

DOI: 10.19650/j.cnki.cjsi.J2006982

基于增强卷积神经网络的电子鼻长期漂移抑制方法*

冯李航¹, 陈 铭¹, 章 伟^{1,2}

(1. 南京工业大学电气工程与控制科学学院 211800 南京; 2. 合肥工业大学仪器科学与光电工程学院 230009 合肥)

摘要:为解决电子鼻传感器阵列中的漂移问题,提出了一种增强卷积神经网络的长期漂移抑制方法。首先,通过结合历史数据的方式进行数据库扩增,起到了数据增强的效果;然后,使用增量补偿模块结合增量学习思维进行网络训练,起到了模型增强的效果;最后,分别使用公开数据集和实测数据集来验证模型的漂移抑制效果。实验结果表明:增强卷积神经网络算法的抑制效果较传统卷积神经网络、机器学习算法有较大提升,精度提高幅度为10%~20%,精度波动在1%范围内,具有较好的鲁棒性,验证了增强卷积神经网络算法在电子鼻漂移抑制中是稳健有效的,同时也从算法层面对电子鼻的漂移抑制提供了思路。

关键词: 电子鼻;增强卷积神经网络;增量学习;漂移抑制

中图分类号: TH89 **文献标识码:** A **国家标准学科分类代码:** 520.2040

Long-term drift suppression method for electronic nose based on the augmented convolutional neural network

Feng Lihang¹, Chen Ming¹, Zhang Wei^{1,2}

(1. College of Electrical Engineering and Control Science, Nanjing Tech University, Nanjing 211800, China;
2. College of Instrument Science and Opto-electronics Engineering, Hefei University of Technology, Hefei 230009, China)

Abstract: To solve the drift problem in the electronic nose sensor array, a long-term drift suppression method with the augmented convolutional neural network is proposed. First, by combining historical data to expand the database, it has the effectiveness of data enhancement. Then, the incremental compensation module is used for network training to enhance the entire network performance. Finally, public dataset and measured dataset are utilized to evaluate the drift suppression performance, respectively. Compared with the traditional convolutional neural network and machine learning algorithms, experimental results show that the proposed augmented convolutional neural network (ACNN) has great accuracy increase about 10%-20%, and the accuracy fluctuation of 1% is good robustness, which verified that the augmented convolutional neural network is robust and effective in the suppression of electron nose drift, at the same time, also provides ideas for the drift suppression of electronic nose from the algorithm level.

Keywords: electronic nose; augmented convolution neural network; incremental learning; drift suppression

0 引 言

电子鼻^[1-2]是一种模拟生物嗅觉工作原理的新形仿生检测系统,主要由交叉敏感的气体传感器阵列和适当的模式识别算法组成,能够检测识别气体或气味。它具有通用快速、多功能、低成本、便携等优势,在食品、环境、医学等诸多领域得到了极大关注^[3-5]。

目前,电子鼻^[6]主要还是以半导体气敏阵列为核心器件,传感器阵列漂移是影响电子鼻识别效果的一个重要因素。主要原因是嗅觉传感器基于表面被测气体的物理化学反应而产生电信号,易受环境干扰;并且随着使用时间的增加而不断的老化,使得传感器的响应特性逐渐变化并不断发生漂移,这直接导致了原有的识别模型不再准确,因此电子鼻的长期漂移问题成为了研究的难点之一。

由于工艺器件和硬件改进的难度较大,不少学者都

收稿日期:2020-10-08 Received Date: 2020-10-08

* 基金项目:国家自然科学基金国际合作和交流项目(82061138004)、江苏省自然科学基金(BK20180701)项目资助

考虑从算法层面上解决电子鼻模型的漂移问题^[7-10]。常见的方法为进行漂移信号或特征的补偿处理,如 Ziyatdinov 等^[11]使用共同主成分分析法(common principal component analysis, CPCA)将所有气体漂移方向特征计算为一个共同方差,并通过分量矫正的方式进行漂移补偿;Artursson 等^[12]提出了使用 PCA 结合 PLS (partial least squares) 分量矫正法,将测试气体投影到向量空间来剔除漂移方向的特征分量;Cai 等^[13]人则利用独立成分分析(independent component analysis, ICA),建立了更严格的漂移信号分解规则,通过理论分析和测试证明了其方法的有效性。这些方法普遍存在着一些缺陷,如 PCA 及其变种都建立在传感器漂移的先验经验假设,ICA 法依赖的参考向量选取依据同样来源于先验信息,但现实中的漂移具有无规律性、多方向性等特点,使得漂移先验规律很难被把握。

随着机器学习和深度学习^[14-18]的发展,通过建立直接匹配的气体识别模型来降低漂移的影响,成为近年来的研究热点。Rumelhart 等^[19]建立了基于反向传播神经网络(back propagation neural network, BPNN)电子鼻气体识别模型;潘铭津等^[17]则使用卷积神经网络(convolution neural network, CNN)来进行室内有害气体的识别。然而,这些方法是直接将机器学习模型应用到电子鼻中,尽管能够获得较好的测试精度,但并未真正考虑电子鼻内在的漂移问题。Zuppa 等^[20]则采用了多重自组织神经网络(multiple self-organizing maps, MSOM)模型,该法无需完整的漂移先验信息,可通过自组织网络的重训练对含有漂移的传感器输出进行补偿;刘涛等^[21]则在此基础上,提出了增量重训练的方式来改善重训练过程中漂移信息获取的公平性,进而增强 MSOM 的漂移补偿能力,提高了识别准确率。Alexander 等^[18]首次建立了一个 3 年期的电子鼻数据集,提出了基于集成学习(ensemble learning)的方法,并与支持向量机、主成分等方法进行了对比测试,集成分类模型较一般的分类器显示出优异的性能,特别是较长周期的漂移抑制方面,其预测精度提升了 20%~40%。Tao 等^[22]还提出了一种基于核变换的域矫正法,通过已漂移数据和未漂移数据分别建立源域和目标域以实现跨域学习,通过域矫正方式缓解了电子鼻漂移问题。尽管上述这些方法并不依赖于先验经验的假设,所采用的神经网络均可通过调整神经元权重来跟踪获取一定的内在漂移规律;但当面对长周期和大样本的数据时,新样本的增加会额外带来复杂的漂移特征,仅仅依靠神经元自主调节,并没有从根本上减少漂移量对电子鼻的影响,例如域矫正学习法涉及大量复杂的矩阵运算,会导致模型过拟合的发生,降低了模型的适用性和稳定性。

