

doi:10.11835/j.issn.1000-582X.2013.10.014

彩色可视传感阵列基元匹配快速定量算法

罗小刚^a, 刘静静^a, 侯长军^a, 霍丹群^b, 法焕宝^c, 杨 眉^b

(重庆大学 a. 生物工程学院 生物流变科学与技术教育部重点实验室; b. 生物工程学院; c. 化工学院, 重庆 400044)

摘 要:在彩色可视传感阵列传统处理方法中,存在着数据量大,人工分析困难、种类浓度识别难以同一次实现等问题,针对这些问题,考虑到同类气体饱和响应阵列点位置一致性的特点,提出一种彩色可视阵列基元匹配快速定量识别算法。该算法首先采用设置经验阈值消除冗余量,进行去噪和特征提取,减少人工分析量;然后进行基于二值化基元图模板匹配的定量分析种类识别,减少计算量,增加气体识别效率和精度;最后,综合模糊逻辑和神经网络 2 种人工智能方法的优点,建立彩色传感阵列气体浓度识别的自适应模糊推理系统。算法优势在于将不同气体的种类和浓度检测分开进行,解决了种类、浓度同时识别时可能出现特征数据交叉感染导致错误识别的问题。基元模板匹配分析结果显示,氨气、氯气和二氧化硫 3 种气体分类识别结果准确率达 100%,利用模糊神经网络方法对氨气浓度识别率准确度较高,误差在 5% 以内。

关键词:彩色可视传感阵列;模式识别;模板匹配;模糊神经网络

中图分类号:TP391.4

文献标志码:A

文章编号:1000-582X(2013)10-089-05

A fast quantitative identification algorithm of colorimetric visual-sensor-array based on basic units matching

LUO Xiaogang^a, LIU Jingjing^a, HOU Changjun^a, HUO Danqun^b, FA Huanbao^c, YANG Mei^b

(a. Key Laboratory of Biological Evolution Science and Technology, Ministry of Education;

b. Bioengineering College; c. College of Chemistry and Chemical Engineering,

Chongqing University, Chongqing 400044, China)

Abstract: There are many difficulties to process a colorimetric visual-sensor-array by traditional processing methods, such as complicated manual analysis due to many data and hard to finish varieties and concentrations identification simultaneously, etc. In view of colorimetric-sensor-array's same location response to the same gas, a fast quantitative identification algorithm of colorimetric visual-sensor-array based on basic units matching which can solve these problems is proposed. First, denoising and feature extraction are processed by setting experienced threshold to reduce redundancies and lessen manual analysis. Second, a creative qualitative analysis method based on basic units is put forward, which not only reduces computation, but also increases efficiency and precision. Finally, a ANFIS of NH₃ concentration recognition utilizing advantages of fuzzy logic and neural network is used to distinguish low concentration NH₃. The advantage of this algorithm is that varieties and concentrations of different gases could be detected successively, solving the problem of recognition errors caused by characteristic data infection when

收稿日期:2013-05-08

基金项目:国家自然科学基金资助项目(30600157);中央高校基本科研业务费资助项目(CDJXS10231117);教育部高校博士点基金资助项目(20090191110030);重庆市自然科学基金(CSTC,2009BB5219,2008AC7037);重庆大学大型仪器设备开放基金

作者简介:罗小刚(1974-),男,重庆大学副教授,主要从事生物医学工程研究,(E-mail)luosteel@163.com。

varieties and concentrations of different gases are detected simultaneously. The results of template matching based on basic units show that the classification accuracy of NH_3 , Cl_2 and SO_2 are 100%. The low concentration NH_3 classification accuracy is also very high after species identification with measurement errors below 5%.

