

混合气体识别的响应等效性与瞬态信号正交分解模型*

秦国军^{1,2}, 仲明³, 张文娜¹, 胡葛庆¹

(1. 国防科技大学 装备综合保障技术重点实验室, 湖南 长沙 410073;

2. 湖南涉外经济学院 机械工程学院, 湖南 长沙 410217;

3. 中国人民解放军 69006 部队, 新疆 乌鲁木齐 830001)

摘要:针对目前混合气体识别大多采用传感器稳态响应信号、基于线性混合假设或大量样本学习,而瞬态响应信号特征分析主要应用非正交分解的问题,提出一种基于响应等效性与瞬态信号正交分解的混合气体识别模型。分析金属氧化物半导体传感器对混合气体的响应特性,建立基于气体响应成分等效性假设的气体非线性混合模型,在此基础上,提出并应用一种新的正交基函数——扩展类 Legendre 正交基,对气体传感器瞬态响应信号进行分解;通过对正交分解系数与气体浓度的回归分析,验证二者之间的指数型关联关系,并以正交分解系数为特征参数,利用气体非线性等效混合模型对混合气体分解与辨识。实验结果表明,尽管这种混合气体识别模型仅用单一气体检测的先验知识,对混合气体的识别误差仍可达到 15% 以内。

关键词:响应等效性;正交分解;扩展类 Legendre 基;瞬态响应信号;混合气体识别

中图分类号: TP212.6 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-2486(2015)04-172-07

Gas mixture estimation model based on response equivalent and orthogonal decomposition of transient response signals

QIN Guojun^{1,2}, ZHONG Ming³, ZHANG Wenna¹, HU Niaoqing¹

(1. Key Laboratory of Science and Technology on Integrated Logistics Support, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China;

2. College of Mechanical Engineering, Hunan International Economy University, Changsha 410217, China;

3. The PLA Unit 69006, Wulumuqi 830001, China)

Abstract: Based on linear mixture assumption or training the classifiers by large amount of data, many methods used to recognize and estimate gas mixtures were adopted the non-orthogonal decomposition of steady response signal. Considering orthogonal decomposition approaches were mainly applied to analyze transient response signals, a gas mixture estimation model based on response equivalent and orthogonal decomposition of transient response signals was put forward. A novel nonlinear gas-mixing model was built after the analysis of MOS (Metal Oxide Semiconductor) gas sensor response characteristics based on the component equivalent expression for different gas responses. A new orthogonal basis function, the EQL (Extended Quasi-Legendre) basis, was proposed and applied to the decomposition of a transient response signal from the gas sensor. After the exponential relationship between the coefficients and the gas concentration was verified via regression analysis, the components in the gas mixture were separated, and their concentrations were estimated simultaneously. Experimental result shows that even though only the prior knowledge of single gas responses was applied to build the model, the concentration determined from the transient response of the gas mixture can reach an error within 15%.

Key words: response equivalent; orthogonal decomposition; extended quasi-Legendre basis; transient response signal; gas mixture estimation

经过二十多年的研究,嗅觉传感阵列信号处理与气味定性识别取得了很多鼓舞人心的成果^[1-2],但在气味定量识别与混合气体分离方面,由于气体浓度与传感器阵列响应的关系尚缺乏足够精确的数学描述,因此理论研究与实际需求还有较大的差距。在人工嗅觉信号分析过程中,通常将多种特定浓度的气体组成的混合气体看作一

种模式,提取相应传感器阵列响应的特征参数,采用模式识别方法对被测气体进行分类识别。当气体成分浓度划分细致且组合种类多时,这种识别方法将面临模式过多引起的气体标定过程复杂、训练时间增加等问题。相关研究工作主要集中在采用诸如神经网络等非线性建模方法对混合气味的学习和识别方面^[3-10]。虽然这些方法对于特

* 收稿日期:2015-01-20

基金项目:国家自然科学基金资助项目(50975279,51375484);湖南省教育厅科学研究重点资助项目(14A083)

作者简介:秦国军(1970—),男,河北卢龙人,副教授,博士,硕士生导师,E-mail:qqj@nudt.edu.cn

定问题取得了一定的效果,但由于神经网络本身是一个纯统计学习的方法,因此造成两个方面的不足:一是单个网络参数不具有任何物理意义,模型对学习过样本的模式识别较好,但外推的正确性和精度一般难以保证,同时这种方法存在过拟合,感知器的参数必须选择准确才能得到满意的结果^[11];二是在定量识别模型建立过程中,需要大量不同组分的混合气体样本以训练网络参数,但对多种气体而言,不同浓度的枚举组合数量是一个天文数字,这为该方法的应用带来了实际困难。此外,针对混合气体识别问题,近年来有些研究者尝试将盲源分离理论引入电子鼻研究,通过在低浓度下假设气体传感器对混合气体的响应函数为一个线性叠加函数,应用独立分量分析进行混合气体分离^[12-15],但这种线性假设在高浓度时不可避免地会造成较大的误差。