为解决上述问题,本文提出了一种增强卷积神经网络

(augmented convolution neural network, ACNN)的漂移抑制方法。该方法以 CNN 的强大特征提取器为基础,利用数据增强技术解决大样本、长周期数据的内在漂移特征跟踪和数据更新问题,利用外部增量补偿模块结合 CNN 内部神经元调节的模型增强方式来改善整体网络性能。研究分别在公开数据库和实测数据库进行了测试,结果表明,ACNN 方法具有较好的稳定性和漂移跟踪准确性,有效解决了长期漂移导致电子鼻识别精度差的问题,提升了电子鼻模型漂移抑制能力。

1 原理与方法

1.1 CNN 结构与原理

CNN 一般由包含输入层、卷积层、池化层、全连接层以及输出层组成的神经网络架构,如图 1 所示。

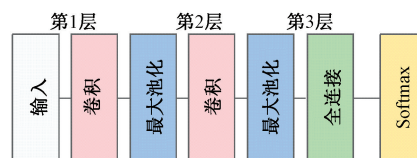


图 1 卷积神经网络架构

Fig. 1 Convolution neural network architecture

卷积层:卷积操作的本质是对两个矩阵进行元素点乘求和的数学操作,如式(1)所示。其中一个矩阵为输入的数据矩阵,另一个矩阵则为卷积核(称之为滤波器或特征矩阵),卷积后的结果即为原始输入中提取的特定局部特征信息。

$$M_{i,j} = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n X_{i,j} * W_{i,j}^l + b^l, l \in Z \quad (1)$$

式中: i, j 代表二维矩阵的维度; l 为卷积核数量; $M_{i,j}$ 代表 i 行 j 列元素组成的特征图; $X_{i,j}$ 代表输入数据的样本集 $\{x_1, x_2, \dots, x_{\max\{i,j\}}\}$ 在第 i 行 j 列的数; $W_{i,j}^l$ 代表第 l 个卷积核在第 i 行 j 列的元素; b 代表偏置; $*$ 代表卷积运算。

池化层:池化层又称为下采样层,池化本质是对感受野区域进行特征筛选,将一个大的二维矩阵下采样为一个小的二维矩阵,提取高维度、大样本的重要特征,大大降低网络训练的参数量。池化方式可分为最大池化和平均池化,通常选用最大池化来提取感受野区域中最大特征值作为输出结果。

全连接层:将卷积、池化层中具有类别区分性的局部特征图组合成一个能够反映全局信息的图,最后通过输出层输出分类结果。

CNN 本质上是一个输入到输出的映射,它能够学习大量输入与输出的映射关系,避免了显式的特征抽取,而隐式地从训练数据中进行学习,这也是 CNN 应用于电子

鼻长期漂移抑制的一大优势。

1.2 电子鼻 CNN 模型的局限性

在漂移信号较少的情况下, CNN 通过多次卷积和池化操作对数据样本进行降维, 并调整神经元权重将漂移信号从样本中剔除, 保留有用的样本信息。然而电子鼻数据集通常是时间序列信号的集合, 不同时间点的数据分布、响应曲线存在差异, 这就增加了电子鼻漂移信号的多方向性, 通常电子鼻漂移主要体现在以下两个方面:

1) 数据漂移

常规 CNN 算法的建模一般选取当前 (batch1) 批次数据进行模型的训练; 建立的模型依次在后来的数据集上进行实测验证。由于新数据在分布、样本信息上都是独立的个体, 因此该方法所搭建的模型仅仅对当前批次 (batch1) 具备较好的精度, 随着时间的推移, 模型难以适应新数据的漂移规律, 精度就不可避免的出现断崖式下降。

2) 模型漂移

常规 CNN 处理高维特征、多类别的大样本电子鼻数据集, 仅仅依赖神经元内部调节会丢失先验漂移信息, 使得网络丧失追踪气体漂移的能力。如式 (3) 所示, 调整结果 $Out_old_{i,j}$ 跟神经元权值 W 的调整呈正比例关系, 通过减小神经元权值来减弱漂移对结果的影响, 但随着漂移量的增加, 神经元的调节逐渐丧失先验漂移信息, 导致神经元内部调节无法满足模型精度的要求。

$$M_{old_{i,j}} = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n (X)_{i,j} + \tau_{i,j} * W'_{i,j} + b' \quad (2)$$

$$Out_old_{i,j} = f(M_{old_{i,j}}) \quad (3)$$

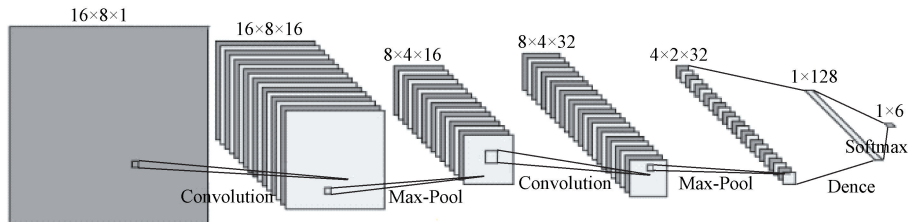


图 2 ACNN 架构

Fig. 2 ACNN architecture

1) 数据增强

首先, 使用 batch1 数据训练一个模型 1, 调整神经网络参数使模型处于最佳拟合状态; 然后, 将 batch2 送入训练好的模型 1 中, 新数据的输入使模型 1 不断地调整神经元权重, 直至模型适应新数据的漂移规律为止, 并生成模型 2; 最后, 按照图 3 所示方式将新输入数据依次送入到训练好的模型中。新数据多次叠加形成了数据增强, 数据增强的使用能够有效的减轻模型过拟合现象。

2) 模型增强

模型增强主要体现在增量学习的训练思维, 新旧模

式中: $\tau_{i,j}$ 代表噪声的漂移信号; $f(\dots)$ 代表经过激活函数、池化等操作合集; $M_{old_{i,j}}$ 代表有噪情况下的特征图层, $Out_old_{i,j}$ 代表样本在有噪情况下的输出结果。

3) 数据维度

通常电子鼻数据 X' 是时间序列的排列方式, 一次采样获取一个时间序列 $\{t_1, t_2, \dots, t_k\}$, 为一个一维向量, 对应一个样本标签 Y' , 可记为 $\{X', Y'\}$ 。鉴于此, 电子鼻数据的 CNN/ACNN 模型还存在以下问题: (1) 将电子鼻直接采用一维向量处理的方式不符合 CNN 的输入矩阵特性, 也不符合电子鼻数据采样/气体识别的单一样本的周期性特征; (2) 若强行将电子鼻数据按照 CNN 输入格式进行训练, 尽管也可能获得一定的结果, 但 CNN 计算结果与输入数据维度的不一致, 会使得训练过程中数据与标签不对应, 缺乏合理的解释性。

