

# 酒类鉴别的人工嗅觉技术研究

田先亮, 殷 勇\*, 刘红俊  
(河南科技大学机电学院, 河南 洛阳 471003)

**摘 要:** 简述了人工嗅觉酒类鉴别系统的原理、结构。给出了气敏传感器阵列的组成方法, 进行了气敏传感器温、湿度补偿。并运用主成分分析法和 BP 神经网络对试验结果进行了分析。鉴别实验研究表明, 经温、湿度补偿后该系统不仅能鉴别不同香型的白酒, 还能鉴别同一香型的白酒。

**关键词:** 酒类鉴别; 人工嗅觉系统; 主成分分析; 神经网络

## Research on Artificial Olfactory Sensor Technology for Liquor Identification

TIAN Xian-Liang, YIN Yong\*, LIU Hong-Jun  
(College of Mechanical Electrical Engineering, Henan Agricultural University, Luoyang 471003, China)

**Abstract:** Principle and construction of artificial olfactory sensor system have been briefed in this paper. The constituting method of sensor array was provided. The effects of the environmental temperature and humidity on the gas sensors were analyzed and compensated. The results of experiment were analyzed by using the principal component analysis(PCA) and back-propagation network techniques. The research results of identification experiment indicated that with the compensation of environmental temperature and humidity, the artificial olfactory system could recognize three different liquors precisely.

**Key words:** drink identification; artificial olfactory system; the principal component analysis; neural network

中图分类号: TP183

文献标识码: A

文章编号: 1002-6630(2004)02-0029-03

酒类食品的生产和消费在我国国民经济中占有十分重要的地位。酒类市场的混乱使得其质量鉴别倍受社会关注。目前, 酒类食品的质量主要靠人的感官来进行鉴别。但是, 人工鉴别带有很大的主观因素, 其评判结果存在相当大的个体差异, 即使是同一鉴别者也随其身体状态、情绪、环境的不同而产生不同的结果<sup>[1~4]</sup>。用分析化学的方法来鉴别酒类食品也是比较困难的。因为酒中的化学成分很多, 酒的质量是各种化学成分的综合反映, 完全测出这些成分不仅非常复杂, 而且要花费很多时间和费用。因此, 操作简单的酒类食品快速鉴别仪器或系统的研究就显得非常需要。

近年来, 由气敏传感器阵列结合模式识别技术构成的人工嗅觉系统(电子鼻)在食品行业中得到了广泛的应用。在酒类鉴别的应用研究方面也有报道<sup>[5~7]</sup>, 但是, 这些研究均未考虑环境对鉴别系统的影响, 不利于该系统的商品化。为此, 作者进行了 1 个月的间断性测试, 对气敏传感器的工作环境加以监测并对气敏传感器的响应信号进行了温、湿补偿, 研究结果表明, 考虑温、湿度影响的人工嗅觉系统可以较好地实现酒类质量的鉴别。

## 1 人工嗅觉系统

人工嗅觉系统的工作原理是建立在模拟生物嗅觉形成基础上, 主要有两大部分组成: 气敏传感器阵列和数据处理分析器。气敏传感器阵列在功能上相当于人的嗅觉感受细胞, 产生嗅感信号; 数据处理分析在功能上相当于人的大脑, 对嗅感信号具有分析、判断、智能解释的功能。气味分子被气敏传感器阵列所吸附, 产生信号。生成的信号经各种方法处理加工, 将处理后的信号经模式识别系统作出判断。

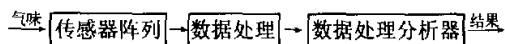


图1 人工嗅觉系统结构示意图

### 1.1 气敏传感器阵列

传感器阵列是人工嗅觉系统的硬件基础, 合适的阵列对提高整个系统的性能至关重要<sup>[8]</sup>。在人的嗅觉系统中, 一个嗅觉细胞能不同程度地对 10 多种不同的气味敏感, 显示出一种很宽的响应谱, 而系统的选择性是通过整合来自多个交叉敏感的嗅感细胞的信号得到的。已

