

文章编号: 1672-8785(2024)04-0046-07

基于神经网络和傅里叶光谱分析的 易制毒混合气体检测方法

潘冬宁¹ 赵雷红^{1*} 谢汶浚²

(1. 青岛市光电工程技术研究院, 山东 青岛 266111;

2. 光子集成(温州)创新研究院, 浙江 温州 325013)

摘 要: 易制毒气体识别对于抑制毒品流通具有重要作用, 但目前关于易制毒气体浓度检测的研究还不成熟。针对易制毒混合气体检测的问题, 通过采集傅里叶红外光谱信息建立了反向传播(Back Propagation, BP)神经网络模型。以乙醚和丙酮的混合气体实验为例, 对 BP-傅里叶红外变换光谱(Fourier Transform Infrared Spectroscopy, FTIR)模型进行了验证和分析。结果表明, 利用 BP-FTIR 吸收系统采集的多组分混合气体的光谱数据的总体回归 R 值为 0.99273, 相关性强。在混合气体测试中, 乙醚气体的最大预测误差为 28 ppm, 丙酮气体的最大预测误差为 11 ppm, 总体预测误差较小, 说明该模型能够较好地预测乙醚丙酮混合气体的浓度。因此, 神经网络模型对多组分易制毒气体进行浓度反演的预测结果精度较高, 本研究也为易制毒及其他混合气体检测提供了新的思路。

关键词: BP 神经网络; 傅里叶变换红外光谱; 易制毒化学品; 混合气体检测

中图分类号: TN21 **文献标志码:** A **DOI:** 10.3969/j.issn.1672-8785.2024.04.007

Poisonable Mixed Gas Detection Method Based on Neural Network and Fourier Spectrum Analysis

PAN Dong-ning¹, ZHAO Lei-hong^{1*}, XIE Wen-jun²

(1. Qingdao Academy of Opto-Electronics Engineering, Qingdao 266111, China;

2. Photonic Integration (Wenzhou) Innovation Institute, Wenzhou 325013, China)

Abstract: The identification of gas which is easy to produce drugs plays an important role in inhibiting the circulation of drugs, but the current research on the concentration detection of gas which is easy to produce drugs is not mature. In this paper, the back propagation (BP) neural network model is established by collecting Fourier infrared spectrum information for detecting the gas mixture that is easy to produce drugs. The model of BP-FTIR is verified and analyzed by taking the mixed gas experiment of ether and acetone as an example. The results show that the global regression R value of the multi-component gas spectrum data collected by BP-FTIR absorption system is 0.99273, and the correlation is strong. In the mixed gas test, the maximum prediction error of ether gas is 28 ppm, and the maximum prediction error of acetone gas is 11 ppm. The overall pre-

收稿日期: 2023-10-13

基金项目: 青岛市科技惠民示范引导专项(21-1-4-sf-1-nsh); 温州市基础性社会发展科技项目(S20210006)

作者简介: 潘冬宁(1984-), 男, 山东寿光人, 硕士, 主要研究方向为红外激光技术与光谱技术。

*通讯作者: E-mail: zhaolh@qdaoe.cn

diction error is small, indicating that the model can predict the concentration of ether acetone mixture well. Therefore, the prediction result of concentration inversion of multi-component gas which is easy to produce drugs by neural network model is highly accurate, and this study also provides a new research idea for the detection of gas which is easy to produce drugs and other mixed gases.

Key words: BP neural network; Fourier transform infrared spectrum; poisonable chemicals; mixed gas detection

0 引言

毒品犯罪严重危害社会的长治久安, 因此毒品的快速识别和检测对打击毒品犯罪活动、抑制毒品流通具有重要意义。常见的易制毒化学品包括海洛因、冰毒、可卡因等, 其主要化学成分为醋酸酐、三氯甲烷、乙醚、丙酮、丙烷等。这类物质通常具有极强的挥发性且气体在红外波段具有明显的特征吸收谱带, 因此可以采用红外吸收方式对易制毒气体进行检测^[1-2]。

红外光谱技术^[3-4]可以较好地识别气体成分, 已被广泛应用于大气环境监测、气体遥测等领域^[5]。国内在利用红外光谱技术检测毒品方面的研究已经取得了一定的成果。公安部禁毒情报技术中心国家毒品实验室建立了可用于 13 种易制毒化学品的红外光谱快速定性分析方法^[6]。中国科学院环境光学与技术重点实验室利用机载 FTIR 系统被动遥测大气中的痕量气体, 定量分析了试验区域内 1000 m 以下大气中痕量气体 CO 和 N₂O 的平均浓度^[7]。虽然国内将红外光谱用于毒品检测方面的研究已有一些报道, 但是红外光谱在毒品鉴定^[8-9]领域一直未得到较好的应用, 无法实现精准细致的检测。迄今仍没有成熟的红外光谱易制毒化学品检验方法和设备。