1.3 基于 ACNN 的电子鼻模型及方法

针对上述问题, 本文提出了 ACNN 的漂移抑制算法, 从数据增强和模型增强两个方面进行改进提升, 同时给出了合适的特征变换方法。首先将电子鼻数据 $\{X', Y'\}$ 依次进行数据变换; 其次, 将新数据逐批加入到旧训练集中, 起到数据增强的效果; 其次, 在模型的训练方式上, 在原始 CNN 模型基础上采用增量学习^[23-25]训练思维, 并添加增量补偿模块。ACNN 通过神经元的内部调节+增量补偿外部调节共同作用, 起到了模型增强的效果。

根据电子鼻数据信号特征, 本文采用的 ACNN 网络架构包含 2 个卷积层、2 个池化层、1 个全连接层和 1 个分类层, 如图 2 所示。

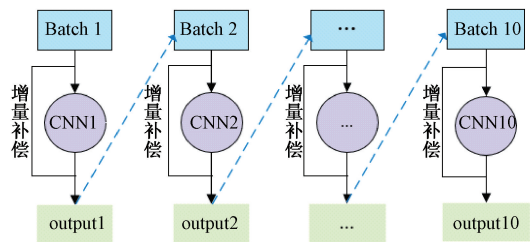


图 3 增量学习

Fig. 3 Incremental learning

型之间存在着依次递进的关系,新模型在保留旧模型历史信息之上,动态调整神经元权值以适应新输入数据的漂移规律,满足实时性要求。此外,为了进一步减弱漂移信号对模型的影响,本文加设增量补偿模块进行外部漂移补偿,其计算过程为:

(1) 新样本的输入信号 $X_{i,j}$ 和先验信息 $X_{o,p}$ 进行作差,得到信号的漂移量 Δw ,通常初始先验信息库为首次输入的样本矩阵。电子鼻的漂移信息按照式(4)更新:

$$w = X_{i,j} - X_{o,p} \quad (4)$$

式中: i,j 代表电子鼻输入数据的行索引和列索引; o,p 代表先验信息库的行索引和列索引。

(2) 引入调节系数 σ 和微调系数 β ,将调节系数和微调系数初始化到 $(0,1)$ 范围内,微调系数 β 会根据迭代误差 ε 进行调整, σ 参数按照式(5)~(7)更新:

$$\varepsilon = Y_{\text{true}} - Y_{\text{pred}} \quad (5)$$

$$\beta = -(\varepsilon + 1) \log\left(1 - \frac{1}{\varepsilon + 1}\right) \quad (6)$$

$$\sigma = \sigma + \beta\varepsilon \quad (7)$$

式中: $Y_{\text{true}}, Y_{\text{pred}}$ 分别为电子鼻输入数据的真实标签与预测标签矩阵。

(3) 引入 ϕ_{ij}^l 增量补偿矩阵,补偿公式如下所示:

$$\phi_{ij}^l = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n W_{i,j}^l * \sigma * \Delta w \quad (8)$$

式中: m,n 代表电子鼻数据的行(二维矩阵长)和列(二维矩阵宽); l 为卷积核数量。

(4) 补偿结果输出为:

$$M_{\text{new } i,j} = M_{\text{old } i,j} + \phi_{ij}^l \quad (9)$$

$$\text{out}_{i,j} = f(M_{\text{new } i,j}) \quad (10)$$

结合公式和图4所示模块,先验信息库和调节系数 σ 会随着模型训练自动更新。若实际值和预测值的差值 ε 较大,可通过系数 β 的微调促使系数 σ 的增加,进而提高了漂移量信息的补偿。

与常规 CNN 神经元调整只能作用于内部调节相比,ACNN 通过神经元权重的内部调整和增量补偿模块的外部补偿共同作用,使得模型随着新数据的输入不停的动态更新,不仅具有较强的实时性,且外部增量模块较内部神经元调整有着可控范围广、灵活性好等优势,二者的结合有助于提升模型鲁棒性和漂移跟踪准确性。

3) 特征变换

为了解决数据维度不一致的问题,特别是在长周期数据的漂移抑制过程中,应用 ACNN 时还需对电子鼻样本进行特征变换,从而保证了单个样本的完整性,实现过程如图5所示。

由图5可知,传感器单样本的采样过程中会生成 k 个数据点,按照时间顺序排列成一维向量;一维向量按照顺序,进行离散取样进而转换为数据矩阵。特征变换不

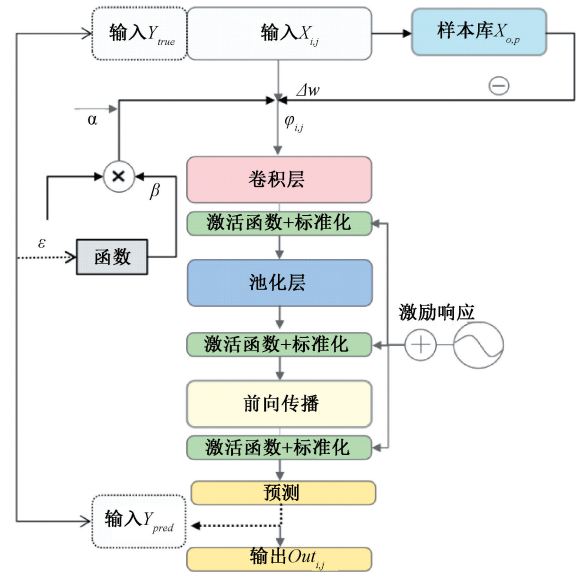


图4 增量补偿模块

Fig. 4 Incremental compensation

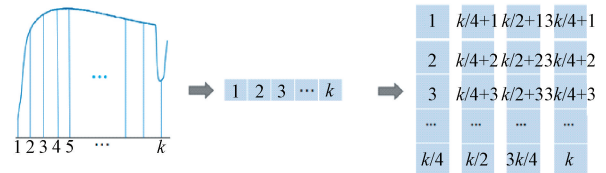


图5 特征变换

Fig. 5 Feature transformation

仅满足了模型输入的格式要求,将一维向量矩阵化的同时,保留了样本的周期性特征,还增加了数据的稀疏性,有利于标签和数据的依次对应关系,减少了模型的复杂度。

2 实验与数据

2.1 数据集

实验采用了实测数据集和公开数据集来验证 ACNN 模型的漂移抑制效果。

Case1-公开数据集

采用文献[18]中的一个公开于 UCI Machine Learning Repository 数据库中的数据集进行测试,该数据集耗时3年收集了13910个样本,采集了包含丙酮、乙醇、乙醛、乙烯、氨气以及甲苯在内的6种类别的分析物,如表1所示。表2所示为按照时间进行的数据集批次排列,选取第1个批次的样本作为训练集和验证集(比例9:1),剩余样本按照批次顺序划分为不同的测试集。由表1和表2可知,不同样本间的样本分布较均匀,有助于

