

基于 SAW 传感器阵列的混合气体定性分析

方天恩, 漆晶, 张朝阳, 苏开荣, 杨靖

(重庆邮电大学 移动通信技术重点实验室, 重庆 400065)

摘要:针对野外文物古迹环境的多变性、传感器气敏性失效以及腐蚀性气体定性不精确等实际情况,结合物联网技术和模式识别技术,在综合考虑准确度和项目实际要求的情况下,设计了一种基于声表面波(SAW)传感器阵列的模式识别算法,并通过 MATLAB 对其进行仿真和验证。结果证明,将传感器阵列输出的数据输入到有6个隐层的神经元的单隐层 BP 神经网络中进行训练,预测效果最好,对腐蚀性气体的识别率达到了95%左右,提高了野外微气象环境下腐蚀性气体的监测水平。

关键词:声表面波(SAW)传感器;模式识别;定性分析;MATLAB

中图分类号:TN65;TP212.9 **文献标识码:**A

Quantitative Analysis of Mixed Gas Based on SAW Sensor Array

FANG Tian'en, QI Jin, ZHANG Chaoyang, SU Kairong, YANG Jing

(Mobile Communication Technology Key Lab., Chongqing University of Posts and Telecommunications, Chongqing 400065, China)

Abstract: Aiming at the physical truth of the variety condition of the cultural relics, gas sensor failure and qualitative imprecision of the corrosive gases, based on the Internet of Things technology and pattern recognition technology, in the case of considering the accuracy and the actual requirements of the project, a pattern recognition algorithm based on SAW sensor array is designed in this paper. Meanwhile, the simulation and verification are carried out based on MATLAB. It is shown that the best prediction results are obtained when the sensor array output is used as the actual input of the neural network, then the training and testing of this single layer BP neural network with six neurons in hidden layer are performed. The recognition rate of the corrosive gas is up to about 95%, which improves the monitoring level of corrosive gas in the field micro meteorological environment.

Key words: SAW sensor; pattern recognition; quantitative analysis; MATLAB

0 引言

对于混合气体的定性分析一直是环境检测中的一个重要环节,但在气敏性的研究过程中,实验测得在单一传感器系统中,由于腐蚀性气体分子含量较小,气体分子间易产生相互干扰,且无论其敏感膜的选择性能有多高,其他气体总会或多或少地对目标气体的响应产生一定的影响,而该干扰是无法消除的。基于气体传感器阵列与模式识别技术的电子鼻系统是解决气体传感器交叉敏感特性的重要途径,它不仅可以辨识简单气体的成分和浓度,而且在复杂的环境中可以高精度地完成复杂气体或气味中各成分的定性、定量检测^[1]。

本文依托于文物保护装备产业化及应用示范项目(四)多功能文物保护移动实验平台项目的需求,在多功能文物保护移动平台上设计开发了文物环境参数采集分析系统。为了满足对野外文物古迹保护、考古挖掘的环境监测要求,创新性地设计了基于声表面波(SAW)传感器阵列的模式识别算法,达到了实时精确地采集监测现场环境参数的要求。

1 基于 SAW 传感器阵列的模式识别算法

1.1 BP 神经网络模型构建

BP神经网络的结构由网络层数,各层节点数和训练方法组成^[2]。本文采用的设计方案,是在充分了解多功能文物保护移动实验平台项目需求与前人

收稿日期:2016-08-04

基金项目:重庆市教育委员会基金资助项目(KJ1500433);重庆邮电大学自然科学基金资助项目(A2012-97);2014年重邮文峰创新创业基金资助项目

作者简介:方天恩(1991-),男,河南省漯河人,硕士生,主要从事物联网技术和蓝牙通信的研究。通信作者:苏开荣(1963-),男,陕西礼泉人,副教授,主要从事现代远程教育技术,软交换与 Ad hoc 等方面的研究。

经验的结合下制定的。

1.1.1 层数的选择

BP神经网络层数的选择主要是针对隐层的选择,隐层的个数决定了BP神经网络的训练精度和时间。根据前人总结的分析证明,在隐层节点数无限制的条件下,单隐层的3层BP神经网络可满足任意非线性映射。在综合考虑系统需求和训练时间的基础上,本文选择采用单隐层的BP神经网络。