神经网络是一种模拟人的大脑神经元的处理结构, 可以用来解决复杂且未知的非线性模型。由于具有自适应和自组织能力, 神经网络在各个领域都有应用^[9-13]。神经网络通过模拟人类学习过程对已有样本进行学习, 不断优化参数模型, 最终达到预测目的。采用 FTIR 方法对物质进行鉴别的方法已经得到应用^[14-25],

也已经有关于采用神经网络的方法处理红外光谱信息的研究^[26-28]。本文采用基于 FTIR 技术的测量方法对易制毒气体进行检测, 并结合 BP 神经网络算法对混合易制毒气体进行解混合, 实现对混合气体的定量分析, 为易制毒气体检测方法提供一种新的思路。

1 FTIR 原理和神经网络算法模型

FTIR 的原理如下: 光源发出的光通过反射镜进入干涉仪, 其中反射光通过定镜反射, 透射光通过动镜反射, 二者形成干涉光。干涉光通过气体池时, 样本气体红外波段产生吸收, 然后出射光经反射镜的反射进入接收器并传输到计算机中。对其进行傅里叶变换后获得样品谱图, 然后通过对谱图进行处理得到气体的浓度信息。

FTIR 理论基于比尔-朗伯定律, 描述了初始光强 $I_0(\nu)$ 与经介质吸收后的透射光强 $I(\nu)$ 之间的关系。 $a(\nu)$ 为分子吸收系数, C 为被测物质浓度, L 为介质厚度。比尔-朗伯红外吸收理论可表示为

$$I(\nu) = I_0(\nu)e^{-a(\nu)CL} \quad (1)$$

在实际应用中, 波长 ν 处可能存在 n 种组分吸收, $i=1, \dots, n$, 则关系式又可以表示为

$$I(\nu) = I_0(\nu)e^{-\sum_{i=1}^n a_i(\nu)CL} \quad (2)$$

BP 神经网络通过给定特征向量和输出浓度向量求出隐含层和输出层的输出, 根据误差判断是否满足精度要求进一步修正隐含层的误差和误差梯度, 从而实现权值学习。BP 神经网络计算过程如图 1 所示。

提取输入向量特征数据时, 根据 NIST 数据库中常见易制毒气体的红外吸收谱库的各气体特征吸收谱图, 并结合检测气体的吸收特征

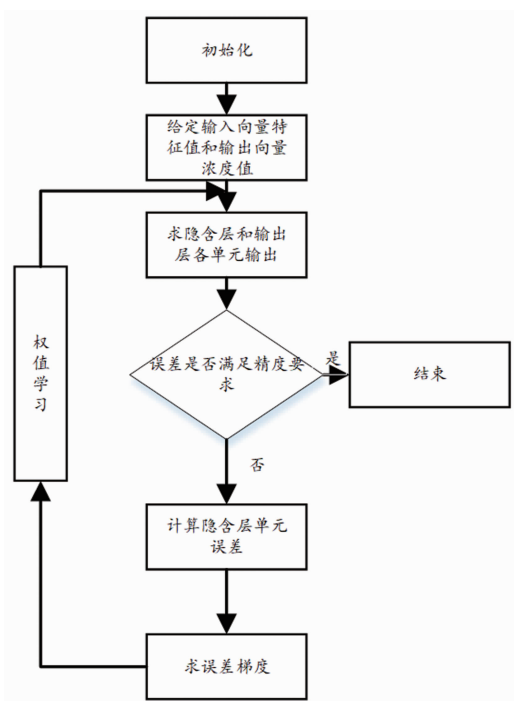


图 1 BP 神经网络的计算流程简图

来加以选择。分别提取 400~4000 cm^{-1} 波段内包括峰值和波段积分的多组数据来组成特征数据, 然后进行浓度模型回归和反演。从图 2 中的 NIST 数据可以看出, 在 2700~3130 cm^{-1} 以及 1000~1500 cm^{-1} 内, 乙醚和丙酮都有相互交错的吸收峰, 且在 1733 cm^{-1} 波长附近丙酮有单独的特征吸收峰, 因此可根据这些吸收特征对丙酮和乙醚浓度进行预测。