分类任务的进行;不同批次的数据划分,有助于验证模型的漂移抑制效果。

表 1 样本分布
Table 1 Sample distribution

气体名称	标准检测范围/ppm	样本量
氨气	50~1 000	1 641
乙醛	5~500	1 936
丙酮	12~1 000	3 009
乙烯	10~300	2 926
乙醇	10~600	2 565
甲苯	10~100	1 833

表 2 批次划分
Table 2 Batch division

批次	月份	样本量
1	1~2	445
2	3~10	1 244
3	11~13	1 586
4	14~15	161
5	16	197
6	17~20	2 300
7	21	3 613
8	22~23	294
9	24~30	470
10	36	3 600

Case2-实测数据集

实验采用自行搭建的电子鼻系统测试平台,该平台采用了 6 种传感器组成了传感器阵列,分别为:TGS2620、TGS2602、VOC 传感器、甲醛 (Formaldehyde) 传感器、丙酮 (Acetone) 传感器、H₂ 传感器,其中每个传感器内部集成两个气体敏感单元,共 12 路信号输出。图 6 给出了传感器响应的周期变化过程测试示例,包含通气阶段(4 min 上升)和响应阶段(2 min 下降)。长周期数据采集进行了正丁醇、丙酮、VOC、二甲苯 4 种气体的采样,在 3 个多月的时间内共连续收集到 3 800 组样本,同样按照文献[18]的方式分别提取了 2 个稳态特征和 3 个瞬态特征,每一组样本有 60 个特征(3 800×60)。表 3 所示未数据集样本分布统计,表 4 所示为 10 个数据集批次的划分,选取第 1 个批次的样本作为训练集和验证集(比例 9:1),剩余 9 个批次按照顺序作为不同的测试集。

2.2 数据预处理

数据标准化:样本数据涉及到不同种类和浓度的气体,为了减小不同样本之间的差异性,需对原始数据集进

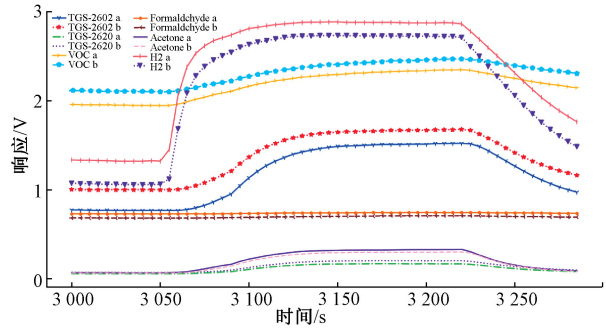


图 6 数据集收集

Fig. 6 Dataset collection

表 3 样本分布

Table 3 Sample distribution

气体名称	标准检测范围/ppm	样本量
正丁醇	1~30	648
二甲苯	50~5 000	1 023
VOC	0~100	962
丙酮	0.1~5	1 167

表 4 批次划分

Table 4 Batch division

批次	天数	样本量
1	1~12	213
2	13~24	302
3	25~36	107
4	37~48	500
5	49~60	397
6	61~72	471
7	73~84	600
8	85~96	342
9	97~108	400
10	109~120	468

行标准化处理,本文采用 Min-Max 标准化方法:

$$X_{\text{normal}} = \frac{X - X_{\min}}{X_{\max} - X_{\min}} \quad (11)$$

式中: X 为数据集所有特征; X_{\min} 代表所有特征的最小值; X_{\max} 表示所有特征的最大值。式(11) 可将原始值 X 映射成在特定区间的标准值 X_{normal} , 保证每个数据特征量纲相同。

输入特征变换:为了满足 ACNN 模型数据格式的输入要求,按照 1.2 节中 3) 的方法将电子鼻每个样本的 1×60 的特征向量依次转换成 6×10 的矩阵,即全部数据输入为 3 800×6×10。由于 CNN 具有特征尺度不变性特

点,因此特征矩阵的具体形状不会对识别精度产生影响,转换过程如图7所示。

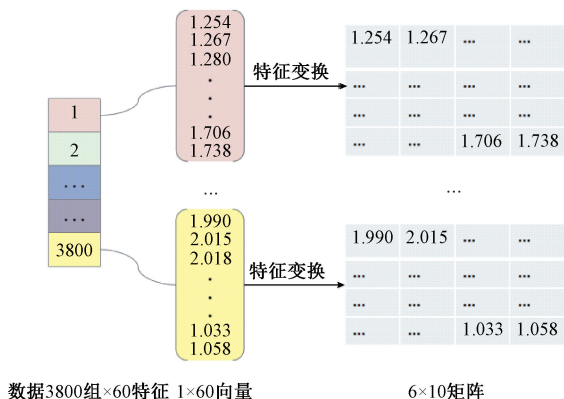


图7 特征转换
Fig. 7 Feature conversion

2.3 测试平台

实验采用一块 GTX 1060Ti 图形处理器的便携式计算机平台,内存 RAM 6.0 GB,通过基于 Tensorflow 后台的 keras 环境来进行 ACNN 网络的构建,网络训练采用下降速度最快、效果最好的 Adam 优化器,激活函数选取常规的 Relu 激活函数,评价指标使用准确率,损失函数 L

采用交叉熵损失。

$$L = - \sum_{c=1}^M y_c \log(p_c) \quad (12)$$

式中: y_c 代表指示变量,若当前类别和样本类别一致则为1,反之则为0; p_c 是样本属于 c 的预测概率; M 代表类别标签数量。

3 结果分析

3.1 Case1 案例分析

1) 数据分析

为了观察预处理后的效果,选取样本的前4列数据(2个传感器)进行可视化分析,如图8和9所示。其中,1~4代表传感器编号,横、纵坐标代表传感器信号的响应,不同形状代表不同的类别(气体),对角线上是各个属性的分布,而非对角线上是两个不同属性之间的相关图。由图8和9可观测到:(1)相同传感器(1号和2号、3号和4号)之间表现为正相关性,说明传感器的良好性能;(2)不同传感器(1号和3号、2号和4号)之间表现为差异性,有利于分类器区分不同样本类别;(3)原始数据集区间 $[0, 600\ 000]$ 经过预处理后的分布区间为 $[0, 5]$,数据范围的缩小有利于加速网络的收敛。