1 气体响应等效性非线性混合模型

由气体传感器的响应机理及相关文献对传感器响应与气体浓度之间的关联分析可知,一般情况下气体传感器响应与气体浓度之间关系 $f_m(\cdot)$ 是个非线性函数,通常可用幂函数或对数函数关系等来近似描述^[16-18],即电子鼻中某个金属氧化物半导体气体传感器 m 的某气体 O_i 的稳态相应可表示为^[19]

$$x_{mi} = \frac{G_m}{G_m^{\text{air}}} - 1 = f_{mi}(c_i) = \gamma_{m,i}(c_i)^{\beta_{m,i}} \quad (1)$$

式中, G_m 为传感器 m 在气体 O_i 中的导纳稳态值, G_m^{air} 为传感器 m 在纯净空气中导纳的稳态值, $f_{mi}(\cdot)$ 为传感器 m 对气体 O_i 的响应函数, $\gamma_{m,i}$ 为与传感器及气体有关的 Freundlich 系数, $\beta_{m,i}$ 为自由气体粒子的稳态平衡摩尔数。

考虑并非所有气体都由单一分子组成,假设气体 O_i 中与传感器 m 发生反应的有效成分为 $o_{m,i}$,其浓度为

$$o_{m,i} = c_i \lambda_{m,i} \quad (2)$$

式中, $\lambda_{m,i}$ 为单位浓度下单一气体 O_i 与传感器 m 反应有效成分的体积分数,显然,对于特定气体和特定传感器, $\lambda_{m,i} \geq 0$ 为常数。

此时,式(1)可写为

$$x_{m,i} = f_{m,i}(o_{m,i}) = \alpha_{m,i}(\lambda_{m,i})^{\beta_{m,i}}(c_i)^{\beta_{m,i}} = \alpha_{m,i}(o_{m,i})^{\beta_{m,i}} \quad (3)$$

式中 $\alpha_{m,i} = \gamma_{m,i}/\lambda_{m,i}^{\beta_{m,i}}$ 。

对于传感器 m 和气体 O_j ,式(3)可表示为

$$x_{m,j} = \alpha_{m,j}(o_{m,j})^{\beta_{m,j}} = \gamma_{m,j}(c_j)^{\beta_{m,j}} \quad (4)$$

令 $x_{m,i} = x_{m,j}$,可得

$$o_{m,i} = \left[\frac{\alpha_{m,j}(o_{m,j})^{\beta_{m,j}}}{\alpha_{m,i}} \right]^{1/\beta_{m,i}} = \left(\frac{\gamma_{m,j}(c_j)^{\beta_{m,j}}}{\alpha_{m,i}} \right)^{1/\beta_{m,i}} \quad (5)$$

显然,式(5)从传感器 m 的角度,给出了用气体 O_i 的响应有效成分对气体 O_j 响应有效成分的等效表示,不失一般性,可将式(5)中的 $o_{m,i}$ 重写为 $o'_{m,i}$,即表征 O_j 中可与传感器 m 发生响应有效成分的 $o_{m,i}$ 。

对于由 N 种气体 $\{O_i\}, i=1, \dots, N$ 构成混合气体,在假设气体混合过程中不发生化学反应,且传感器敏感的气体基本成分不变的前提下,可认为传感器 m 响应的稳态输出为

$$x_m = f_m[o_{m,1} + \dots + o_{m,i} + \dots + o_{m,N}] \quad (6)$$

基于式(5),传感器 m 对混合气体的稳态响应可用对气体 O_j 有效成分响应等效表示为

$$x_m = f_{m,i} \left[\sum_{j=1}^N \left(\frac{\alpha_{m,j}}{\alpha_{m,i}} (\lambda_{m,j})^{\beta_{m,j}} (c_j)^{\beta_{m,j}} \right)^{1/\beta_{m,i}} \right] \quad (7)$$

代入式(1),可得

$$x_m = \left[\sum_{j=1}^N (\gamma_{m,j} (c_j)^{\beta_{m,j}})^{1/\beta_{m,i}} \right]^{\beta_{m,i}} \quad (8)$$

从而

$$(x_m)^{1/\beta_{m,i}} = \sum_{j=1}^N (\gamma_{m,j})^{1/\beta_{m,i}} (c_j)^{\beta_{m,j}/\beta_{m,i}} \quad (9)$$

式中, x_m 为传感器稳态响应值或满足要求的特征值, $\gamma_{m,j}$ 和 $\beta_{m,j}$ ($j=1, 2, \dots, N$) 均为对气体 O_j 响应标定过程中可辨识的参数。

式(9)即为基于响应等效性表示的气体非线性混合响应特性模型,由于其中含有 N 个未知数 c_j ($j=1, 2, \dots, N$),因此仅用单个传感器信号的单个特征量(如稳态响应)无法求出所有的 c_j 。考虑传感器阵列中 M 个传感器对混合气体都有响应,若从每个传感器瞬态响应信号中均可获得满足式(1)或式(3)的 K 个特征量 x_m^k ($m=1, 2, \dots, M; k=1, 2, \dots, K$),便可建立一个含 N 个未知数、由 $M \times K$ 个等式组成的方程组

$$(x_m^k)^{1/\beta_{m,i}^k} = \sum_{j=1}^N (\gamma_{m,j}^k)^{1/\beta_{m,i}^k} (c_j)^{\beta_{m,j}^k/\beta_{m,i}^k} \quad (10)$$