采用乙醚和丙酮混合气体进行实验, 输入样本分别表示 5 种特征数据, 输出为乙醚和丙

酮预测浓度值。隐含层节点的数量为

$$n_1 = \sqrt{n+m} + a \quad (3)$$

式中, n 为输入节点; m 为输出节点; a 为 1~10 的常数。BP 神经网络结构如图 3 所示。该神经网络是一个“5 输入-2 输出”模型, 具有 6 个隐含层。 w 为各层级之间的权值, b 为各层级之间的阈值。

2 实验与分析

2.1 实验采集和特征提取

实验设备采用美国 Nicolet 公司的 iS20 FTIR 光谱仪, 仪器配套采集处理采用 OMNIC 软件。采集光谱波数范围为 400~4000 cm^{-1} , 分辨率为 1 cm^{-1} , 扫描次数为 16 次。样气采用标准浓度为 1000 ppm 的丙酮气体、乙醚气体以及纯度为 99.9% 的氮气 3 种气体。根据不同混合体积, 分别进行不同浓度混合气体配置和测试实验(共 21 组)。表 1 列出了各气体占比。在每种浓度实验中, 各采集了 5 组样本。不同浓度混合气体的傅里叶光谱如图 4 和图 5 所示。

光谱的采集过程难免受到系统干扰等因素影响, 包括波形变形、基线倾斜和噪声信号干扰等, 因此需要在处理光谱信号前对其进行预处理, 消除背景影响和噪声干扰。基线校正算法包括线性、齿条和多项式算法等。本文采用多项式算法对基线进行校正, 并采用平滑滤波

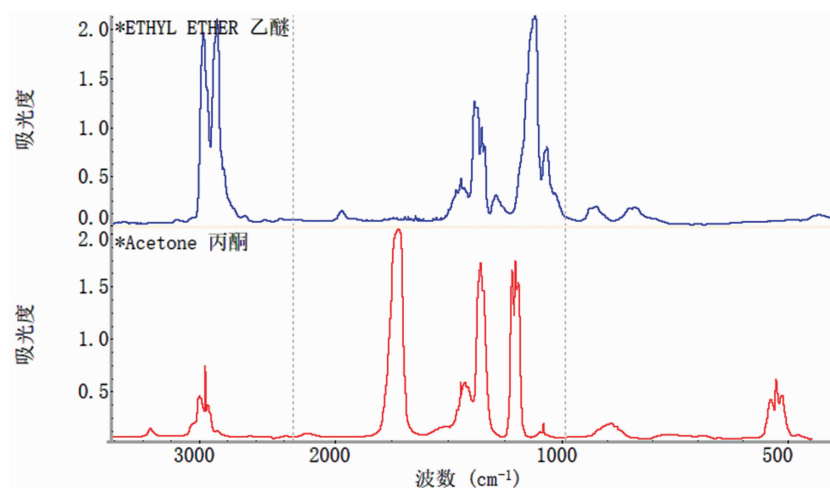


图 2 乙醚和丙酮气体谱图

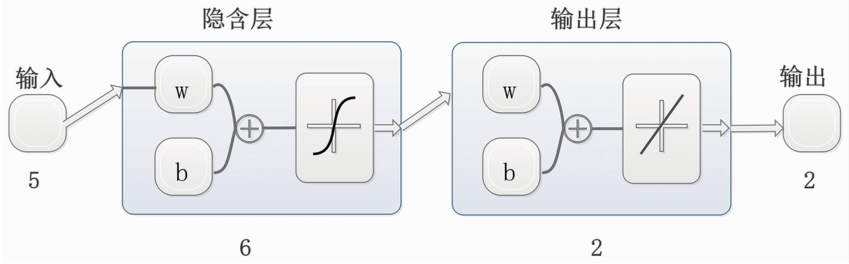


图 3 BP 神经网络结构

表 1 乙醚和丙酮气体在气体池中的体积含量百分比

编号	乙醚	丙酮	氮气	总体积	样本数
1	0	0	100 %	100 %	5
2		20 %	80 %	100 %	5
3		40 %	60 %	100 %	5
4		60 %	40 %	100 %	5
5		80 %	20 %	100 %	5
6		100 %	0	100 %	5
7	20 %	0	80 %	100 %	5
8		20 %	60 %	100 %	5
9		40 %	40 %	100 %	5
10		60 %	20 %	100 %	5
11		80 %	0	100 %	5
12	40 %	0	60 %	100 %	5
13		20 %	40 %	100 %	5
14		40 %	20 %	100 %	5
15		60 %	0	100 %	5
16	60 %	0	40 %	100 %	5
17		20 %	20 %	100 %	5
18		40 %	0	100 %	5
19	80 %	0	20 %	100 %	5
20		20 %	0	100 %	5
21	100 %	0	0	100 %	5