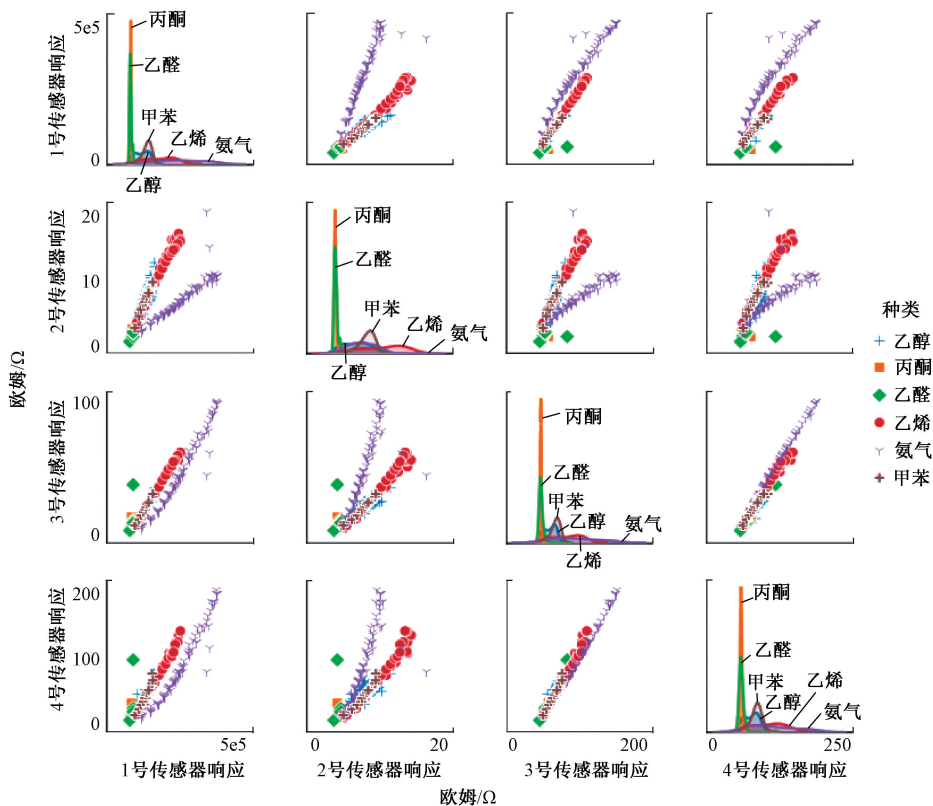


图8 原始数据
Fig. 8 Original dataset

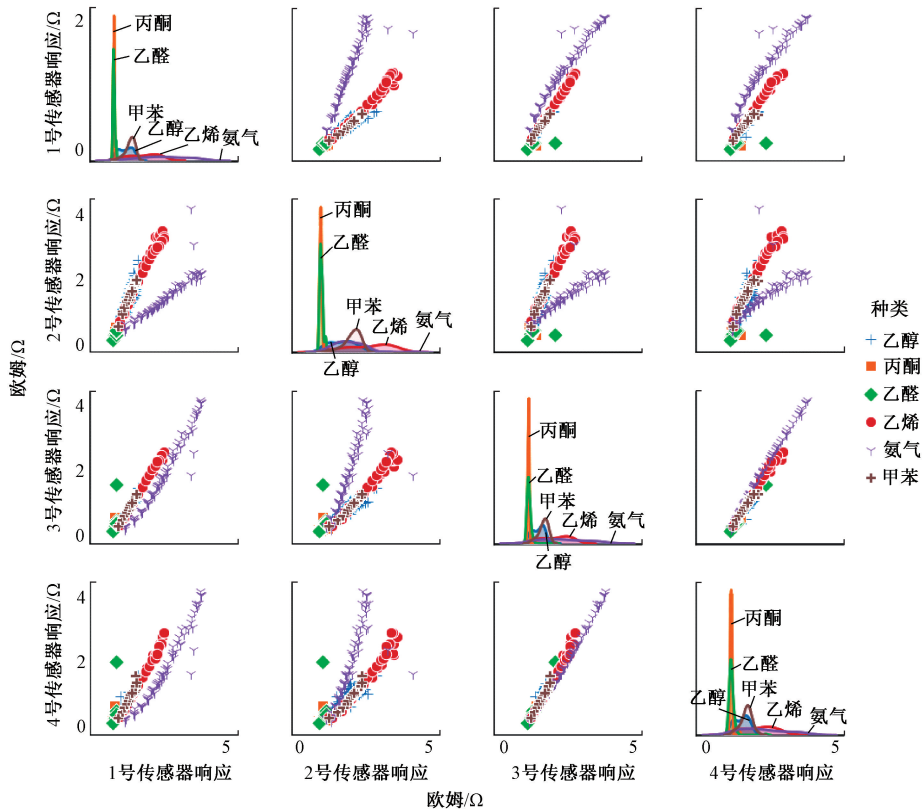


图 9 预处理后数据

Fig. 9 Preprocessed dataset

2) 模型分析

数据分析验证了电子鼻数据集的质量,为后面进行模型训练奠定条件。图 10 所示为公开数据集分别在 CNN 和 ACNN 的模型训练过程,可见收敛效果较好。将模型未接触的测试数据输入到训练好的 CNN 和 ACNN 模型中,图 11 所示为分别得到两个模型的识别准确率对比。可观测到,原始 CNN 模型在前 5 个批次的预测基本

维持在 70% 以上,最后一个批次的预测结果产生了急速下滑,准确率跌至 40%。主要原因在于信号漂移会随时间推移而发生变化,新样本的漂移规律并没有被模型所学习,导致模型无法对新样本进行漂移补偿,这也验证了常规 CNN 直接应用的局限性。由于 ACNN 结合了历史数据,并使用增量补偿进行信号的漂移抑制,效果较好。其中最后一个批次上的预测结果最具代表性,改进前后的预测精度相差了近 30%。