收稿日期: 2003-05-16 \* 通讯联系人

基金项目: 河南省自然科学基金资助项目(004061100); 河南省教育厅自然科学基金资助项目

作者简介: 田先亮(1979-), 男, 在读硕士研究生, 研究方向为农产品、食品品质检测。

有的研究表明:酒所挥发出的气体中含有多种成分,影响其质量的化学成分还没有完全确定,一些微量或痕量成分可能对酒的质量会产生明显影响。因此,在构造传感器阵列时,应尽量使各气敏传感器有一定交叉敏感特性的同时,也应体现传感器自身的广谱响应特性<sup>[1]</sup>。这样不但降低了对传感器的选择性要求,还有利于提高阵列的效率。

选择了日本费加罗公司生产的TGS-800、TGS-812、TGS-813、TGS-821、TGS-822、TGS-824、TGS-825金属氧化物气敏传感器来组成初始阵列,最终阵列组成需经试验结果来定。金属氧化物气敏传感器具有选择性不太高、稳定性好、能耗小、寿命长、耐腐蚀性强等优点。但是,这类传感器同样对工作温度和湿度都很敏感。意味着它们的工作环境必须被理想地控制,或者加以监测以进行参数补偿<sup>[9]</sup>。

## 1.2 模式识别方法

在人工嗅觉鉴别系统中,常用的模式识别方法有统计模式识别方法和非统计识别的方法。前者常用的有主成分分析(PCA)、偏最小二乘法(PLS)和聚类分析(CA);后者常用的是人工神经网络(ANN)的方法。

主成分分析法又称降维映射法,作为有监督的线性分类方法在人工嗅觉系统研究中得到了广泛的应用。其原理是首先将特征向量分解成一组正交向量的线性组合,每个向量不同程度地说明原数据的变化<sup>[10]</sup>。选择几个向量的系数构成新的特征向量实现降维,这样就能将多维空间中的数据信息在低维空间中表征出来,所以可用于寻找能够反映被测对象特征的“再生”变量,进而用于模式识别。

人工神经网络是一种模仿人类大脑思维的仿生算法,具有如下特点:(1)既可模仿人的逻辑思维,又可模仿人的形象思维,是典型的非参数数据处理方法;(2)神经网络通过学习自动掌握和挖掘隐藏在事物内部的、不能用明确数学表达式表示的“灰箱”或“黑箱”关系,这与统计方法形成鲜明的对照。

在人工嗅觉系统中常用的神经网络有多层BP网络(back-propagation network)、RBF(ridial basis function)网络等。在实验中,使用了3层BP网络。图2给出了3层BP网络的结构示意图:

B-P网络是由非线性变换单元组成的前馈网络,它可以处理复杂的非线性问题。B-P网络的学习过程可分为输入正向传播和误差反向传播两个部分。当给定网络的一个输入模式时,它由输入层单元传到隐层单元,经隐层单元逐层处理后再送到输出层单元,由输出层单元处理后产生一个输出模式,这是一个逐层状态更新过程,称为输入正向传播。如果输出响应与期望输出模式有误差不能满足要求,那么就转入误差反向传播,将

误差值沿连接通路逐层传送并修正各层连接权值和阈值,直到误差满足要求才停止学习<sup>[11]</sup>。

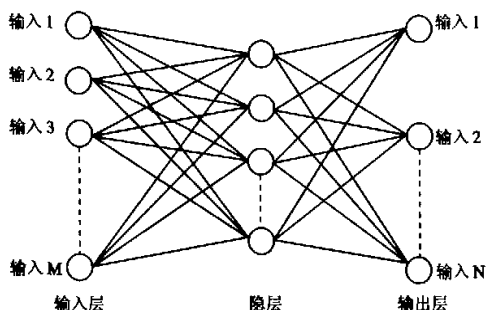


图2 三层B-P网络结构示意图

## 2 试验

### 2.1 材料

河南仰韶酒厂产仰韶精品酒(浓香型)、河南汝阳产杜康酒(浓香型)、北京产红星二锅头酒(清香型)。

### 2.2 取样方式

每种酒采用液体定量取样方式,取样量为5ml。试验共取得样本数为:3×30=90个,对应得到了各自的响应曲线,气敏传感器的响应曲线如图3所示:

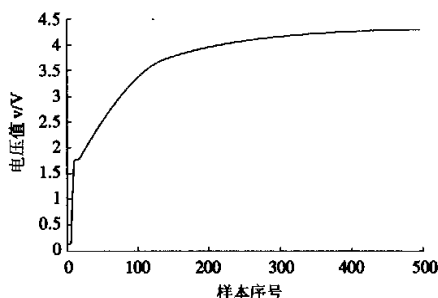


图3 气敏传感器的响应曲线

### 2.3 特征值提取

为了既充分又方便地提取响应曲线所包含的信息,提取每条曲线的平均微分值(Kave)作为特征。因为平均微分值反映了气敏传感器对酒气响应的平均速度。所以取平均微分值作为特征值是有物理意义的。

### 2.4 传感器阵列的最终确定

分别计算3种酒对7个传感器特征值的变异系数如表1所示:

从表1中可以发现,传感器TGS-821特征值的变异系数明显大于其它的传感器对应值的变异系数。这说明传感器TGS-821的响应信号离散程度较大,对进一步的数据处理将产生不良影响。因此,可把这个传感器从阵列中去掉。从剩余的6个传感器中任选4个或5个组

表1 7个传感器特征值的变异系数

	TGS-813	TGS-800	TGS-821	TGS-822	TGS-812	TGS-824	TGS-825
仰韶精品	0.0453	0.0369	0.1202	0.0181	0.0518	0.0542	0.0185
杜康	0.0471	0.0387	0.1179	0.0171	0.0537	0.0734	0.0200
红星二锅头	0.0503	0.0407	0.1341	0.0207	0.0580	0.0602	0.0214

成阵列,对其相应的特征值进行处理,发现4个或5个传感器组成的阵列不能很好的对3种酒进行有效的鉴别。这说明4个或5个传感器组成的阵列没有包含足够的分类信息。

综上所述,传感器的最终阵列是由TGS-813、TGS-800、TGS-812、TGS-822、TGS-824、TGS-825构成。

### 3 温、湿度补偿与实验结果

解决气敏传感器温、湿度效应的一种方法是保持不同数据样本间的实验条件相同(即温、湿度条件相同)这种方法应用于实验室是可行的,但是不具有实际上的工程价值,因为在实际应用中往往不能改变被分析气体的温度和湿度。本文介绍了两种基于知识的温湿度补偿方法:主要成分分析法和人工神经网络法。

(1)主成分分析法:在前面提取的6个平均微分值的基础上,加入每次实验的温、湿度值,那么对应每个样本,便得到了一个 $1 \times 8$ 的行向量构成了样本的“指纹”数据。这样经过主成分降维变换矩阵得到的数据就包含了传感器的环境变量。