1.1.2 输入、输出层

通过对SAW气敏传感器工作原理的分析,当腐蚀性气体通过SAW表面的敏感材料时,敏感材料将选择性吸附目标气体分子,从而影响敏感材料单位面积的质量。单位面积质量的改变使器件的基础频率发生频移^[3]。通过检测频移(Δf)信号可实现对相应气体的检测功能。

文物环境参数采集分析系统采用的SAW传感器阵列包含6个传感器独立元件:1~3号的敏感膜材质为氧化锌(ZnO)、聚苯胺(PAn)、硫化镉(CdS);4~6号的敏感膜材质为聚硅氧烷(SXPH)、聚表氯醇(PECH)、聚乙烯四葵醛(PVTD)的3类聚合物。通过实验对比可知,6种敏感膜对文物腐蚀气体CO₂、O₃、NO₂、NO和SO₂具有很好的敏感特性。以ZnO敏感膜为例,其对CO₂、O₃、NO₂、NO和SO₂等腐蚀性混和气体的响应曲线如图1所示。本系统将镀有这6种敏感材料的SAW传感器构成的传感器阵列安装在文物保护移动平台上测试采集。利用传感器阵列可以实现对野外环境参数更精确的采集,以及避免单一传感器系统的不稳定性和不可靠性。

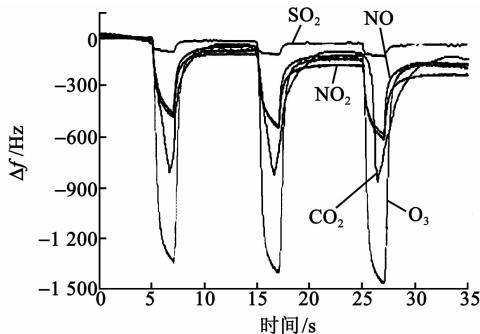


图1 ZnO敏感膜对腐蚀性混和气体的典型响应曲线

1.1.3 隐层节点数

单隐层BP网络可以满足任意非线性映射,但对于有限个输入模式到输出模式的映射,并不需要无限个隐层节点。目前没有具体的理论来证明其选择的标准,隐层节点数由经验公式和试验证明结合

来确定。隐层节点数太少,容错性差,而太多则会导致学习时间过长;隐层节点选取本系统根据经验公式确定:

$$n_i = (0.43mm + 2.54m + 0.77n + 0.35 + 0.51 + 0.12n^2)^{\frac{1}{2}} \quad (1)$$

式中: n 为输入层节点数; m 为输出层节点数; n_i 为隐含层节点数,若 n_i 不为整数,利用四舍五入规则进行处理^[4]。

1.1.4 训练方法

针对BP算法采用的梯度下降法,可能在局部内搜索到一个极大值或者极小值,从而陷入恶性循环中,使得网络学习发生振荡。基于上述不足,本文利用可变学习率BP算法训练前向网络,其训练函数traingdx是将自适应修改学习率的算法和动量批梯度下降算法有机地结合起来^[5],故而网络的训练速度很快。其参数的具体设置如表1所示。

表1 训练方法相关参数设置表

序号	参数名称	主要作用	设置值
1	net.performFcn	表现函数	sse
2	net.trainParam, epochs	最大迭代次数	2 000
3	net.trainParam, show	间隔次数	100
4	net.trainParam, goal	训练目标误差	0.001
5	net.trainParam, mc	动量常数	0.95