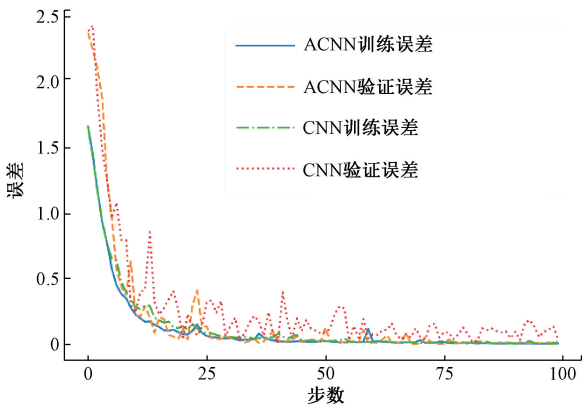


图 10 Loss 曲线

Fig. 10 Loss curve

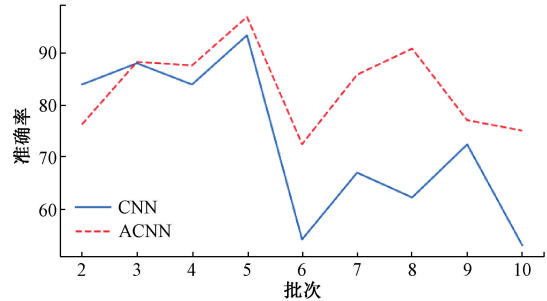


图 11 准确率

Fig. 11 Accuracy

另外,从实用型角度出发,漂移补偿应该考虑实时性要求。表 5 所示为平均消耗时间和最大消耗时间,结果

可知,由于考虑了数据增强和增量补偿,尽管 ACNN 时间消耗相比于 CNN 略有增加,但消耗时间总体比较接近,均可满足电子鼻应用需求。

表 5 时间消耗

Table 5 Time consumption

时间消耗	CNN	ACNN
平均时间消耗	50.49	64.55
最大时间消耗	58.76	70.25

3.2 Case2 案例分析

1) 数据分析

按照 3.1 节中 1) 的方式同样对实测数据集进行可视化分析,如图 12 和 13 所示,除去与图 8 和图 9 相似结论之外,两者也有所差别:(1) 从非对角线看,实测不同气体之间的界限更加明显,有助于分类器更好的漂移跟踪识别。(2) 从对角线看,不同气体之间的分布重叠区域较少,说明交叉干扰更少,类别之间区分度较高,有助于验证本文方法的有效性。

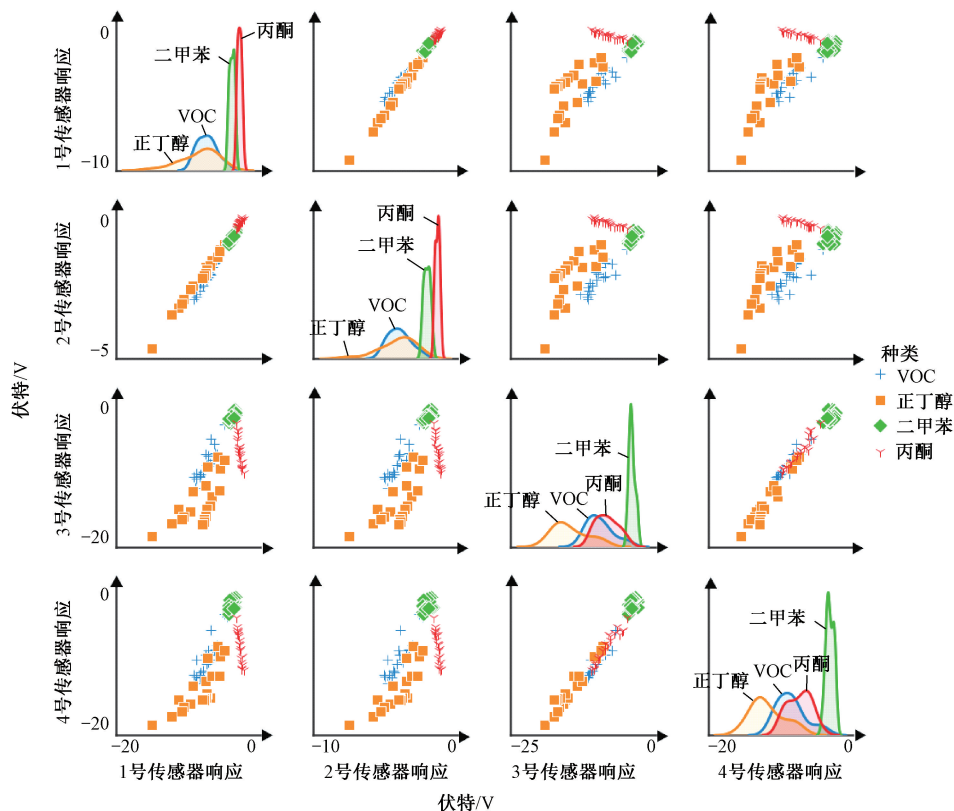


图 12 原始数据

Fig. 12 Original dataset

2) 模型分析

同理,按照 3.1 节中 2) 的方式对实测数据集进行测试和分析。图 14 和图 15 所示为模型的训练结果,可知: ACNN 和 CNN 训练集和验证集收敛性很小,损失收敛于很小的值,准确率接近 100%,说明模型的偏差很小;并且准确率值所对应曲线几乎吻合,说明模型的方差也较小。它们表明了两个模型均处于较优的拟合状态。时间消耗方面,尽管 ACNN 模型在时间步长为 80 时才逐渐稳定,收敛速度相对 CNN 慢点,但并不影响实时性要求。

为了进一步验证本文模型的漂移抑制效果,这里还选取了支持向量机(SVM)、集成分类(Ensemble)、CNN 3 种漂移抑制算法与 ACNN 算法进行比较和验证,结果如

图 16 所示。可观测到,随着较长周期的时间推移,传感器测量不断漂移,传统机器学习(SVM、Ensemble)和常规 CNN 算法由于没有很好的考虑数据的漂移特性,它们的预测精度逐渐降低,例如 CNN 在 3 个月的时间内准确率下降了 8%;而 ACNN 算法在较长周期的数据测试中精度损失非常少(不到 1%),这是因为 ACNN 根据历史数据漂移特性,增加了增量补偿模块来克服漂移对预测精度的影响。

另外还可观测到,在较短时间(≤batch5),SVM 性能低于其他 3 种模型,Ensemble 和 CNN 以及 ACNN 精度接近,此时气敏传感器漂移较小,对预测精度的影响不大,预测精度都在 96% 以上。随着时间的推移(batch10)