Key words: colorimetric visual-sensor-array; pattern recognition; template matching; fuzzy neural network

2000 年美国伊利诺伊大学厄本那-香槟分校的 Kenneth S Suslick 教授等在《自然》杂志上发表论文,提出利用传感气敏材料(如卟啉类化合物及其衍生物、疏水性指示剂等)与待检测气体反应前后的光谱变化对挥发气体进行定性定量分析的可视化设想^[1]。在随后 10 余年的研究中,彩色可视传感阵列的可检测物已从单一的胺类、醛类化合物向糖类、咖啡等混合物转变,并且根据待测物的物理特性不同,制作了适用于气相、液相检测的各种可视传感阵列^[2-5]。彩色可视传感阵列对待测气体的处理主要包括感知、信号处理和识别 3 个部分,如图 1 所示。其中模式识别是整个处理过程的关键。目前已有的彩色可视传感阵列识别中,存在着同一次识别仅针对待测物的种类^[3-4]或者浓度^[6-7]进行检测的问题,即使提及同时进行定性和定量识别,也大多采用相同的模式识别方法^[8]。文中采用先种类分析再浓度识别的方法对未知类型气体进行检测。

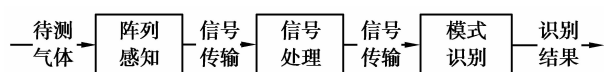


图 1 彩色可视传感阵列识别过程框图

1 原理和理论基础

彩色可视传感阵列中每一个气体敏感单元都是一个传感器,通过 CCD 采集敏感单元对目标气体特异性响应的综合光谱信息变化进行气体识别。图 2 为彩色可视传感阵列数据采集示意图,与待测气体发生反应后,不同敏感单元表面都可能发生不同的颜色变化,这些不同位置的敏感单元和不同颜色的变化组合能够唯一的表征待测气体的特征信息,从而达到对待测气体的特异性识别的目的。

文中将彩色可视传感阵列模式识别分为数据预处理、种类识别、浓度识别 3 个部分,如图 3 所示。预处理主要是解决采样彩色可视传感阵列光谱信号过程中,存在的噪声、随机因素干扰等问题,包括去噪、噪声提取、数据剔除 3 个步骤。种类识别包括基元提取与模板匹配,其中基元提取是气体种类识别

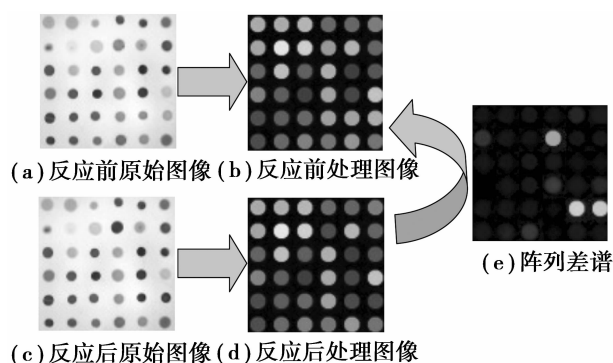


图 2 彩色可视传感阵列数据采集示意图

中的重要步骤,与传统的气体识别方法不同的是,该方法不需对阵列特征信息进行复杂的运算,只需要计算不同气体基元并对基元图进行模板匹配,该步骤不仅进一步筛除了包含错误散点的阵列,提高了样本数据的质量,而且为同时进行浓度种类识别提供了新思路。在已知气体种类的前提下进行浓度识别,建立了彩色传感阵列氨气浓度识别的自适应模糊推理系统,采用模糊神经网络实现浓度识别过程。

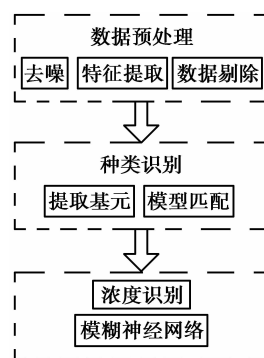


图 3 彩色可视传感阵列模式识别框图

2 数据预处理

彩色传感阵列中敏感阵列点维数较多且需要连续监测众多反应时间序列点,涉及到的数据总量是相当大的。 $L=3 \times n \times m$ 表示 1 个彩色阵列芯片的总特征信息量。其中, m 表示连续监测的时间序列点, n 表示敏感阵列点的个数, 3 表示每个阵列的

