

文章编号: 1001-3806(2010)06-0794-04

荧光光谱结合概率神经网络用于无醇啤酒的识别

魏柏林, 陈国庆*, 徐建才, 闫冠峰, 马超群, 朱拓, 高淑梅
(江南大学理学院, 无锡 214122)

摘要: 为了快速、准确地识别无醇啤酒和普通啤酒, 采用荧光光谱结合概率神经网络的方法, 建立了识别无醇啤酒的模型。实验中发现无醇啤酒和普通啤酒在紫外-可见光激发下, 都能产生较强荧光, 测得无醇啤酒荧光峰在 420nm ~ 620nm 之间, 荧光峰值波长为 490nm 左右。将小波变换处理荧光光谱得到的低频系数作为网络数据, 训练、建立了概率神经网络, 并对 60 个啤酒样本进行了识别, 识别率达到了 98.33%。该研究结果为无醇啤酒和普通啤酒识别提供了一种新方法。

关键词: 光谱学; 无醇啤酒; 小波变换; 概率神经网络; 分类识别

中图分类号: O657.3 **文献标识码:** A **doi:** 10.3969/j.issn.1001-3806.2010.06.020

Recognition of alcohol-free beer by fluorescent spectroscopy and probabilistic neural network

WEI Bai-lin, CHEN Guo-qing, XU Jiang-cai, YAN Guan-feng, MA Chao-gun, ZHU Tuo, GAO Shu-mei
(School of Science, Jiangnan University, Wuxi 214122, China)

Abstract: In order to identify alcohol-free beer and ordinary beer quickly and accurately, a recognition model of the alcohol-free beer was established, which was based on fluorescent spectroscopy and probabilistic neural network. It was found experimentally that both alcohol-free beer and ordinary beer excited by ultraviolet-visible light could generate strong fluorescence. The fluorescent spectrum for alcohol-free beer is within a range from 420nm to 620nm, its peak wavelength of the fluorescence is about 490nm. The approximate coefficients, obtained by wavelet transform, were used as the network data, and a probabilistic neural network was trained and constructed. The trained probabilistic neural network was employed to recognize sixty beer samples, and the recognition rate was up to 98.33%. The whole research outcomes will provide a new method for recognizing alcohol-free beer.

Key words: spectroscopy; alcohol-free beer; wavelet transform; probabilistic neural network; classification and recognition

引言

无醇啤酒是指酒精含量不超过 0.5% (体积比), 且具有普通啤酒色泽、香味和泡沫等特征的啤酒, 近年来受到越来越多人的欢迎。无醇啤酒生产工艺大致可以分为限制发酵法和脱醇法两大类, 其生产的关键在于要求啤酒中的酒精含量低, 但各种风味物质却基本不变。限制发酵法是在啤酒发酵过程中控制酒精的产生量, 脱醇法是将正常发酵的啤酒通过各种手段降低

其酒精含量。当前, 无醇啤酒的价格是同品牌普通啤酒的 3 倍 ~ 5 倍, 随着无醇啤酒市场占有率的不断提高, 为了进行有效的监管, 防止不法商家用普通啤酒冒充无醇啤酒, 研发一种能简便、快速、准确地识别无醇啤酒和普通啤酒的方法受到人们的重视。

目前对无醇啤酒和普通啤酒的识别, 主要是通过直接对啤酒中酒精度含量的测定来实现的, 传统的方法有气相色谱法、酶比法、仪器法、接触燃烧法等。这些方法在测定啤酒酒精度方面虽能达到较高的准确度, 但往往需要费时的前期处理, 且存在操作复杂、繁琐、不经济等缺陷, 难以实现对无醇啤酒和普通啤酒进行简便、快速的识别。荧光光谱法具有灵敏度高、取样量少、简便快速等优点^[1-2], 但它是一种间接测量方法, 需要借助数学模型来分析。人工神经网络 (artificial neural network, ANN) 是基于模仿人类大脑的结构和功能的信息处理模型, 近年来, 其得到了快速的发展, 现已被证明在分类识别方面是

基金项目: 江苏省高校科研成果产业化推进工程资助项目 (JH08-18); 江苏省研究生培养创新工程资助项目 (CX08B-088Z); 江苏省自然科学基金资助项目 (BK2009066); 教育部高校博士学科点专项科研基金资助项目 (200802950005)