考虑存在测量噪声及标定过程参数辨识噪声,且混合气体中气体的种类数 N 通常不大,因此 $M \times K > N$ 一般很容易满足,即方程组可求解。

2 扩展类 Legendre 正交基

金属氧化物半导体(Metal Oxide Semiconductor, MOS)气体传感器响应的稳态值与气体浓度之间一般容易满足式(1)所示的指数关系,但对于很多传感器,这一稳态值的获取往往需要以很长的

响应时间和大量的实验对象为代价。

代数三角函数空间的类 Legendre 正交基函数集具有良好的端点性质和对称性质,且求解方便^[20]。不同于 Fourier 基、Wavelet 基和 Basel 函数^[21],类 Legendre 正交基函数既不是周期函数,也不是全局振荡函数。由于类 Legendre 函数具有和 MOS 传感器瞬态响应信号类似的结构信息,因此,其正交变换得到的不是局部时间或频率的值,而是随时间而变化的幅值,更加适合用来描述气体传感器响应过程中的幅值减小或增加。其不足主要是,该正交基给出的是时间 $t \in [0, a]$ 内不超过两个周期的低频信号,而气体传感器的瞬态响应信号中有可能含有多个高倍频谐波成分。为了在分解的结果中反映出更高频的信号,对类 Legendre 正交基的定义空间进行扩展,提出一组扩展类 Legendre 标准正交基。

定义 在代数三角函数空间 $\Gamma_{N,M} = \text{span} \{1, \sin t, \cos t, \sin 2t, \cos 2t, \dots, \sin Nt, \cos Nt, t, t^2, \dots, t^M\}$

中, $t \in [0, a]$ 上的一组正交基 $\{L_n(t)\}$ 被称为一种扩展类 Legendre 正交基,其定义为

$$\begin{cases}
L_0(t) = 1 \\
L_1(t) = \sin\left(t - \frac{\alpha}{2}\right) \\
\vdots \\
L_{2k-1}(t) = \sin\left(kt - \frac{k}{2}\alpha\right) - \sum_{j=1}^{k-1} C_{2k-1,2j-1} L_{2j-1}(t), \\
\quad 1 < k \leq \frac{N+1}{2} \\
L_{2k}(t) = \cos\left(kt - \frac{k}{2}\alpha\right) - \sum_{j=0}^{k-1} C_{2k,2j} L_{2j}(t), \\
\quad 1 \leq k \leq \frac{N}{2} \\
\vdots \\
L_{2N+m} = t^m - \sum_{j=0}^{2N+m-1} C_{2N+m,j} L_j(t) \quad (m = 1, 2, \dots, M)
\end{cases} \tag{11}$$

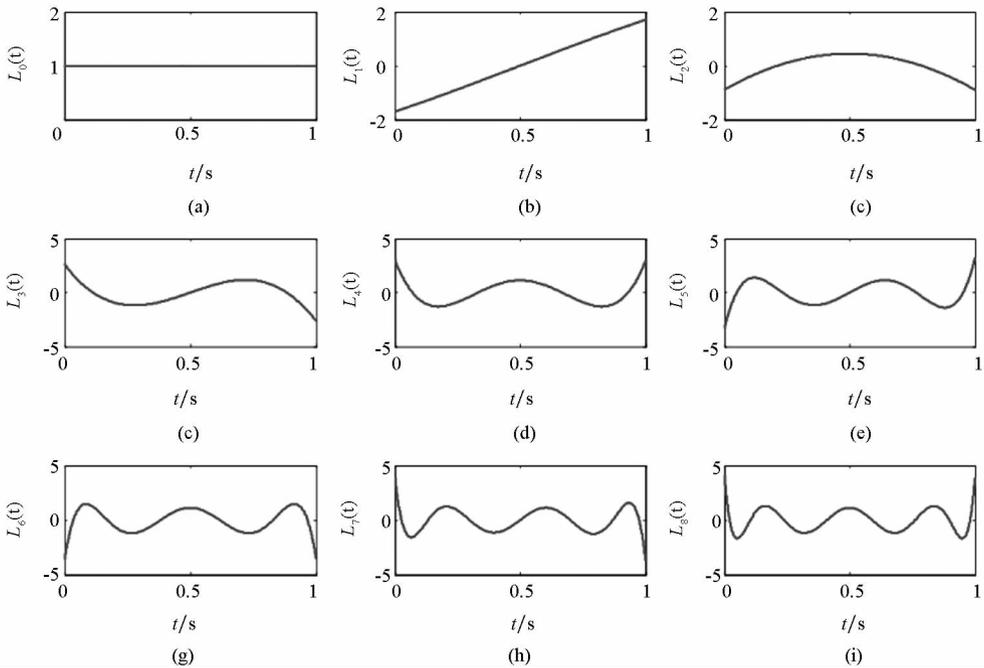


图 1 第 0 ~ 8 阶扩展类 Legendre 标准正交基函数

Fig. 1 Extended quasi-legendre standard orthogonal basis functions of $L_i(t)$ ($i = 0, \dots, 8$)