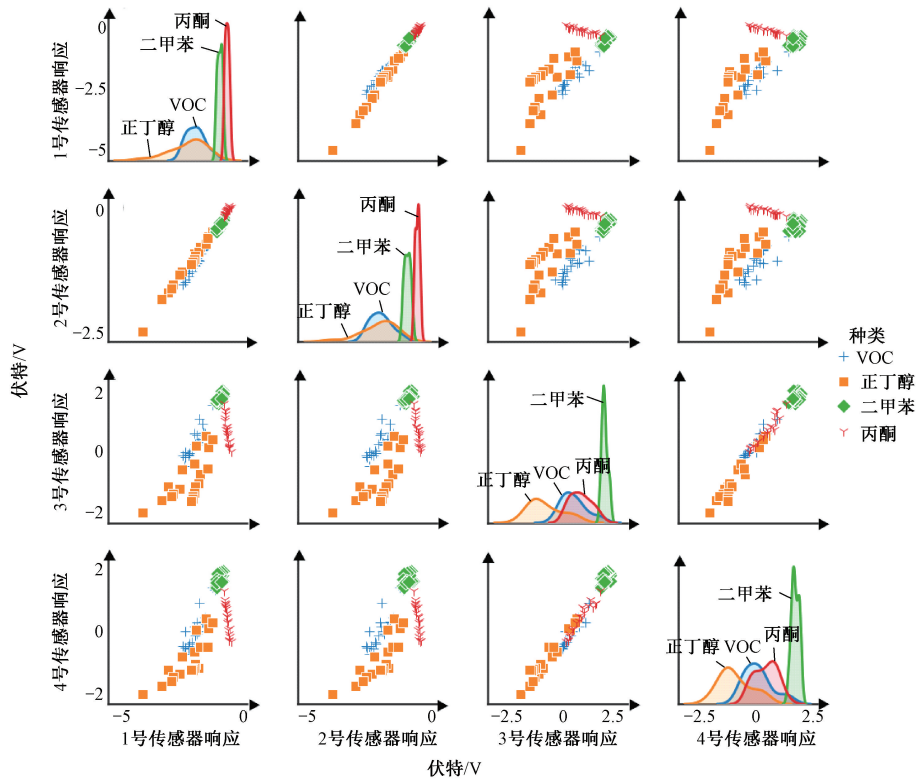


图 13 预处理后数据

Fig. 13 Preprocessed dataset

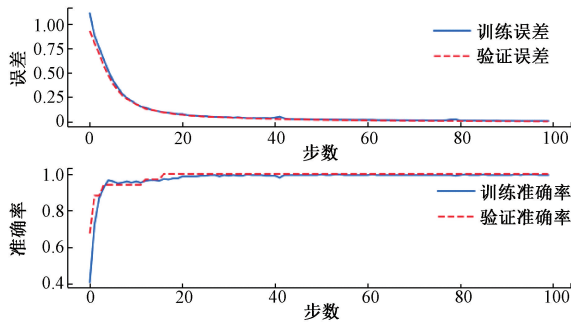


图 14 CNN 训练过程

Fig. 14 CNN training process

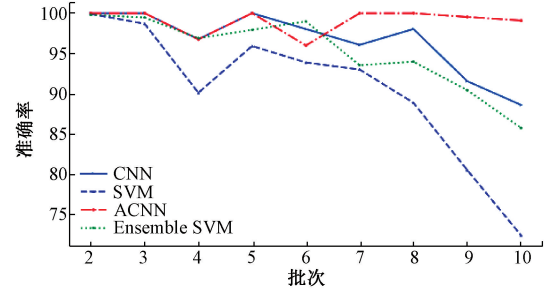


图 16 算法对比

Fig. 16 Algorithm comparison

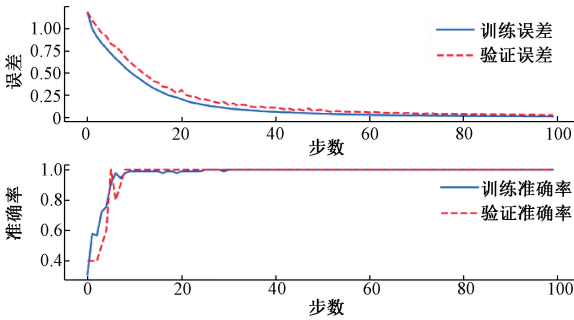


图 15 ACNN 训练过程

Fig. 15 ACNN training process

和传感器漂移的逐渐增大,ACNN 相对于其他 3 种模型展现了极大优势,整体精度提高了 10%~20%。

4 结 论

在电子鼻的漂移补偿问题上,传统的机器学习和 CNN 模型在长期漂移的处理方式上存在着一些局限性。本文提出的 ACNN 算法通过数据增强与模型增强可以剔除大多数信号漂移量,保留样本中 useful 信息。其创新性在于:1) 数据增强,基于历史数据思维增加训练样本的数据量,能够有效的防止模型出现过拟合现象;此外,新增

加的数据会额外带来噪声/漂移量,有助于提升模型的鲁棒性;2)模型增强,增加漂移信号的外部补偿方式,较神经元的内部调节更加灵活、高效,有助于进一步削弱漂移信号的影响;3)增量学习训练思维,避免了新样本输入时重新训练模型的必要性,节约模型的训练时间。通过公开数据集和测试数据集的实验表明,ACNN 可以提高模型的预测准确性和鲁棒性,准确率较 CNN 和机器学习方法提升了 10%~20%,且准确率的波动稳定在 1% 范围内,克服了传统模型的局限性,提升了神经网络对电子鼻传感器漂移的抑制效果。

致谢

本文得到国家自然科学基金国际合作和交流项目(通过呼气分析快速准确检测 COVID 的新技术研究, No. 82061138004)的资助,感谢安徽六维科技有限公司技术团队对硬件的大力支持。

