出的短时傅里叶变换虽然可以表达时域信息，但是相空间中的分辨率是固定的，不够灵活，不能反映出信号瞬时的特点。小波分析可以自动调节尺度进行分解，充分发挥了频域分析和时域分析的各自优点，为信号分析、处理提供了更为灵活的方法^[5]。

在采用小波分析法对一个周期测试信号进行特征提取时，其分析的结果与所选取的小波函数有直接的关系。Daubechies (db4) 小波是小波家族中首个‘光滑’小波，因此，我们采用 db4 小波对一个周期的测试信号（100 采样点）进行小波变换。

图 3 是对测试信号多层分解的第三层小波系数，其描述了四种气体动态响应信号小波变换的第三层小波系数

(14 - 29)。在小波变换过程中，我们发现第三层分解的小波系数随气体种类、含量的不同出现有规律的变换。并且可以看出，不同气体的第三层分解的小波系数存在显著的区别，而同种气体的第三层分解的小波系数存在很大的相似性，随着气体含量的增加，小波系数的幅值也出现有规律的变化。

3、定性分析

定性分析的目的是来区分识别异丙醇、乙酰丙酮和异丙醇+乙酰丙酮气体。将提取后的特征值经过预处理后送入 BP 网络进行训练，得到的网络参数作为以后仿真识别的依据。神经网络的训练通常采用基于梯度下降的 BP 算法，这种常规的 BP 算法具有收敛速度慢和易陷于局部极小等缺点。本实验采用自适应调整步长和带动量因子的改进 BP 算法。在网络的训练过程中，根据误差函数的趋向自动调整训练步长以加快网络的收敛速度，缩短训练时间。

在神经网络中，隐层单元数对神经网络学习训练的能力和网络的性能有很大的影响。隐层单元数太多，会导致

表 1. BP 网络的期望输出

测试气体	空气	异丙醇	乙酰丙酮	乙酰丙酮+异丙醇
网络期望输出	000	001	010	011

表 2. 神经网络对气体的识别结果

测试气体	BP 网络输出			识别结果
空气	0.0005127	0.0582158	0.0488726	000
	0.0008121	0.0355344	0.9994604	001
	0.0014017	0.0038819	0.9996559	001
异丙醇	0.0030148	0.0001925	0.9998277	001
	0.0074666	0.9824104	0.0040456	010
	0.0057880	0.9895302	0.0019554	010
乙酰丙酮	0.0062793	0.9900364	0.0020588	010
	0.0000708	0.9757992	0.9863712	011
	0.0000751	0.9849767	0.9858935	011
乙酰丙酮 + 异丙醇 (2:1)	0.0000890	0.9333872	0.9877282	011

网络学习训练时间过长, 隐层单元数太少, 网络所形成的非线性关系的复杂性有限, 不能保证逼近精度。在网络训练过程中, 通过不断调整隐层单元数以得到最佳的网络性能。对本实验数据, 隐层单元数选取 5 为最佳值。

在选用 db4 对动态响应信号进行小波变换后, 选取第三层分解的小波系数 (14 - 29), 进行局部归一化处理 (除以同一行中值最大的正数) 来消除提取信息中的浓度因素, 并组成一维向量输入神经网络。BP 网络结构采用 16-5-3 型。输入神经元 16 个。隐含层内有 5 个神经元, 激活函数使用 S 型激活函数; 输出层内有 3 个神经元, 由期望输出的个数决定, 对应的激活函数为线性型激活函数。

(1) 网络训练

表 1 为各种气体对应的网络期望输出。将预处理后的 4 组数据与表中期望输出一同输入 BP 网络中进行训练学习。训练结束后, 将训练后的网络权值和阈值固定, 以备仿真识别调用。

在本 BP 网络训练中, 最大训练次数置为 10000 次, 网络训练误差精度置为 1×10^{-6} 。对于本实验的训练数据, 经过 10000 次的迭代训练后, 误差可收敛到 1×10^{-3} 。

(2) 模拟仿真

经过上述 BP 神经网络的期望输出训练后, 我们用得到的网络权值和阈值进行仿真。对于仿真输出我们还规定, 若输出层中神经元的输出 y_1 、 y_2 、 y_3 满足 $y_1 > 0.5$ 则取其值为 1, 否则取其值为 0。基于以上规则, 我们对不同气体不同浓度的测试数据进行处理后, 输入网络进行模拟仿真, 其仿真结果见表 2。

由表 2 可以看出, 网络对 4 组气体状态的仿真结果与实际气体的期望输出完全吻合。该实验结果表明用单个气体传感器动态检测, 通过小波变换与 BP 神经网络相结合的方法可以很好地识别气体的种类, 识别的成功率高达 100%。

四、结论

本文将气体传感器动态检测与人工神经网络相结合, 对两种气体及其混合气体进行定性识别。借助传感器动态检测及小波变换, 我们可以获取更多关于气体与传感器表面相互作用的特征信息。多次实验采集到的气体样本数据进行小波变换和归一化处理后即可用于网络训练和仿真识别。实验结果表明, 该方法对两种气体及其混合气体的正确识别率达到 100%。初步研究还表明, 该方法对于气体定量分析也具有潜在的应用价值。

参考文献

- [1] <http://www.bj3mbc.com/safe/safesystem2.htm>. [DB/OL]
- [2] Ortega A, Marco S, Perera A, Sundi Tc, Pardo A, Samitier J. An intelligent detector based on temperature modulation of a gas sensor with a digital signal processor[J]. Sensor and Actuators B, 2001, 78: 32 - 39.
- [3] 黄行九. SnO₂ 气体传感器动态测试原理及其与 SPME 联用技术研究 [D]. 中国科学院智能机械研究所: 刘锦淮, 2004. 33 - 34.
- [4] HUANG Xing-jiu, MENG Fan-li, PI Zong-xin. Gas sensing behavior of a single tin dioxide sensor under dynamic temperature modulation[J]. Sensors and Actuators B, 2004, 99(2-3): 444 - 450.
- [5] 董长虹, 高志, 余啸海. 小波分析工具箱原理与应用 [M]. 北京: 国防工业出版社, 2004. 208 - 209.

Qualitative Recognition Of Gases In Air Using Temperature-Modulated SnO₂ Gas Sensor And Neural Network

Abstract: A new dynamic measuring method for the rapid identification and determination of volatile organic compounds in ambient air is described. For the qualitative

recognition of the volatile organic compounds, one SnO₂-based gas sensor operating in a rectangular temperature-modulation mode is required. The working temperature of the sensor is modulated between 250 and 300 and its dynamic respond to different concentrations of propane-2-ol, acetyl acetone, and propane-2-ol+acetyl acetone mixtures. The discrete wavelet transform (DWT) is used to extract important features from the sensor response. These features are then input to (neural) pattern recognition method. The success rate of species identification can reach 100%.

Keywords: dynamic detection; wavelet transform; volatile organic compounds; neural network; qualitative recognition

作者简介：

黄家锐，现在中国科学技术大学化学系攻读博士学位，主要从事敏感材料和检测技术的研究。

通讯地址：安徽省合肥市 1130 # 邮编：230031

联系电话：0551 - 5591132

Email：jiauihuang@hotmail.com

刘锦淮，中国科学院合肥智能机械研究所研究员，博士生导师，长期从事气敏材料研究。

联系电话：0551-5591142 Email：jhliu@iim.ac.cn

本文编辑：朱新宇 读者服务卡编号 003