由 Gram-Schmidt 正交化方法可得:

$$\begin{cases}
C_{2k-1,2j-1} = \int_0^\alpha \sin\left(kt - \frac{k}{2}\alpha\right) L_{2j-1}(t) dt \Big/ \int_0^\alpha [L_{2j-1}(t)]^2 dt \\
C_{2k,2j} = \int_0^\alpha \cos\left(kt - \frac{k}{2}\alpha\right) L_{2j}(t) dt \Big/ \int_0^\alpha [L_{2j}(t)]^2 dt \\
C_{2N+m,j} = \int_0^\alpha t^m L_j(t) dt \Big/ \int_0^\alpha [L_j(t)]^2 dt
\end{cases}$$

图 1(a) ~ (i) 分别为取 $\alpha = 1, N = 8, M = 0$ 时的第 0 ~ 8 阶扩展类 Legendre 标准正交基函数示

意图。由图可见,第 0 ~ 8 阶基函数除了有拟周期性波形以外,还有单调上升波形以及下降波形,所以理论上更容易描述金属氧化物半导体气体传感器瞬态响应过程。此时, $\{L_n(t)\}$ 的低阶基函数类似于有限时窗间内的多项式基函数,高阶基函数类似于有限时窗间内的 Fourier 基函数,因此,其既可以用于描述传感器瞬态响应过程,也可用于描述稳态响应过程。

3 气体传感器瞬态响应信号正交分解

3.1 电子鼻测试实验

本文相关实验数据采用德国 AIRSENSE 公司 PEN3 型便携式电子鼻获得^[22-23],该系统的传感器阵列包括 10 个 MOS 气体传感器。在高温下,半导体材料颗粒表面吸附的气体分子使材料载流子浓度发生变化,从而改变半导体元件的电导率 G 。

以油液挥发气体为研究对象,不同浓度的油液挥发气体样本制备方法如下:

步骤 1:用注射器分别抽取不同液状油品各 10ml,分别注入到容积为 500ml 的带密封橡胶塞的空玻璃瓶中,并在室温下密封静置 24h,使油液充分挥发。

步骤 2:以顶空富集油液挥发成分作为原始气体初样。从容积为 L (300ml) 的密封取样瓶中抽取体积为 l_0 (取样体积) 的空气,以保证注入被测原始气体初样后取样瓶内的气压稳定。

步骤 3:将体积为 l_0 的原始气体初样通过注射器注入密封取样瓶中,得到一种取样体积 (反映浓度信息) 为 l_0 的单一气体样本;或将体积 l_{01} 的一种原始气体初样通过注射器注入密封取样瓶中,再将体积为 $l_0 - l_{01}$ 的另一种原始气体初样注入取样瓶中,使两种挥发气体充分混合,则得到混合气体样本。

与采用取样袋制备实验样本相比,利用密封取样瓶制备气体方法的优点在于,可通过改变注入取样瓶的原始气体初样的体积 l_0 快速制备不同相对浓度的实验样品,降低实验成本,提高效率;但缺点是实验样品体积分数是一个相对值,同时取样瓶内的气体会随着实验过程的消耗而减少,取样瓶内压力下降,待测气体浓度降低。

实验开始后,将被测气体抽入反应腔,气体吸附在敏感元件表面使 G/G_0 快速变化。为提高测量效率,减少传感器接触气体的时间,设定测量时间为 60s;由于反应过程较慢,采样频率设为 1Hz;清洗时间设定为 600s,使传感器阵列得到充分清洗,避免残余气体对下一次采样的影响。

3.2 信号扩展类 Legendre 分解与重构

时间序列 $x(t)$ ($t \in [0, a]$), 基于扩展类 Legendre 基函数的 K 阶正交分解为

$$\hat{x}^K(t) = \sum_{k=0}^K a_k L_k(t) \quad (12)$$

式中, a_k ($k = 0, \dots, K$) 是唯一确定的分解系数。

式(12)等价于用扩展类 Legendre 基展开空间上 $\Gamma_{N,M}$ 的 $K+1$ 个分解系数 ($A = [a_0, \dots, a_K]^T$) 表征每条响应曲线。为确定正交分解所需基函数的最大阶数 K , 定义拟合相对误差 $r(K) = \sqrt{\sum_i (x_i - \hat{x}_i^K)^2 / \sum_i (x_i^K)^2}$; x_i, \hat{x}_i 分别为传感器响应的实测值和正交分解重构值。

不失一般性,以电子鼻 2#传感器对 6 种不同取样体积 (1ml, 5ml, 10ml, 20ml, 50ml 和 100ml) 柴油挥发气体的瞬态响应信号 (实际测量值如图 2 中的实线所示) 为例, 扩展类 Legendre 基信号重构相对误差随最大阶数 K 的变化趋势如图 3 所示。