用主成分分析法对所得的数据进行了分析时,为了消除不同量纲的影响,首先对数据进行了归一化处理。对于实验中的3种酒,样本协方差矩阵的特征值从大到小依次为: $\lambda_1=1.4780 \times 10^{-1}$ ,  $\lambda_2=3.6397 \times 10^{-2}$ ,  $\lambda_3=1.5311 \times 10^{-3}$ ,  $\lambda_4=1.2688 \times 10^{-3}$ ,  $\lambda_5=6.8967 \times 10^{-4}$ ,  $\lambda_6=5.0425 \times 10^{-5}$ ,  $\lambda_7=3.6349 \times 10^{-5}$ ,  $\lambda_8=2.0195 \times 10^{-5}$ 。对应的特征向量分别为: $\Phi_1$ 、 $\Phi_2$ 、 $\Phi_3$ 、 $\Phi_4$ 、 $\Phi_5$ 、 $\Phi_6$ 、 $\Phi_7$ 、 $\Phi_8$ 。计算各特征值的贡献率可以发现前两个特征值 $\lambda_1$ 、 $\lambda_2$ 的累积贡献率已经达到98.085%,为此特征向量降到二维,应用 $\Phi_1$ 、 $\Phi_2$ 构成降维变换矩阵,这样变换后可以保存足够的特征信息,但是降维后的分类结果却不理想,而根据Wilks准则<sup>[12]</sup>应该采用 $\Phi_4$ 、 $\Phi_5$ 构成变换矩阵降维后可正确分类。因为,主成分分析在计算协方差矩阵特征值的过程中消除了各维之间的相关性,并且为了尽可能完整地保存样本的特征信息而按照最小均方误差的准则进行降维,但降维后所保存下来的信息却不一定对分类最有用。而根据Wilks准则选择的特征向量则能保证所得信息对分类的优效作用。

图4为3种白酒样本未加入温湿度变量时经降维后的分布和分类情况。从图中可以看出在没有考虑传感器温湿度效应的情况下,3种白酒样本的分布是杂乱无章

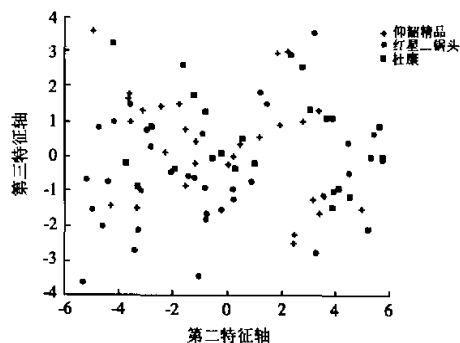


图4 未考虑温、湿度情况

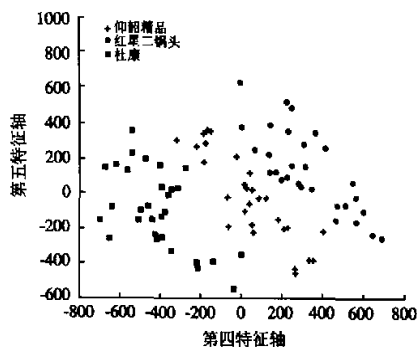


图5 考虑温、湿度情况

的根本无法分类。

图5为3种白酒样本在考虑传感器温湿度效应情况下经降维后的分布和分类情况。从图中可以看出3种白酒样本的分布规律能被完全的区分开来,正确分辨率能达到100%。

(2)人工神经网络法:BP网络能够通过学习已知样本而获得经验,从而对未知的样本作出判别。把环境的温、湿度与气敏传感器响应曲线特征值作为系统的并列输入,通过训练环境温、湿度对气敏传感器输出的影响反映在网络的连接权上。在实际的鉴别中,通过网络的学习环境温、湿度的影响被隐含地补偿掉,从而得到精确的分类信息。

因为特征向量是8维的,所以输入神经元为8个,输出神经元的个数为白酒的类别数3。经过计算试验,选择了拓扑结构为8-6-3的PB网络。隐层的传递函数采用tan-sigmoid型函数。选择 $3 \times 24-72$ 组样本作为网络

的训练集,训练样本应能覆盖整个湿度范围和温度范围。网络训练好以后,用 $3 \times 6=18$ 组样本进行了测试,结果如表2所示。在表2中所有的测试样本都得到了完全的鉴别。