作者简介: 魏柏林 (1985-), 男, 硕士研究生, 主要从事荧光光谱检测方面的研究。

* 通讯联系人。E-mail: cgq2098@163.com

收稿日期: 2009-11-25; 收到修改稿日期: 2010-01-15

一种有效的方法^[3-5]。

作者对啤酒在紫外-可见光激励下的荧光光谱进行了实验测量和分析,将概率神经网络用于荧光光谱的分析。首先通过小波变换对荧光光谱特征信息进行提取,压缩数据维数,然后利用获得的低频系数建立概率神经网络(probabilistic neural network, PNN)模型,快速、准确地实现了对无醇啤酒和普通啤酒的识别。

1 概率神经网络原理

概率神经网络是由 SPECHT 于 1988 年提出的一种径向基神经网络的重要变形,实质是一种基于贝叶斯最小风险准则的并行算法^[6]。它是由输入层、径向基神经元层和竞争层(输出层)组成的前馈网络,结构如图 1 所示^[7],其中, R 为输入向量元素的数目, Q 为

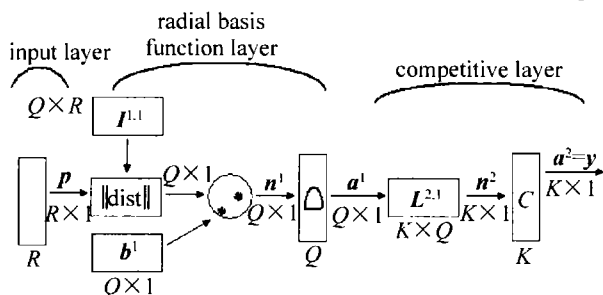


Fig. 1 Architecture of probabilistic neural network

输入目标样本数目, K 为输入向量类别的数目, y 为输出向量, C 为竞争层神经元。

概率神经网络的输入结点数等于输入样本的维数,径向基神经元的节点数由样本的个数决定,该层第 i 个神经元的输入表示为: $n_i^1 = \| I_i^{1,1} - p \| b_i^1$ (1) 输出 a_i^1 可表示为:

$$a_i^1 = \exp[-(\| I_i^{1,1} - p \| b_i^1)_2] \quad (2)$$

式中, $I^{1,1}$ 和 b^1 为输入层和径向基神经元的权值和阈值, p 为输入向量。

竞争层计算每个模式出现的概率,其神经元节点数为输入样本的类别数,最后网络的输出为:

$$a^2 = \text{compet}(n^2) \quad (3)$$

$$n^2 = L^{2,1} a^1 = t a^1 \quad (4)$$

式中, compet 为竞争层的传递函数, $L^{2,1}$ 为径向基神经元层和竞争层的权值,其值与网络的目标向量矩阵 t 相等。

概率神经网络具有结构简单,训练快速等特点,特别适合用于解决分类识别问题^[8-10]。在分类识别中,其优势在于利用线性学习算法完成非线性算法所做的工作,同时又保持非线性算法高精度的特点^[11]。

2 实验部分

2.1 仪器、样品和方法

实验仪器是美国 Roper Scientific 公司 SP-2558 多功能光谱测量系统,其结构如图 2 所示。

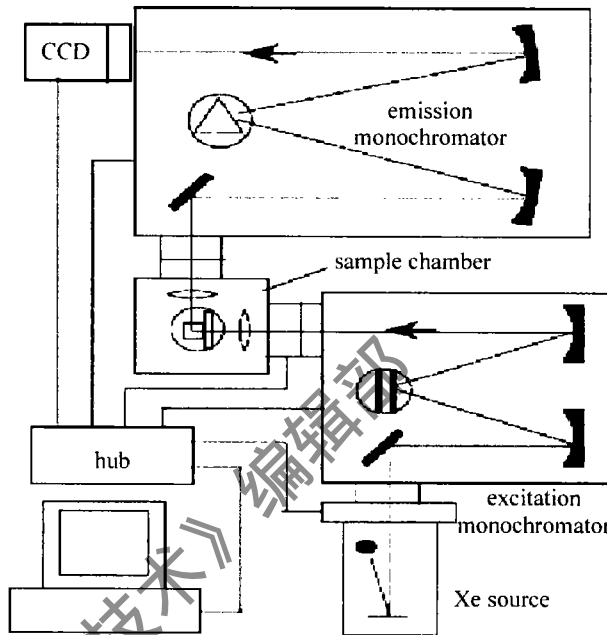


Fig. 2 SP-2558 multifunctional spectrometer system

啤酒样品均是从正规市场上购买所得,其中无醇啤酒(酒精度不大于 0.5%)和普通啤酒(酒精度大于 0.5%)的样本各 30 个。无醇啤酒样本是不同批次的青岛无醇啤酒,普通啤酒包括“青岛”、“雪花”、“燕京”、“百威”、“三得利”、“蓝带”等常见品牌。将啤酒振荡除气 5min,放置 15min 后,用中层滤纸过滤后备用。