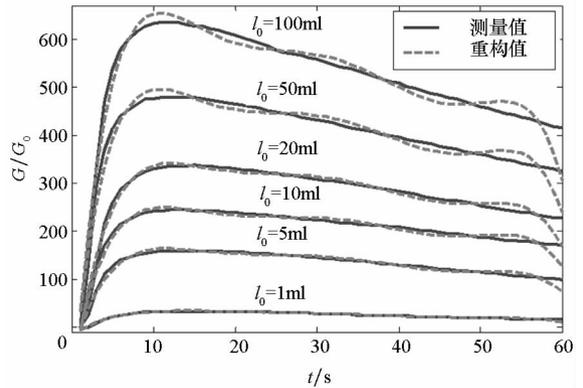


图 2 2#传感器对柴油挥发气体的响应及正交重构曲线
Fig. 2 Original responses and their reconstruction of sensor 2 in diesel gas

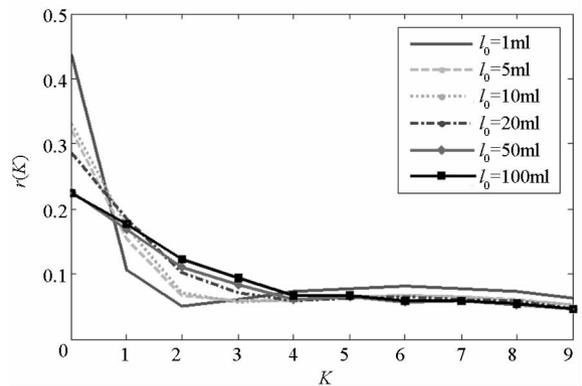


图 3 正交分解拟合误差随阶数变化曲线
Fig. 3 Curves of fitting error changes with different K

可以看出,当 $K = 4$ 时,误差变化出现了拐点。选定 $K = 4$,按式(12)对图 2 中 2#传感器的瞬态响应信号正交分解,重构后的信号如图 2 中虚线所示。经扩展类 Legendre 基分解后的重构曲线较好地重现了原瞬态响应曲线的变化规律。图 4 分别给出了 6 个样本响应信号经过扩展类 Legendre 基正交分解的分解系数。

4 基于扩展类 Legendre 分解的混合气体识别

4.1 识别步骤

步骤 1: 采用扩展型类 Legendre 正交基对不同浓度下单一气体的传感器阵列响应信号进行正交分解。设传感器 m ($m = 1, 2, \dots, 10$) 对浓度为 c_p 的油液 i 挥发气体瞬态响应信号的 $K + 1$ 个正交分解系数为 $a_{m,i}^k(c_p)$, $k = 0, 1, \dots, K$; $p = 1, 2, \dots, P$ (P 为每个气体样本总数)。

步骤 2: 对不同浓度挥发气体对应的 $a_{m,i}^k(c_p)$, 分别利用式 (4) 进行拟合, 得到 N 组拟合系数 $\{\gamma_{m,i}^k, \beta_{m,i}^k\}$ ($i = 1, 2, \dots, N$)。

$$\begin{cases} (a_1^0)^{1/\beta_{1,i}^0} = (\gamma_{1,1}^0)^{1/\beta_{1,i}^0} (c_1)^{\beta_{1,1}^0/\beta_{1,i}^0} + (\gamma_{1,2}^0)^{1/\beta_{1,i}^0} (c_2)^{\beta_{1,2}^0/\beta_{1,i}^0} + \dots + (\gamma_{1,N}^0)^{1/\beta_{1,i}^0} (c_N)^{\beta_{1,N}^0/\beta_{1,i}^0} \\ \vdots \\ (a_1^K)^{1/\beta_{1,i}^K} = (\gamma_{1,1}^K)^{1/\beta_{1,i}^K} (c_1)^{\beta_{1,1}^K/\beta_{1,i}^K} + (\gamma_{1,2}^K)^{1/\beta_{1,i}^K} (c_2)^{\beta_{1,2}^K/\beta_{1,i}^K} + \dots + (\gamma_{1,N}^K)^{1/\beta_{1,i}^K} (c_N)^{\beta_{1,N}^K/\beta_{1,i}^K} \\ \vdots \\ (a_M^0)^{1/\beta_{M,i}^0} = (\gamma_{M,1}^0)^{1/\beta_{M,i}^0} (c_1)^{\beta_{M,1}^0/\beta_{M,i}^0} + (\gamma_{M,2}^0)^{1/\beta_{M,i}^0} (c_2)^{\beta_{M,2}^0/\beta_{M,i}^0} + \dots + (\gamma_{M,N}^0)^{1/\beta_{M,i}^0} (c_N)^{\beta_{M,N}^0/\beta_{M,i}^0} \\ \vdots \\ (a_M^K)^{1/\beta_{M,i}^K} = (\gamma_{M,1}^K)^{1/\beta_{M,i}^K} (c_1)^{\beta_{M,1}^K/\beta_{M,i}^K} + (\gamma_{M,2}^K)^{1/\beta_{M,i}^K} (c_2)^{\beta_{M,2}^K/\beta_{M,i}^K} + \dots + (\gamma_{M,N}^K)^{1/\beta_{M,i}^K} (c_N)^{\beta_{M,N}^K/\beta_{M,i}^K} \end{cases} \quad (13)$$