RGB 特征分量。

阵列中 R 特征信息分量差值可以表示为 $\Delta R_{(i,j)}$, 其中 Δ 代表某一颜色分量的差值, t 表示时间点, (i,j) 表示在阵列的位置信息, $(0 \leq i < M, 0 \leq j < N, M, N$ 为基元阵列的行列值)。实验中用到的彩色可视传感阵列包含 $6 \times 6 = 36$ 个敏感阵列点。

图 4(a) 为 3 个时间序列点下的 108 个 RGB 差值。可以看出, 绝大部分的 RGB 差值均在 5 以内, 这些波动差异较小的点就是前面提到过的“噪声”, 它们对进一步特征提取的有效贡献率是微乎其微的。对传感器阵列设定可调差值阈值 T 去除这些“噪声”, 如式(1)所示, 如果每个阵列点的 GRB 差值之和小于等于 T , 则该点的颜色变化差值设定为 0, 否则, 差值保持不变。图 4(b) 为设定 $T=10$ 时, 去掉冗余阵列数据的 RGB 差值序列图, 消噪之后得到了某一时刻反应明显的 2 类特征分量信息: 特征分量差值及其对应位置信息, 即特征提取, 这也是气体种类识别中基元提取的前提。

$$\left. \begin{aligned} \Delta B, \Delta G, \Delta R \text{ 不变}, \quad \Delta B + \Delta G + \Delta R > T \\ \Delta B = 0, \Delta G = 0, \Delta R = 0, \quad \Delta B + \Delta G + \Delta R \leq T \end{aligned} \right\}, \quad (1)$$

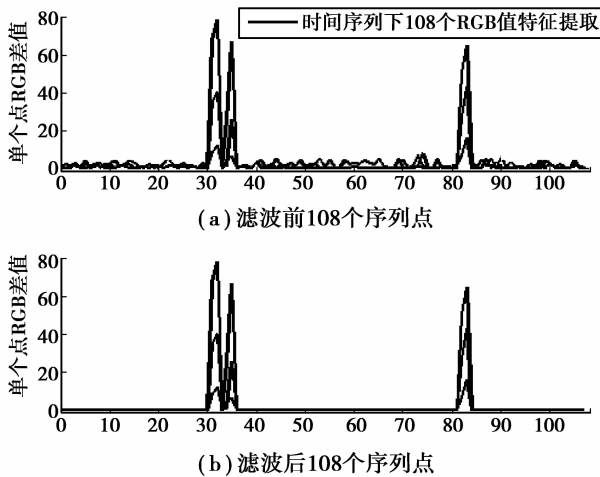


图 4 时间序列下 108 个 RGB 值特征提取

3 目标物气体种类识别

以往的研究者对待测物的种类分析多采用经典传统的模式识别方法进行针对性的识别, 如主成份分析(PCA)^[9]、线性判别分析(LDA)^[10]、反向人工神经网络(BP ANN)^[11]等, 常常忽略了一个重要的问题: 同一原始可视传感阵列与相同的气体响应达到稳态时, 其特征响应点位置是固定的, 发生变化的仅仅是特征响应点的颜色指纹信息。以氨气、氯气

和二氧化硫 3 种气体为例, 对其反应饱和后的 RGB 差值图谱进行基元转化, 分别得到对应的基元图如图 5 所示, 可以看出, 尽管气体浓度有差异, 即阵列点 RGB 响应差谱不同, 但传感阵列对同种气体的特征响应点位置是固定的, 响应基元图是相同的, 而不同气体之间基元图差异非常明显。因此可以通过将响应点的位置转化成基元图进行模板匹配实现气体种类识别。

基元图是与彩色可视传感阵列行列数相同、用“0”或“1”表示的矩阵, 转化过程如式(2)所示, 基元值用 $F_{i,j}$ 表示。当阵列响应点 RGB 差值全为 0 时, $F_{i,j}$ 设为“0”; 否则, 为“1”。

$$F_{i,j} = \begin{cases} 1, & \Delta B \geq 0, \Delta G \geq 0, \Delta R \geq 0 \\ 0, & \Delta B = 0, \Delta G = 0, \Delta R = 0 \end{cases}, \quad (2)$$