用 330nm ~ 490nm 不同波长的光激发样品,每隔 5nm 照射 1 次,扫描时间为 0.1s,得到相应的荧光光谱图。

2.2 无醇啤酒的荧光特性

啤酒中含有多种微量的荧光物质,如乙醇、多酚、双乙酰、蛋白质、维生素等^[12-14],这些成分的不同造成产生的荧光光谱亦不同,故可采用荧光分析法识别无醇啤酒和普通啤酒。

实验测得在紫外-可见光激发下,无醇啤酒能产生较强的荧光,其 3 维荧光图如图 3 所示, x 轴表示激发波长, y 轴表示发射波长, z 轴表示荧光强度,其中左侧的较高的峰为荧光峰,右侧的较低的峰为瑞利散射峰。

实验中得出无醇啤酒最佳激发波长为 395nm,不同品牌的普通啤酒最佳激发波长略有差异,但也在 395nm 附近,因此,选用波长为 395nm 的光作为激发光,测得 60 个样本的荧光光谱,如图 4 所示。

其中 395nm 处的峰为散射峰,490nm 处的峰为荧光峰,由于啤酒中多种荧光物质的荧光峰相互叠加,在

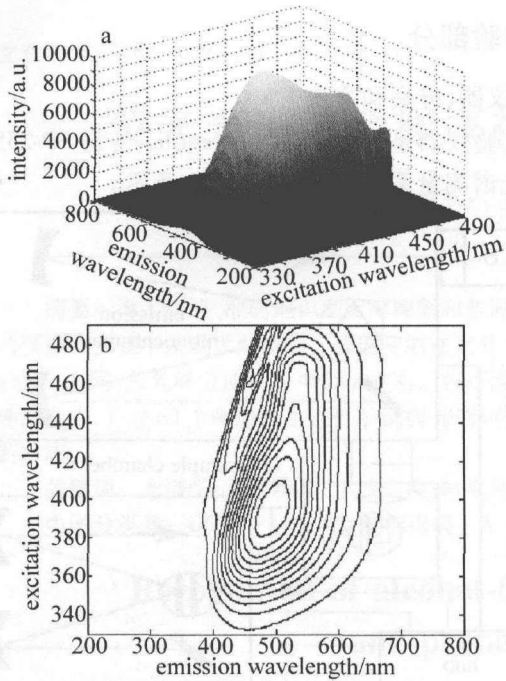


Fig. 3 3-D fluorescent spectra and contour map of alcohol-free beer

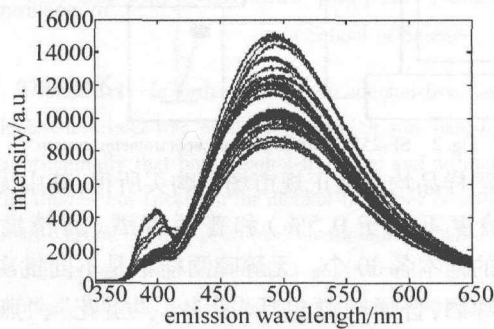


Fig. 4 The fluorescent spectra of beer

395nm 的光的照射下,啤酒的荧光光谱宽达 200nm。同时,由于无醇啤酒和普通啤酒的荧光光谱差别细微,只有强度上的不同,故用常规的荧光分析法识别存在一定的困难。无醇啤酒荧光光谱特性如表 1 所示。

Table 1 Fluorescent characteristics of alcohol-free beer

sample	fluorescent spectra width / nm	best excitation wavelength / nm	fluorescent peak / nm
alcohol-free beer	420 ~ 620	395	490

3 结果与讨论

3.1 实验数据处理

为了提取荧光光谱的特征信息,去除无用的光谱信息,利用 1 维离散小波变换对啤酒的荧光光谱进行多尺度分解,实现对原始数据的有效压缩,降低数据的维数^[15-17],方便神经网络进行建模。