4.2 正交分解系数与气体浓度关联分析

利用式 (13) 对混合气体识别前, 必须确定分解系数 $a_{m,i}^p$ 是否满足式 (4), 即是否为浓度的指数函数。以柴油和齿轮油为例, 分别对单一气体响应信号进行扩展型类 Legendre 基分解, 并对各阶分解系数与取样体积 l_0 间的关联关系回归分析。

不同取样体积 l_0 下柴油和齿轮油气体样本传感器响应信号正交分解的 0 阶系数及其拟合结果分别如图 4 和图 5 所示。分析可知, 1#, 2#, 3#, 5#, 6#, 7#, 8# 和 9# 传感器对两类气体检测信号的第 0

步骤 3: 采用扩展型类 Legendre 正交基对待识别混合气体的传感器阵列响应信号进行分解, 获得各分解系数 a_m^k 并作为特征参数。

步骤 4: 按照式 (10), 若以气体 i 为等效参考气体, 且所有分解系数均满足式 (4), 则可建立由 $M \times (K + 1)$ 个方程组成的方程组 (13)。方程组中, 若各参数 $\gamma_{m,i}^k, \beta_{m,i}^k, a_m^k$ ($m = 1, 2, \dots, M; i = 1, 2, \dots, N; k = 0, 1, \dots, K$) 已知, $\{c_i, i = 1, 2, \dots, N\}$ 未知, 由于方程数大于未知数个数, 利用最小二乘法求解即可得到该混合气体中各气体的浓度 c_i ($i = 1, 2, \dots, N$), 若仅有一个不为零, 则表示是已知单一气体。

阶分解系数 ($k = 0$) 的拟合效果均较好。因此, 可认为至少 $a_{m,1}^0, a_{m,2}^0$ ($m = 1, 2, 3, 5, 6, 7, 8, 9$) 满足式 (4)。

4.3 识别结果分析

将 1#, 2#, 3#, 5#, 6#, 7#, 8# 和 9# 传感器第 0 阶分解系数的拟合式, 以柴油气体为参考气体, 对待测气体按式 (13) 联立, 并对该方程组求数值解, 可获得对两种气体及其混合气体取样体积估计的结果, 如表 1 所示。其中, 相对误差 $r(l_0)_{error} = |l_0^{ac} - l_0^{es}| / l_0^{ac} \times 100\%$, l_0^{ac} 为取样体积实际值, l_0^{es} 为取样体积估计值。

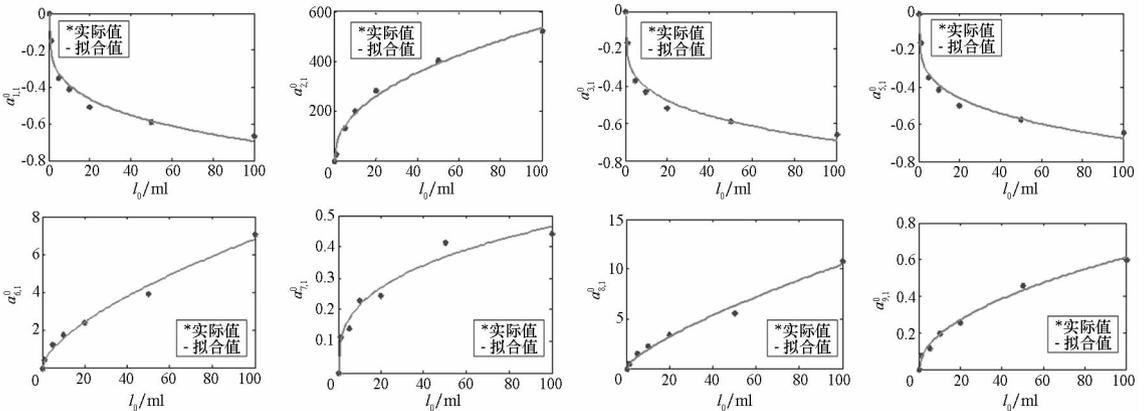


图 4 柴油样本信号各正交分解系数及拟合结果

Fig. 4 Orthogonal decomposition coefficients of diesel gas signals and their fitting results