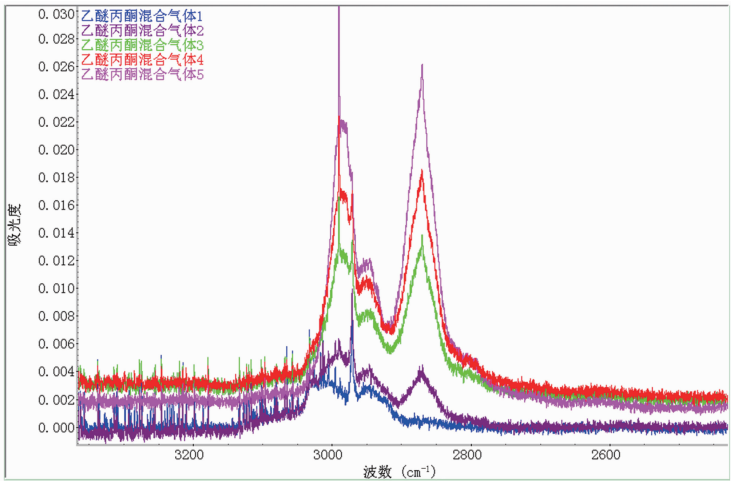


图 4 不同浓度丙酮和乙醚混合气体的吸光度图(2400~3300 cm⁻¹波段)

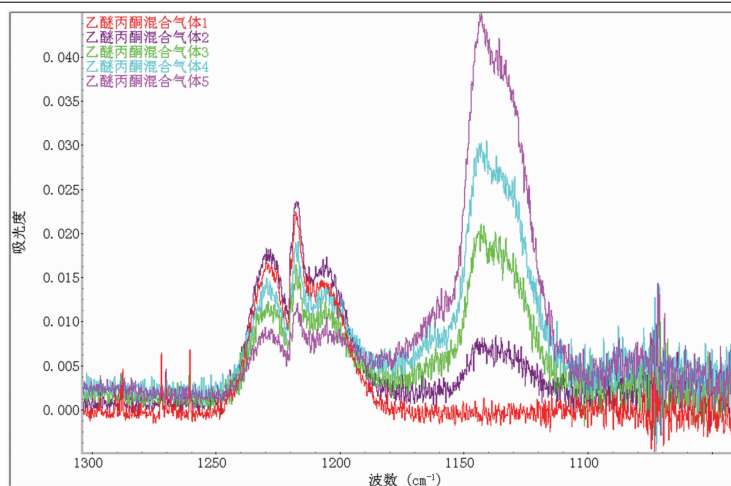
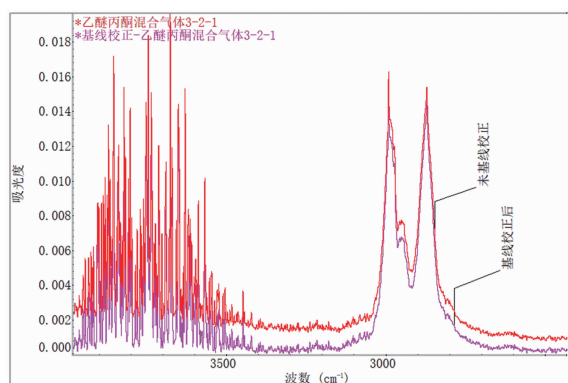
图 5 不同浓度丙酮和乙醚混合气体的吸光度图(1000~1300 cm^{-1} 波段)