由于小波基函数和分解尺度对小波变换的结果影响很大,通过对不同小波函数和不同分解尺度的比较,最后选择了正交小波基 db4 和 4 层分解尺度来实现数据压缩,把 1149 维的原始数据压缩为 78 维的低频系

数,压缩比约为 14:1。为了加快网络运算速度和保证网络的稳定性,将得到的低频系数归一化到 [0,1],其公式为: $D_i' = (D_i - D_{\min}) / (D_{\max} - D_{\min})$ (5) 式中, D_i 为归一化前的数据, D_{\min} 为数据的最小值, D_{\max} 为数据的最大值, D_i' 为归一化后的数据。

3.2 概率神经网络的建立

把 60 组样本从 1 到 60 依次编号,采用交叉验证的方法,每次取其中 59 组作为神经网络的训练集,其余 1 组作为预测集,如此循环 60 次,分别对 60 个样本进行识别,将经过归一化后的 78 维低频系数作为 PNN 的输入变量,建立识别啤酒种类的模型。其流程图如图 5 所示。



Fig. 5 Flow chart

PNN 神经网络输入层神经元个数为 78 (78 维低频系数),径向基层神经元个数为 59 (59 个训练样本),竞争层神经元个数为 2 (2 个样本类别)。考虑到网络性能,经过反复尝试后,径向基函数的散布常数设为 0.02。

利用 PNN 模型对 60 个啤酒样本进行识别,30 个无醇啤酒样本完全识别正确,30 个普通啤酒样本只有一个被误判为了无醇啤酒,PNN 模型的总体识别率达到了 98.33%。误判的原因可能与模型参量的选择以及样本数目未能足够多有关,但作者相信,随着样本数量的积累,PNN 模型的识别率有望进一步提高。实验中还将 PNN 与后向传播神经网络 (back propagation neural network, BPNN) 和径向基函数神经网络 (radial basis function neural network, RBFNN) 的识别结果作了比较,结果如表 2 所示。结果表明,PNN 模型能够很好地对普通啤酒和无醇啤酒进行识别,且 PNN 模型在总体识别率和所耗时间两项指标上,均优于 BPNN 模型和 RBFNN 模型,效果令人满意。

Table 2 Prediction results for different models

model	recognition rate of ordinary beer	recognition rate of alcohol-free beer	overall recognition rate	time/s
BPNN	90.00%	100.00%	95.00%	2586.91
RBFNN	86.67%	93.33%	90.00%	37.72
PNN	96.67%	100.00%	98.33%	6.71

4 结论

在紫外-可见光激发下,无醇啤酒和普通啤酒都能产生强的荧光。实验测得 60 个样本的荧光光谱,利用

小波变换对原始光谱进行了特征信息提取,数据维数压缩,创建了概率神经网络,以此对预测样本进行识别,准确率达到98.33%。该方法融合了荧光光谱分析,小波变换以及概率神经网络的优点,为方便、准确地识别无醇啤酒和普通啤酒提供了一种新方法。本文中虽然以青岛无醇啤酒为例,但是所采用的方法同样适用于其它品牌无醇啤酒的识别。