定义待测试基元图与标准基元图模板匹配相关系数如下:

$$\rho = \frac{n}{M \times N}, \quad (3)$$

其中: M, N 为基元阵列的行列值, n 为待测基元图与标准基元图匹配时位置、数值完全相同的基元的个数。 $\rho < 1$ 时, 表明待测基元图与标准基元图不能完全匹配, 待测气体与标准基元图所代表的气体不是同一种气体, 重新检查样本; 当且仅当 $\rho = 1$ 时, 判定待测基元图与标准基元图完全匹配, 待测气体与标准基元图所代表的气体为同一种气体。气体种类识别模板匹配过程如图 6 所示。

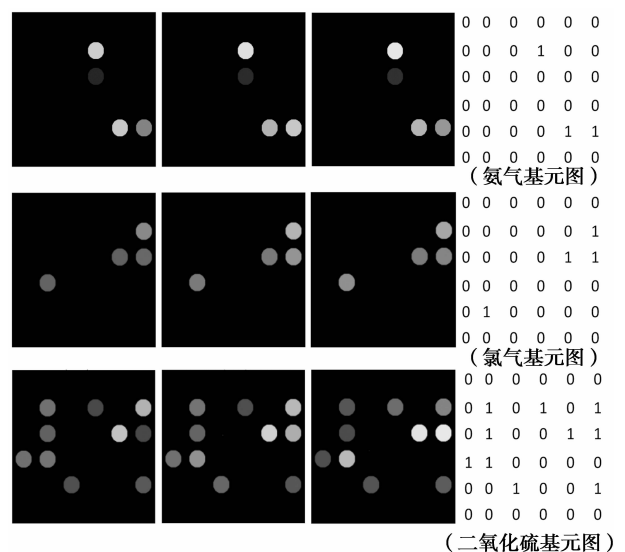


图 5 气体种类识别的基元图

对氨气、氯气和二氧化硫 3 种气体的分类识别结果显示, 该方法能准确有效地识别 3 类气体, 识别

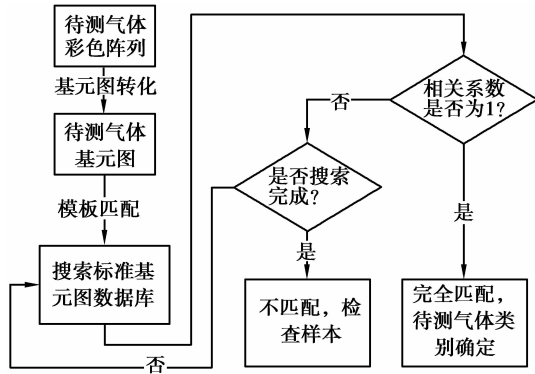


图 6 模板匹配

准确率为 100%。在气体种类已知的基础上, 下一步对明确种类的气体进行浓度识别(以氨气为例)。

4 气体浓度识别

排除了种类信息干扰的浓度检测跟原来相比要容易得多。文中采用 Jang^[12] 提出的自适应神经模糊推理系统 ANFIS^[13-14] 实现已定性气体的浓度识别。

图 7 为 ANFIS 的基本结构, 其各层的功能^[15] 简介如下:

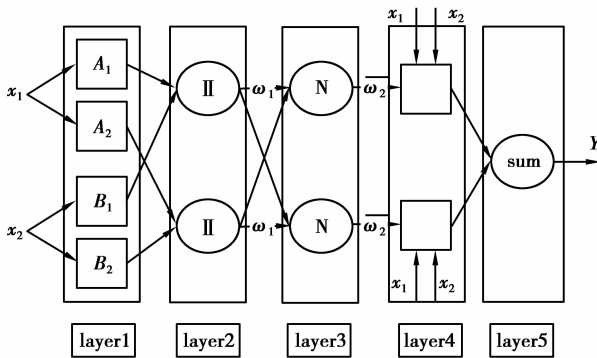


图 7 ANFIS 的基本结构

第 1 层的输出是输入 x_1, x_2 对各个模糊集 (A_1, A_2, B_1, B_2) 的隶属度函数, 输入信号模糊化; 第 2 层进行模糊合成运算, 一维隶属度函数相乘得 N 维隶属度函数; 第 3 层表示第 i 个节点计算第 i 条规则的 ω_i 与全部规则之和的比值, 完成模糊推理; 第 4 层: 该层每个节点 i 为自适应节点, 其输出为 $p_i x_i + q_i x_i + r_i$; 第 5 层: 将第 4 层的输出求和, 与第 4 层共同完成了模糊推理系统中的去模糊化。