表2 网络测试结果与期望值对比

样本编号	测试值			期望值
1	1.0026	-0.2150	0.2120	1 0 0
2	0.6596	-0.1361	0.4760	1 0 0
3	1.2536	-0.0484	-0.2053	1 0 0
4	1.0382	0.0725	-0.1102	1 0 0
5	1.4348	-0.1089	-0.3261	1 0 0
6	0.8219	0.2368	-0.0590	1 0 0
7	0.1574	0.8217	0.0205	0 1 0
8	-0.0144	1.0255	-0.0113	0 1 0
9	0.0358	1.0072	-0.0434	0 1 0
10	-0.0656	1.0635	0.0020	0 1 0
11	0.2514	0.7517	-0.0029	0 1 0
12	0.0118	0.9992	-0.0114	0 1 0
13	0.0236	0.0249	0.9980	0 0 1
14	-0.0850	0.0495	1.0348	0 0 1
15	-0.0218	0.0437	0.9780	0 0 1
16	0.0096	0.0088	0.9811	0 0 1
17	0.2447	-0.0952	0.8508	0 0 1
18	0.1840	0.0931	0.9095	0 0 1

#### 4 结束语

气敏传感器的温、湿度效应是制约人工嗅觉系统发展的一个很重要方面。文中在考虑(或未考虑)温、湿度影响的条件下应用主成分分析和人工神经网络对酒类鉴别进行了研究。研究结果表明:在未进行温、湿度补偿的情况下,对每个传感器响应曲线仅提取一个特征值(平

均微分值)时,人工嗅觉系统无法对3种酒进行鉴别。而经过温、湿度补偿后,PCA方法能对3种酒正确地分类,BP网络对测试样本的识别率为100%;具有很高的精确度。

#### 参考文献:

- [1] 殷勇,等.用人工嗅觉系统评定卷烟的内在品质[J].农业机械学报,1999,30(6):88.
- [2] 殷勇,等.人工智能嗅觉系统及其在食品加工中的应用[J].洛阳工学院学报,1998,(1):83.
- [3] 皱小波,吴守一,方如明.电子鼻判别挥发性气体的实验研究[J].江苏理工大学学报,2001,(3):1.
- [4] Dae-Sik Lee, et al. Recognition of volatile organic compounds using  $\text{SnO}_2$  sensor array and pattern recognition analysis[J]. Sensors and Actuators, 2001, B(7):288.
- [5] 史志存,李建平,马青,等.电子鼻及其在白葡萄酒识别中的应用[J].仪表技术与传感器,2000,(1):34.
- [6] 秦树基,黄林.用于酒类识别的电子鼻研究[J].郑州轻工业学院学报,2000,15(4):17.
- [7] Natale C D, et al. An electronic nose for the recognition of the vineyard of a red wine[J]. Sensors and Actuators, 1996, B(3): 83.
- [8] 殷勇.人工嗅觉系统评定卷烟的内在品质[D].[博士论文],镇江:江苏理工大学,1999.
- [9] 唐宗岳,秦树基,吴忠洁.电子鼻[J].传感器技术,1998,17(4):1.
- [10] 方开泰.实用多元统计分析[M].上海:华东师范大学出版社,1989.
- [11] 李孝安.神经网络与神经计算机导论[M].西安:西北工业大学,1995.
- [12] K Fukunaga. Introduction to statistical Pattern Recognition. Academic Press, 1972.

## 红曲霉总 RNA 和 mRNA 的提取与测定

赖卫华<sup>1,2</sup>, 熊勇华<sup>2</sup>, 许 杨<sup>2</sup>

(1.食品科学教育部重点实验室 南昌大学食品科学工程系, 江西 南昌 330047;

2.食品科学教育部重点实验室 江西-OAI联合研究院, 江西 南昌 330047)

**摘 要:** 确定了红曲霉总 RNA 和 mRNA 的提取方法及测定方法。结果表明, 所得到的总 RNA 和 mRNA 质量充足, 可以满足后续实验的要求。

**关键词:** 桔霉素; 红曲霉; 核糖核酸

收稿时间: 2003-07-15

基金项目: 江西省自然科学基金项目(0130012); 江西省教育厅资助项目(2001); 江西省社会发展攻关项目(200309)

作者简介: 赖卫华(1968-), 男, 博士, 副教授, 研究方向为食品生物技术。