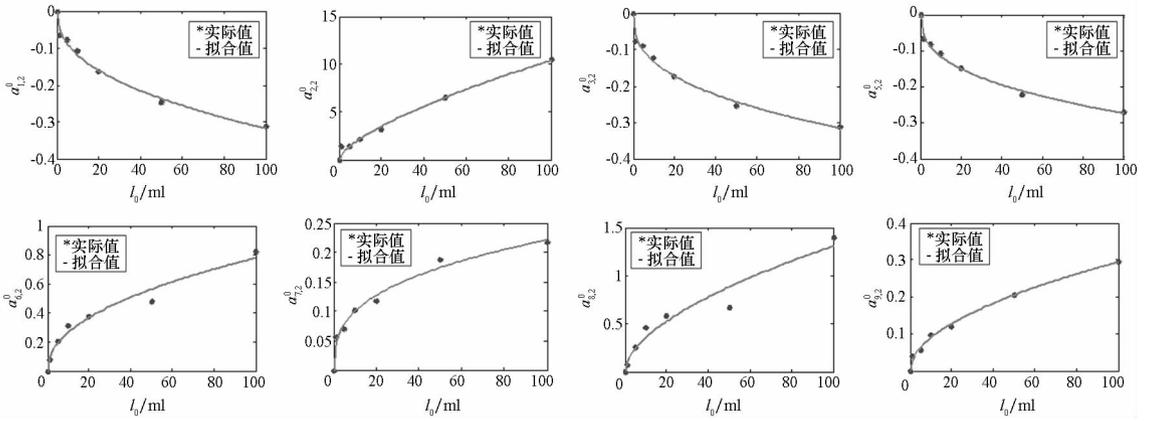


图5 齿轮油样本信号各正交分解系数及拟合结果

Fig.5 Orthogonal decomposition coefficients of gear oil gas signals and their fitting results

从表1可以看出,就单一气体而言,不论取样体积多少,都有部分组分被划分为另一种气体:取样体积为1ml时,识别相对误差均较大;取样体积在5ml以上时,类别正确识别的取样体积相对误差均在15%以内。其主要原因:一是存在测量误

差,特别是气体浓度较低时传感器测量相对误差较大;二是正交分解存在重构误差,分解系数拟合也存在误差;三是两种油液组分有一定相似性。就混合气体而言,两种成分的估计都存在一定误差,柴油挥发气体取样体积估计值普遍偏大,但绝

表1 单一及混合气体取样体积估计结果

Tab.1 Estimation result of sample volumes for single gas and the mixture gas

l_0^{ac}/m		l_0^{cs}/ml	$r(l_0)_{error}/\%$	l_0^{cs}/ml	$r(l_0)_{error}/\%$
柴油	齿轮油		柴油	齿轮油	
1	0	0.410 0	59.00	0.152 4	—
5	0	5.421 3	8.426 0	0.014 5	—
10	0	11.016 9	10.169 0	0.041 2	—
20	0	21.712 7	8.563 5	0.189 4	—
50	0	52.370 3	4.740 6	0.427 0	—
100	0	94.452 1	5.547 9	1.247 0	—
0	1	-0.012 5	—	0.410 0	59.00
0	5	-0.010 5	—	4.975 5	0.490
0	10	0.018 1	—	9.676 0	3.240
0	20	0.161 0	—	19.287 4	3.563
0	50	0.975 0	—	49.540 8	0.918
0	100	2.275 6	—	103.038 3	3.038
5	5	5.517 2	10.344	5.473 2	9.464 0
5	10	5.602 4	12.048	11.448 6	14.486
5	20	5.741 4	14.828	17.476 3	12.618
10	5	11.042 9	10.429	5.502 4	10.048
10	10	11.552 6	15.526	11.486 0	14.860
10	20	11.424 0	14.240	17.025 4	14.873
20	5	22.401 3	12.006	5.406 7	8.134
20	10	21.992 8	9.964	11.533 9	15.339
20	20	21.900 6	9.503	22.057 9	10.289

大部分估计相对误差在15%以内。其主要原因:一是存在正交分解误差,且取0阶分解系数 $x_{m,1}^0$, $x_{m,2}^0$ 作为特征参数,物理意义上是响应平均值,测试时间内建立的方程组(13)存在一定误差;二是不同浓度混合气体的制备过程存在操作不一致性;三是两种气体响应形式比较接近,而柴油气体

的响应灵敏度又大大高于齿轮油。

5 结论

针对气体传感器阵列瞬态响应信号分析的问题,提出一种以气体传感器响应有效成分等效表示的非线性混合响应特性模型,应用扩展型类

Legendre 基的分解方法对混合气体辨识方法进行研究。研究表明,在任意选定某种气体作为参考气体,并对所有单一气体标定的前提下,该方法可同步估计混合气体浓度和类型,具有一定的适应性。

理论上讲,本文建立的模型可以选取混合气体中的任意一种作为参考气体,因此,在验证时,仅采用了柴油挥发气体作为参考。但可以想象的是,由于统计计算和传感器灵敏度的影响,选用不同气体作为参考,对最终的估计结果必然有一定的影响,如何优选参考气体,需要进一步研究。

本文提出的模型,主要用于混合气体的离线识别,而对于混合气体的在线识别和浓度估计,则需要提高气体传感器性能的基础上进一步研究和探讨。

参考文献 (References)