参 考 文 献

- [1] GU E D, SHI A M, ZHU T, *et al.* Study on three-dimensional fluorescence spectra of yanghe classical distilled spirits[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2008, 28(12): 2916-2920(in Chinese).
- [2] LIU Zh Y, ZHU T, GU E D, *et al.* Study on fluorescence spectra of Chinese rice wine[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2008, 28(10): 2409-2412(in Chinese).
- [3] TAN K, DU P J. Hyperspectral remote sensing image classification based on radical basis function neural network[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2008, 28(9): 2009-2013(in Chinese).
- [4] WANG Y Y, HE Y, SHAO Y N, *et al.* Discrimination among different brands of coffee by using vis-near infrared spectra[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2007, 24(4): 702-706(in Chinese).
- [5] HAN Y Zh, LI S M, ZHANG Y X, *et al.* Neural network generalization analysis of recognition for gas impurity in air[J]. Journal of Optoelectronics · Laser, 2005, 16(6): 718-721(in Chinese).
- [6] LI Q B, LI X, ZHANG G J, *et al.* Application of probabilistic neural networks method to gastric endoscope samples diagnosis based on FT-IR spectroscopy[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2009, 29(6): 1553-1557(in Chinese).
- [7] DONG Ch H. MATLAB neural network and application[M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2007: 127(in Chinese).
- [8] JIANG J F, XIAO Sh P, YANG D Q. Texture image recognition based on modified probabilistic neural network[J]. Computer Engineering and Applications, 2008, 44(10): 48-50(in Chinese).
- [9] ZHANG W, HAO J F, XIANG J P, *et al.* Predicting type of protein-protein interaction based on probabilistic neural network[J]. Computer Engineering and Applications, 2008, 44(10): 98-103(in Chinese).
- [10] YUAN J, ZHOU Y. Damage identification by probabilistic neural networks based on latent components for time-varying structure system[J]. Journal of Nanjing University of Aeronautics & Astronautics, 2009, 47(3): 402-407(in Chinese).
- [11] DONG Y H, BAI W X, ZHANG J P. Research on application of probability neural network in hyperspectral image classification[J]. Journal of Jilin University (Information Science Edition), 2008, 26(2): 122-125(in Chinese).
- [12] CHRISTENSEN J, LADEFOGED A M, NØRGAARD L. Determination of bitterness in beer using fluorescence spectroscopy and chemometrics[J]. Journal of the Institute of Brewing, 2005, 111(1): 3-10.
- [13] SIKORSKA E, GÓRECKI T, KHMELINSKII I V, *et al.* Fluorescence spectroscopy for characterization and differentiation of beer[J]. Journal of the Institute of Brewing, 2004, 110(4): 267-275.
- [14] APPERSON K, LEIPER K A, MCKEOWN I P, *et al.* Fluorescence and the isolation, characterization and silica adsorption of haze-active beer proteins[J]. Journal of the Institute of Brewing, 2002, 108(2): 193-199.
- [15] ZHAO M H, YOU Zh Sh, ZHAO Y G, *et al.* Face recognition based on NSA multiscale model[J]. Laser Technology, 2006, 30(1): 107-109(in Chinese).
- [16] HE Ch T, MA Z, CHEN J G, *et al.* Recognition of film laser damage based on wavelet transform[J]. Laser Technology, 2007, 31(2): 131-136(in Chinese).
- [17] LIU D M, SHEN J Y, WANG L J. Application of the wavelet transform to pattern correlation recognition[J]. Laser Technology, 2004, 28(6): 641-644(in Chinese).

(上接第752页)

斑条纹信息得到了增强,同时对高频噪声加以抑制,而不是简单的滤除,这样兼顾高频和低频成分,既达到了滤波的目的,也保护了图像中的轮廓和细节信息。因此,通过对散斑干涉条纹图的滤波降噪处理,可以大大降低变形位移场测量的误差,提高测量精度,很好地满足工程实际测量的需要。

参 考 文 献

- [1] JIN G Ch. Computer-aided optical metrology[M]. 2nd ed. Beijing: Tsinghua University Press, 2007: 119-126(in Chinese).
- [2] WANG K F, GAO M H, ZHOU K Y. Modern photomechanics technology[M]. Harbin: Harbin Institute of Technology Press, 2009: 79-81(in Chinese).
- [3] RASTOGI P K. Digital speckle pattern interferometry and related techniques[M]. New York: John Wiley and Sons Ltd., 2001: 141-224.
- [4] SIROHI R S. Speckle metrology[M]. New York: Marcel Dekker, 1993: 157-194.
- [5] LIU B H. The technique of NDT with multifunctional DSPI and its application[D]. Tianjin: Tianjin University, 2004: 10-18(in Chinese).
- [6] GONZALEZ R C, WOODS R E. Digital image processing[M]. 2nd ed. Beijing: Publishing House of Electronic Industry, 2007: 152-154(in Chinese).
- [7] WANG K F, TIEU A K. Volume-grating phase-shifting digital speckle pattern interferometry used for measurement of out-of-plane displacement[J]. Opt & Laser Technol, 2004, 36(2): 117-120.
- [8] YU J W. A system of image processing based on ESPI[J]. Information Technology, 2003, 27(4): 41-43(in Chinese).
- [9] ZHANG Y P, WANG K F. Application of LabVIEW and MATLAB in ESPI image processing[J]. Laser Technology, 2009, 33(6): 582-585(in Chinese).
- [10] QIAN K M, XU B Q, WU X P. Phase measurement methods in optical interferometry[J]. Journal of Experimental Mechanics, 2001, 16(3): 239-247(in Chinese).
- [11] WANG X, JIA Sh H, CHEN G D. A review of the study on phase unwrapping[J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2005, 26(8): 665-668(in Chinese).