参考文献

- [1] HOSFIELD B D, PECORARO A R, BAXTER N T, et al. The assessment of fecal volatile organic compounds in healthy infants: Electronic nose device predicts patient demographics and microbial enterotype [J]. *Journal of Surgical Research*, 2020, 254: 340-347.
- [2] YIN X, ZHANG L, TIAN F C, et al. Temperature modulated gas sensing E-nose system for low-cost and fast detection [J]. *IEEE Sensors Journal*, 2015, 16 (2): 464-474.
- [3] ABDELKHALEK M, ALAFAYAD S, BENOUEZDOU F, et al. Compact and embedded electronic nose for volatile and non-volatile odor classification for robot applications [J]. *IEEE Access*, 2019(7): 98267-98276.
- [4] 王敏, 高凡, 张钧煜, 等. 基于智能电子鼻的冰箱冷藏食品新鲜度原位检测技术 [J]. *传感技术学报*, 2019, 32(2): 5-10.
- WANG M, GAO F, ZHANG J Y, et al. In-situ detection technology of refrigerator food freshness based on smart electronic nose [J]. *Journal of Sensor Technology*, 2019, 32(2): 5-10.
- [5] VOSS H G J, AYUB R A, STEVAN S L. The E-nose prototype to monitoring the growth and maturation of peaches in the orchard [J]. *IEEE Sensors Journal*, 2020, DOI:10.1109/JSEN.2020.3000070.
- [6] GUO T, ZHUANG L, QIN Z, et al. Multi-odor discrimination by a novel bio-hybrid sensing preserving rat's intact smell perception in vivo [J]. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2016, 225: 34-41.
- [7] 刘涛, 黄智勇. 用于气敏传感器漂移补偿的数据选择方法 [J]. *重庆大学学报*, 2013(4): 75-79.
- LIU T, HHUANG ZH Y. Data selection method for drift compensation of gas sensor [J]. *Journal of Chongqing University*, 2013(4): 75-79.
- [8] TAO Y, LI C, LIANG Z, et al. Wasserstein distance learns domain invariant feature representations for drift compensation of E-nose [J]. *Sensors*, 2019, 19 (17): 3703.
- [9] HOLMBERG M, WINQUIST F, LUNDSTRO M I, et al. Drift counteraction for an electronic nose [J]. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 1996, 36(1-3):528-535.
- [10] 殷勇, 吴文凯, 于慧春. 独立分量分析融合小波能量阈值的电子鼻信号去漂移方法 [J]. *农业工程学报*, 2014, 30(24):325-331.
- YIN Y, WU W K, YU H CH. Electronic nose signal drift removal method based on independent component analysis and wavelet energy threshold [J]. *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering*, 2014, 30(24):325-331.
- [11] ZIYATDINOV A, MARCO S, CHAUDRY A, et al. Drift compensation of gas sensor array data by common principal component analysis [J]. *Sensors & Actuators B Chemical*, 2011, 146(2):460-465.
- [12] ARTURSSON T, EKLOV T, LUNDSTROM I, et al. Drift correction for gas sensors using multivariate methods [J]. *Journal of Chemometrics*, 2015, 14(5-6): 711-723.
- [13] CAI X, WANG X, HUANG Z, et al. Performance analysis of ICA in sensor array [J]. *Sensors*, 2016, 16(5): 637.
- [14] CORTES C, VAPNIK V. Support-vector networks [J]. *Machine Learning*, 1995, 20(3): 273-297.
- [15] XU M, WANG J, ZHU L. Tea quality evaluation by applying e-nose combined with chemometrics methods [J]. *Journal of Food Science and Technology*, 2020, DOI: 10.1007/s13197-020-04667-0.
- [16] HE A X, YU J, WEI G F, et al. Short-time Fourier transform and decision tree-based pattern recognition for gas identification using temperature modulated microhotplate gas sensors [J]. *Journal of Sensors*, 2016, DOI:10.1155/2016/7603931.
- [17] 潘铭津, 何家峰, 骆德汉. 一种基于仿生嗅觉的室内有害气体成分识别方法 [J]. *信息技术与网络安全*, 2019, 38(12):48-51.
- PAN M J, HE J F, LUO D H. A method for identifying indoor harmful gas components based on bionic smell [J]. *Information Technology and Network Security*, 2019, 38(12): 48-51.
- [18] ALEXANDER V, VEMBU S, AYHAN T, et al. Chemical gas sensor drift compensation using classifier ensembles [J]. *Sensors and Actuators B: Chemical*,

2012(166-167): 320-329.

- [19] RUMELHART D E, HINTON G E, WILLIAMS R J. Learning representations by back-propagating errors [J]. *Nature*, 1986, 323(6088):533-536.
- [20] ZUPPA M, DISTANTE C, SICILIANO P, et al. Drift counteraction with multiple self-organising maps for an electronic nose [J]. *Sensors & Actuators B Chemical*, 2004, 98(2-3):305-317.
- [21] 刘涛, 黄智勇. 一种基于多重自组织图的电子鼻漂移抑制方法 [J]. *仪器仪表学报*, 2012, 33(6): 1287-1292.
LIU T, HUANG ZH Y. An electronic nose drift suppression method based on multiple self-organizing maps [J]. *Chinese Journal of Scientific Instrument*, 2012, 33(6): 1287-1292.
- [22] TAO Y, XU J, LIANG ZH F, et al. Domain correction based on kernel transformation for drift compensation in the e-nose system [J]. *Sensors*, 2018, DOI: 10.3390/s18103209.
- [23] 萧嵘, 王继成, 孙正兴, 等. 一种 SVM 增量学习算法 [J]. *南京大学学报(自然科学)*, 2002(2): 152-157.
XIAO R, WANG J CH, SUN ZH X, et al. A SVM incremental learning algorithm [J]. *Journal of Nanjing University (Natural Science)*, 2002(2): 152-157.
- [24] CHEFROUR A, SOUICI-MESLATI L, DIFI I, et al. A novel incremental learning algorithm based on incremental vector support machina and incremental neural network learn++ [J]. *Revue d'Intelligence Artificielle*, 2019, DOI:10.18280/ria.330303.
- [25] REŽÁKOVÁ M, TENCER L, CHERIET M. Incremental similarity for real-time on-line incremental learning systems [J]. *Pattern Recognition Letters*, 2016, 74: 61-67.

作者简介



冯李航, 2017 年于东南大学获得博士学位, 现为南京工业大学讲师。主要研究方向为机器感知技术。

E-mail: fenglihang330@163.com

Feng Lihang received his Ph. D. degree from Southeast University in 2017. He is currently a lecturer at Nanjing Tech University. His research interests include sensor technology and robotics.



陈铭, 2018 年于扬州大学获得学士学位, 现为南京工业大学硕士研究生, 主要研究方向为模式识别与电子鼻技术。

E-mail: 2277621339@qq.com

Chen Ming received his B. Sc. degree from Yangzhou University in 2018. He is currently a master student at Nanjing Tech University. His research interests include pattern recognition and machine olfaction.



章伟(通信作者), 1996 年于英国伦敦大学获得博士学位, 长江学者特聘教授, 千人计划, 南京工业大学教授, 合肥工业大学教授, 主要研究方向为微纳传感器, 气体环境检测以及疾病早期诊断等。

E-mail: zhangw@hfut.edu.cn

Zhang Wei (Corresponding author) received his Ph. D. degree from University of London in 1996. He is a distinguished professor of Changjiang Scholar and the Thousand Talent Program at Nanjing Tech University. He is currently a professor at Hefei University of technology. His research interests include micro-nano sensor and its application in environmental detection and early diagnosis of disease.