$$\Delta G_{i(1,4)} \Delta R_{i(1,4)} \Delta G_{i(1,5)} \Delta R_{i(1,5)} \Delta G_{i(4,3)} \Delta R_{i(4,3)}, \quad (4)$$

以种类识别中检测得到的氨气为例, 说明基于模糊神经网络的浓度识别方法的有效性。如式(4)

所示, 由氨气标准基元图中基元值为“1”的位置所对应的特征值得到氨气的 6 维特征分量, 作为浓度识别的输入, 实验中选定 $t = 1 \text{ min}$ 。选取 4 个浓度等级 ($30 \times 10^{-9}, 90 \times 10^{-9}, 150 \times 10^{-9}, 210 \times 10^{-9}$) 8 组共 16 个优秀样本数据作为 ANFIS 中的训练和测试数据, 对分类识别后未知样本信息进行识别。matlab 中实现步骤如下:

1) 提炼模糊 If-then 规则。输入样本数据, 奇数组作为训练数据, 偶数组作为测试数据。输入数据经式(5)归一化后其值在 0~1 之间。

$$k_{ij} = \frac{x_{ij} - x_{i,\min}}{x_{i,\max} - x_{i,\min}} \quad (5)$$

2) 建立初始的隶属度函数。经过多次实验, 隶属函数类型选择高斯型, 输入变量的隶属函数系数为 [2 3 3 2 3 2]。由 genfis1 函数确定 ANFIS 的初始结构。

3) 训练 ANFIS, 学习直至神经网络模糊系统的输出与训练数据的均方根误差达到一定的要求, 并且和学习过程中最小二乘误差变化同时减小时结束。

对氨气样本的 3 组平行样分别进行了模糊神经网络模式识别, 识别结果如表 1 所示。误差几乎都在 5% 以内。

表 1 模糊神经网络模式识别结果

序号	识别目标/ $\times 10^{-9}$	识别结果/ $\times 10^{-9}$	识别误差	
平行样一	1	30	29.5	0.017
	2	90	88.3	0.019
	3	150	150.3	0.002
	4	210	213.0	0.014
平行样二	1	30	28.8	0.040
	2	90	88.0	0.022
	3	150	156.8	0.045
	4	210	210.0	0.000
平行样三	1	30	28.3	0.056
	2	90	92.8	0.031
	3	150	149.2	0.005
	4	210	215.0	0.024

图 8 所示为 5 种不同浓度氨气、氯气的主成分分析图。2 种气体的识别存在交叉, 通过主成分分析并不能完全将 2 种气体分离开来, 原因可能在于

主成分分析方法只考虑了敏感点的数值信息而忽略了彩色可视传感阵列中敏感点的位置信息,导致气体识别出错。因此,彩色可视传感阵列基元匹配快速定量模式识别算法能充分利用敏感点的位置信息进行模式识别,比单纯利用敏感点数值信息的主成分分析方法精确有效。