1.1.5 学习算法细化

对于本系统而言,学习算法需要进一步的细化,将算法基本原理分为3个步骤。算法的细化流程图如图2所示。

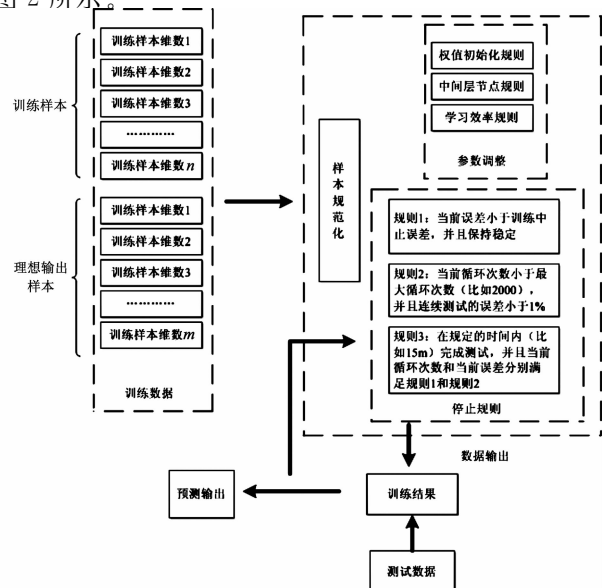


图2 BP神经网络算法细化流程图

1.2 模式识别实验及结果分析

根据 1.1 节对模式识别的分析,选择 BP 神经网络对 SAW 传感器阵列进行模式识别实验,仿真平台为 MATLAB 神经网络工具箱,实验过程及结果具体分析如下:

本文主要对比测试了 5 种文物腐蚀性气体,利用 Δf 作为模式识别的主要依据,测试气体为 CO_2 、 O_3 、 NO_2 、 NO 和 SO_2 。因测试样本数量较多,仅列

举部分数据,每组气体选择 4 种浓度类型。利用下式进行归一化处理数据^[6]:

$$x_i = X_i / \sqrt{\sum_{i=1}^j X_i^2} \quad (2)$$

式中: x_i 为归一化后某时刻的响应值; X_i 为某时刻的实际响应值。

实验原始数据与利用阵列归一化算法处理后的数据如表 2 所示。

表 2 5 种文物腐蚀性气体部分实验数据

气体名	浓度/ 10^{-9}	实际响应($-\Delta f/\text{Hz}$)/归一化响应					
		ZnO	PAn	CdS	ZnO	PAn	CdS
CO_2	0.440	304/0.245 8	654/0.528 7	1 005/0.812 5	1 562/0.914 5	1 865/0.930 1	1 354/0.894 5
	0.480	325/0.239 1	689/0.506 8	1 126/0.828 2	1 835/0.923 2	1 985/0.931 2	1 685/0.914 5
	0.500	456/0.304 0	701/0.467 4	1 245/0.803 1	1 956/0.922 4	2 068/0.933 3	1 982/0.924 5
	0.520	475/0.296 1	745/0.464 4	1 339/0.834 7	2 045/0.926 5	2 265/0.945 1	2 354/0.948 7
NO_2	1.4	90/0.0542	624/0.375 8	1 536/0.925 1	1 751/0.947 4	1 952/0.946 5	2 152/0.988 8
	3.1	101/0.058 2	689/0.397 1	1 589/0.915 9	1 862/0.938 7	2 065/0.946 7	2 458/1.124 5
	4.0	105/0.058 3	714/0.396 7	1 649/0.916 1	2 005/0.948 2	2 654/0.967 5	2 788/1.013 5
	7.5	116/0.061 4	789/0.417 8	1 712/0.906 5	2 198/0.956 4	2 699/0.987 4	2 945/1.144 4
NO	1.0	92/0.055 1	635/0.380 2	1 542/0.923 3	1 651/0.945 1	2 014/0.991 2	2 465/1.254 4
	2.2	100/0.056 8	702/0.398 6	1 612/0.915 4	1 978/0.956 2	2 451/0.996 1	2 741/1.335 4
	5.0	119/0.064 2	754/0.406 8	1 689/0.911 3	2 245/0.997 41	2 341/1.045 6	2 911/1.374 5
	7.5	129/0.067 9	796/0.418 8	1 721/0.905 5	2 465/0.946 1	2 645/1.134 4	3 024/1.548 7
O_3	10	824/0.114 3	2 012/0.279 1	6 874/0.953 4	2 444/1.651 4	2 799/1.651 4	3 004/1.700 2
	20	892/0.119 5	2 356/0.315 7	7 025/0.941 3	2 678/1.523 4	2 954/1.685 4	3 204/1.795 4
	30	912/0.113 3	2 894/0.359 7	7 452/0.926 2	2 458/1.568 4	3 124/1.698 4	3 466/1.765 4
	40	968/0.112 5	3 014/0.350 1	8 005/0.929 9	2 897/1.548 2	3 277/1.748 5	3 814/1.800 1
SO_2	1.6	56/0.132 7	204/0.483 5	565/1.339 2	895/0.354 8	1 054/0.395 4	1 395/0.410 2
	3.3	74/0.114 1	265/0.408 8	587/0.905 4	978/0.361 5	1 144/0.399 5	1 487/0.415 8
	5.4	89/0.116 3	301/0.393 3	698/0.912 0	1 024/0.371 8	1 658/0.409 8	1 458/0.429 5
	7.5	101/0.126 8	356/0.447 1	705/0.885 4	1 154/0.379 8	1 458/0.405 7	1 678/0.435 5