- [1] Gutierrez-Osuna R. Pattern analysis for machine olfaction: a review [J]. *IEEE Sensors Journal*, 2002, 2(3): 189–202.
- [2] 高大启, 杨根兴. 电子鼻技术新进展及其应用前景[J]. *传感器技术*, 2001, 20(9): 1–5.
GAO Daqi, YANG Genxing. Recent developments and application prospects of electronic noses[J]. *Journal of Transducer Technology*, 2001, 20(9): 1–5. (in Chinese)
- [3] De Vito S, Massera E, Piga M, et al. On field calibration of an electronic nose for benzene estimation in an urban pollution monitoring scenario [J]. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2008, 129(2): 750–757.
- [4] Sohna J H, Hudson N, Gallagher E, et al. Implementation of an electronic nose for continuous odour monitoring in a poultry shed[J]. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2008, 133(1): 60–69.
- [5] Martin M A, Santos J P, Agapito J A. Application of artificial neural networks to calculate the partial gas concentrations in a mixture [J]. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2001, 77(1–2): 468–471.
- [6] 张覃轶, 王振勇, 孙伟, 等. 电子鼻在乙醇和丙酮与乙醇和苯定量分析中的应用[J]. *传感技术学报*, 2006, 19(6): 2495–2497.
ZHANG Qinyi, WANG Zhenyong, SUN Wei, et al. Application of electronic nose for quantification of ethanol & acetone and ethanol & benzene [J]. *Journal of Transduction Technology*, 2006, 19(6): 2495–2497. (in Chinese)
- [7] 刘红秀, 李洪波, 李卫东, 等. 基于电子鼻的鱼类新鲜度估计研究[J]. *中山大学学报*, 2010, 49(2): 28–31.
LIU Hongxiu, LI Hongbo, LI Weidong, et al. Research on the fish freshness assessment based on electronic nose [J]. *Acta Scientiarum Naturalium Universitatis Sunyatseni*, 2010, 49(2): 28–31. (in Chinese)
- [8] 袁祖强, 王鑫磊. 灰色理论在电子鼻气体定量分析中的应用[J]. *传感器与微系统*, 2009, 28(9): 109–111.
YUAN Zuqiang, WANG Xinlei. Application of gray system theory in quantitative analysis of electronic nose [J]. *Transducer and Microsystem Technology*, 2009, 28(9): 109–111. (in Chinese)
- [9] Gao D Q, Chen W. Simultaneous estimation of odor classes and concentrations using an electronic nose with function approximation model ensembles [J]. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2007, 120(2): 584–594.
- [10] Gao D Q, Chen M M, Yan J. Simultaneous estimation of classes and concentrations of odors by an electronic nose using combinative and modular multilayer perceptions [J]. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2005, 107(2): 773–781.
- [11] Pardo M, Sberveglieri G. Remarks on the use of multilayer perceptrons for the analysis of chemical sensor array data [J]. *IEEE Sensors Journal*, 2004, 4(3): 355–363.
- [12] Bermejo S, Sole-Casals J. Blind source separation for solid-state chemical sensor arrays [C]//*Proceedings of Sensor Array and Multichannel Signal Processing Workshop*, 2004: 437–440.
- [13] Kermit M, Tomic O. Independent component analysis applied on gas sensor array measurement data [J]. *IEEE Sensors Journal*, 2003, 2(3): 218–228.
- [14] Rudnev V A, Boichenko A P, Karnozhyskiy P V. Classification of gasoline by octane number and light gas condensate fractions by origin with using dielectric or gas-chromatographic data and chemo-metrics tools [J]. *Talanta*, 2011, 84(3): 963–970.
- [15] Yu H C, Wang J, Xiao H, et al. Quality grade identification of green tea using the eigenvalues of pca based on the E-nose signals [J]. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2009, 140(2): 378–382.
- [16] Hirobayashi S, Kadir M A, Yoshizawa T, et al. Verification of a logarithmic model for estimation of gas concentrations in a mixture for a tin oxide gas sensor response [J]. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2003, 92(3): 269–278.
- [17] Chaiboun A, Traute R, Haas T, et al. A logarithmic multi-parameter model using gas sensor main and cross sensitivities to estimate gas concentrations in gas mixture for SnO₂ gas sensors [J]. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2007, 123(2): 1064–1070.
- [18] Huang D I, Leung H. Simultaneous classification and concentration estimation for electronic nose [J]. *IEEE Sensors Journal*, 2007, 7(5): 825–834.
- [19] Abbas A, Bouabdellah A. Theory of solids/gas mixtures multi-interfaces: application to the steady state interactions between a sensor array based on metal oxide semiconductor detectors and a mixture of vapors [J]. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2010, 145(2): 620–627.
- [20] 周志敏, 汪国昭. 一种类 Legendre 基及其应用 [J]. *浙江大学学报: 理学版*, 2006, 33(4): 398–402.
ZHOU Zhimin, WANG Guozhao. A quasi-legendre basis and its application [J]. *Journal of Zhejiang University (Science Edition)*, 2006, 33(4): 398–402. (in Chinese)
- [21] Vergara A, Martinielli E, Huerta R, et al. Orthogonal decomposition of chemo-sensory cues [J]. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2011, 159(1): 126–134.
- [22] Khol D. Fundamentals and recent developments of homogenous semiconducting sensors [M]. *Sensors and Sensory Systems for an Electronic Nose*, Gardner J W, Bartlett P N, USA: Kluwer Academic Publishers, 1991: 53–76.
- [23] 张文娜, 秦国军, 胡葛庆. 基于类 Legendre 基的气体传感器阵列信号的正交分解 [J]. *传感技术学报*, 2012, 25(11): 1479–1483.
ZHANG Wenna, QIN Guojun, HU Niaoqing. Orthogonal decomposition of gas array signals based on a quasi-legendre basis [J]. *Journal of Transduction Technology*, 2012, 25(11): 1479–1483. (in Chinese)