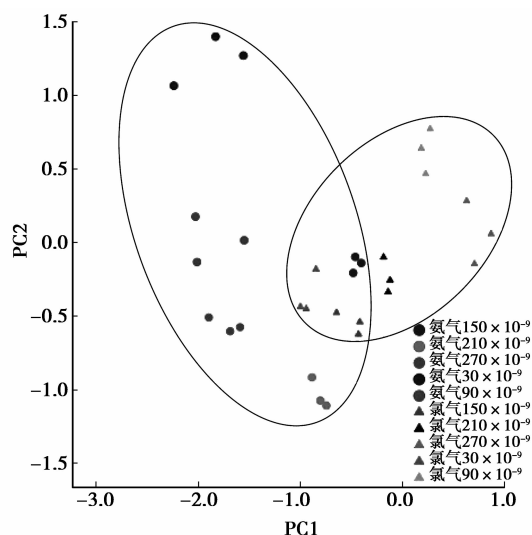


图 8 氨气、氯气主成分分析图

5 结束语

提出了彩色可视传感阵列基元匹配快速定量模式识别算法,重点利用以前模式识别方法中忽略的敏感点的位置信息,将不同气体的种类和浓度检测分步骤进行,解决了种类、浓度同时识别时可能出现特征数据交叉感染导致检测错误的问题。该方法突破了以往模式识别方法中同一次识别仅针对待测物的种类或者浓度进行分析的局限,使得不同气体不同浓度的检测得以按序依次进行,为彩色可视传感阵列的模式识别提供了一种新思路。

参考文献:

- [1] Rakow N A, Suslick K S. A colorimetric sensor array for odour visualization [J]. *Nature*, 2000, 406: 710-713.
- [2] Liang F, Musto C J, Suslick K S. A simple and highly sensitive colorimetric detection method for gaseous formaldehyde[J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2010, 132(12):4046-4047.
- [3] Musto C J, Lim S H, Suslick K S. Colorimetric detection and identification of natural and artificial sweeteners[J]. *Analytical Chemistry*, 2009, 81 (15): 6526-6533.
- [4] Suslick B A, Liang F, Suslick K S. Discrimination of complex mixtures by a colorimetric sensor array: coffee aromas [J]. *Analytical Chemistry*, 2010, 82 (5): 2067-2073.
- [5] 龚恒. 基于卟啉微阵列传感器系统的实现与研究[D]. 重庆:重庆大学,2008.
- [6] Shabbir S H, Joyce L A, Lynch V M. Pattern-based recognition for the rapid determination of identity, concentration, and enantiomeric excess of subtly different threo diols [J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2009, 131(36): 13125-13131.
- [7] Luo X G, Liu P. A novel chemical detector using colorimetric sensor array and pattern recognition methods for the concentration analysis of NH_3 [J]. *Review of Scientific Instruments*, 2010, 81(10):1-6.
- [8] 耿志广,王希武,王寅龙,等. 基于人工神经网络的电子鼻对混合气体检测研究[J]. *现代计算机*, 2010(5): 45-48.
GENG Zhiguang, WANG Xiwu, WANG Yinlong, et al. Research on detection of mixed gas by electronic nose based on artificial neural network [J]. *Modern computer*, 2010(5):45-48.
- [9] Chen Z, Suslick K S. Colorimetric sensor array for soft drink analysis [J]. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2007, 55(2): 237-242.
- [10] 庄家俊,骆德汉,邹宇华. 百草油鉴别分类的电子鼻实现方法研究[J]. *传感器与微系统*, 2010, 29(7):62-65.
ZHUANG Jiajun, LUO Dehan, ZOU Yuhua. Classification of luofushan hundred-grass-oil based on e-nose[J]. *Transducer and Microsystem Technologies*, 2010, 29(7):62-65.
- [11] Lee D S, Huh J S, Lee D D. Classifying combustible gases using micro-gas sensor array [J]. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2003, 93(1/3):1-6.
- [12] Jang J S R. ANFIS: adaptive-network-based fuzzy inference systems[J]. *IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics*, 1993, 23(3): 665-685.
- [13] Takagi T, Sugeno M. Fuzzy identification of system and its application to modeling and control[J]. *IEEE Transactions Systems, Man Cybernetics*, 1985, 15(1): 116-132.
- [14] Passino K M, Yurkovich S. *Fuzzy control* [M]. New Jersey: Addison-Wesley, 1998.
- [15] 刘瑜,田逢春, Yang S X, 等. 基于电子鼻的气体等级鉴别信号处理方法[J]. *信号处理*, 2007, 23(2):301-305.
LIU Yu, TIAN Fengchun, YANG S X, et al. Signal processing method to classify odor concentration with electronic-nose[J]. *Signal Processing*, 2007, 23(2):301-305.