根据前面的描述和项目实际需求确定 BP 神经网络的输入、输出参数模型,其中文物保护移动平台上传感器阵列由 6 个 SAW 传感器组成,故输入层应为 6 个神经元,采用单隐层网络结构。输出层为了区分 5 种文物腐蚀性气体,目标向量含有 5 个元素^[7],利用向量 $[1 0 0 0 0]$, $[0 1 0 0 0]$, $[0 0 1 0 0]$, $[0 0 0 1 0]$, $[0 0 0 0 1]$,分别表示 CO_2 、 O_3 、 NO_2 、 NO 和 SO_2 5 种腐蚀性气体。根据式(1)确定中间层节点数为 6,通过训练函数参数设置,设置精度控制为 0.001,将最大循环次数设置为 2 000。每种气体选取 20 种浓度值,按从小到大的顺序排列,一共 100 组数据,其中每种气体的奇数组浓度值数据作为训练样本。将训练样本数据输入 BP 神经网络,在 1 835 个训练单位以后,训练目标达到后停止。

训练过程误差如图 3 所示。

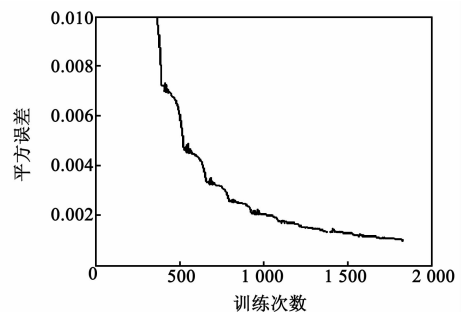


图 3 训练过程

将测试数据输入确定好的 BP 神经网络后,根据相关分类理论,若网络输出数值大于 0.7,则标识为 1;若网络输出数值小于 0.3,则标识为 0;介于两者之间为错误值,部分输出数据和识别结果如表 3 所示。

表3 腐蚀性气体定性测试

测试气体	网络输出					实际输出	期望输出
CO ₂	0.965 1	-0.000 4	-0.001 2	0.000 1	0.000 4	[1 0 0 0 0]	[1 0 0 0 0]
	0.914 2	-0.001 3	0.000 5	0.003 9	0.000 5	[1 0 0 0 0]	[1 0 0 0 0]
	0.956 2	0.000 1	-0.001 2	0.001 2	-0.0030	[1 0 0 0 0]	[1 0 0 0 0]
	0.917 8	0.000 4	-0.001 4	-0.003 3	0.001 4	[1 0 0 0 0]	[1 0 0 0 0]
O ₃	0.000 1	0.946 1	0.002 2	0.001 1	0	[0 1 0 0 0]	[0 1 0 0 0]
	0.001 5	0.932 1	0.000 5	0.012 3	0.000 5	[0 1 0 0 0]	[0 1 0 0 0]
	0.016 2	0.846 1	-0.001 1	-0.001 3	0.002 5	[0 1 0 0 0]	[0 1 0 0 0]
	0.000 8	0.948 7	0.001 4	0.003 3	0.001 4	[0 1 0 0 0]	[0 1 0 0 0]
NO ₂	0.005 1	0.002 4	0.842 1	0.000 1	0.000 4	[0 0 1 0 0]	[0 0 1 0 0]
	0.000 2	0.001 5	0.804 5	-0.003 9	-0.002 5	[1 0 1 0 0]	Error
	-0.001 2	-0.001 1	0.942 1	-0.003 1	0	[0 0 1 0 0]	[0 0 1 0 0]
	0.000 8	-0.000 4	0.922 2	0.000 3	0.001 4	[0 0 1 0 0]	[0 0 1 0 0]
NO	0.000 1	0.002 4	0.003 4	0.875 4	0.001 6	[0 0 0 1 0]	[0 0 0 1 0]
	-0.000 2	0.001 7	-0.000 5	0.903 9	0.002 5	[0 0 0 1 0]	[0 0 0 1 0]
	0.004 2	0	0.001 6	0.891 2	0.002 1	[0 1 0 1 0]	Error
	0.001 8	-0.000 5	0	0.975 3	-0.001 4	[0 0 0 1 0]	[0 0 0 1 0]
SO ₂	0.001 9	-0.000 4	0.002 2	0.000 1	0.900 4	[0 0 0 0 1]	[0 0 0 0 1]
	0.010 2	0.011 3	-0.000 5	-0.000 9	0.880 5	[0 0 0 0 1]	[0 0 0 0 1]
	0	0.000 1	-0.001 2	0.001 2	0.903 0	[0 0 0 0 1]	[0 0 0 0 1]
	0.000 8	0.000 4	0.010 4	0.002 2	0.901 4	[0 0 0 0 1]	[0 0 0 0 1]

2 仿真结果分析

通过对5种腐蚀性气体的实验测试,每种气体测试数据为实验数据分组的偶数组。每种气体测试数据有10组,共进行了50组数据的测试,根据测试结果可得准确率为 $47/50=94\%$,基本能实现腐蚀性气体的分类识别功能,但仍存在误差。其中,CO₂因在空气中的含量较大,利用SAW传感器阵列的识别准确率为100%;而发生错误的分组,主要集中在CO₂、NO₂、NO和SO₂这4种微量的腐蚀性气体,因为它们在空中含量微小,特别是NO₂和NO在同种浓度下,相似度很小,造成了4类微量气体的识别准确率有所下降,但总体上完全能满足文物环境参数采集分析系统对基于SAW传感器阵列的腐蚀性气体的模式识别要求。

3 结束语

用SAW传感器阵列对大气二氧化碳浓度、臭氧浓度、一氧化物浓度、二氧化物浓度和二氧化硫浓度等参数进行检测,能够得到良好的检测效果。本文通过利用BP神经网络来对SAW传感器阵列数据进行模式识别,对测试样本的识别率达到94%,为文物环境参数采集分析系统传感器硬件部分的准确识别和精确标定提供了理论支持,为文物腐蚀预警提供了准确的数据支持。实际环境中,大部分腐

蚀性气体均能被传感器阵列结合模式识别神经网络排除,该传感器阵列结合BP网络具有较高的定性识别能力和抗干扰能力。

参考文献:

- [1] 太惠玲, 谢光忠, 蒋亚东. 基于气体传感器阵列的混合气体定量分析[J]. 仪器仪表学报, 2006, 27(7): 666-670.
- [2] 张翠翠. 基于BP神经网络的火灾救援资源分配方案研究[D]. 青岛: 山东科技大学, 2012.
- [3] 王露, 王登攀, 杜波, 等. 一种新型SAW气体传感器的设计[J]. 压电与声光, 2015, 37(1):20-23.
WANG Lu, WANG Dengpan, DU Bo, et al. Design of a novel SAW gas sensor [J]. Piezoelectrics & Acousto-optics, 2015, 37(1):20-23.
- [4] CHERKASSKY V, MA Y. Practical selection of SVM parameters and noise estimation for SVM regression[J]. Neural Networks, 2004, 17(1): 113-126.
- [5] 赵文俊, 黄家成, 孙艳玉, 等. 基于多级BP神经网络的无线电罗盘多故障诊断研究[J]. 计算机测量与控制, 2015, 23(6):1871-1874.
- [6] 马常霞. 基于传感器阵列与前馈神经网络的气体辨识系统[J]. 测控技术, 2001, 20(3):18-19.
- [7] 孙吉贵, 刘杰, 赵连宇. 聚类算法研究[J]. 软件学报, 2008, 19(1): 48-61.