图 6 基线校正

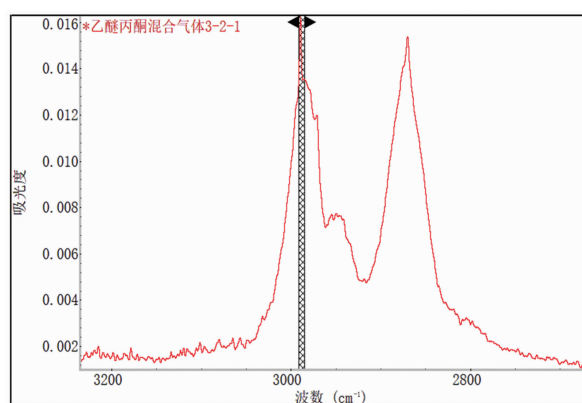
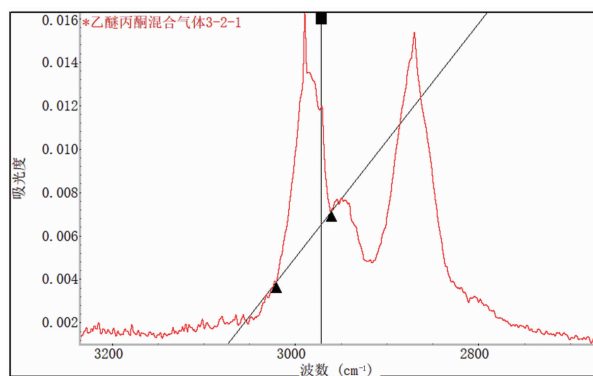
表 2 特征数据波段及峰值

序号	特征波段/ cm^{-1}
1	2986~2991
2	2970
3	2975
4	2840~2910
5	1190~1240
6	1100~1170

消除细小噪声。采集数据经基线校正后如图 6 所示。

结合空气中水、二氧化碳及其他近似气体影响,选取 400~4000 cm^{-1} 波段内包括峰值和波段积分的 6 组数据,组成 5 组特征数据进行浓度模型回归和反演。表 2 列出了特征数据波段及峰值。

在提取特征数据时,对特征波段提取波段内的积分数据,对特征峰值提取峰高数值。部分特征波段和特征峰值如图 7 和图 8 所示。

图 7 特征波段(2986~2991 cm^{-1})提取图 8 特征峰值(2970 cm^{-1})提取

2.2 神经网络模型验证及分析

对采集数据预处理后,按照比例将每个浓度的光谱随机划分为训练集、验证集和测试集,并对数据进行归一化处理。

模型输入为 2986~2991 cm^{-1} 、2840~2910 cm^{-1} 、1190~1240 cm^{-1} 、1100~1170 cm^{-1} 对应的强度以及 2970 cm^{-1} 、2975 cm^{-1} 的

峰值比值。在神经网络正向传播计算中, 输入层的特征信息经传递函数进入隐藏层, 再通过权值和阈值更新传递给输出层。输出层通过预测值与期望值偏差比较更新网络来进行反向训练, 调整神经元的权值和阈值, 使网络误差逐渐减小直至达到预测要求或设定步数。设置神经网络参数如下: 最大迭代次数为 200, 目标误差为 10^{-4} , 学习率为 0.01。神经网络的训练结果由决定系数 R 表示。 R 越趋近于 1, 说明模型预测效果越好。神经网络总体预测决定系数如图 9 所示。

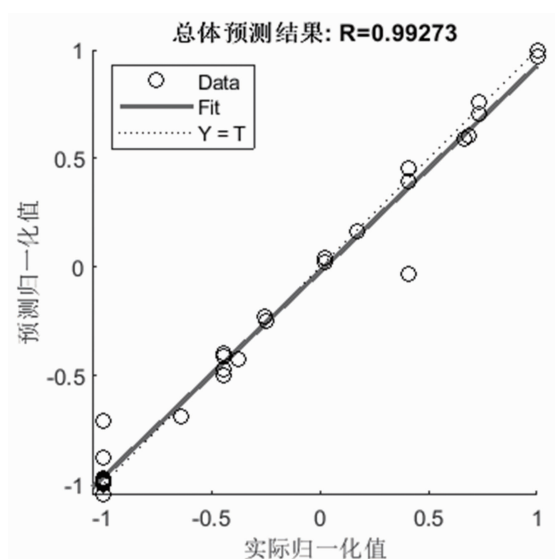


图 9 神经网络总体训练结果

回归 R 值表示了测量输出和目标之间的相关性。由结果可知, 回归 R 值为 0.99273, 表示输出和目标之间的相关性较强。将训练集代入神经网络进行学习, 用学习所得的神经网络进行测试。神经网络预测的乙醚和丙酮混合气体输出浓度和实际浓度数据如图 10 所示。

从图 11 可以看出, 在 4 组混合气体测试数据中, 乙醚气体最大预测误差为 28 ppm, 丙酮气体最大预测误差为 11 ppm。总体来看, 预测误差较小, 说明该神经网络模型能够较好地预测乙醚、丙酮混合气体浓度。

3 结束语

本文采用不同浓度的易制毒气体丙酮和乙醚进行混合浓度气体实验, 利用傅里叶红外光

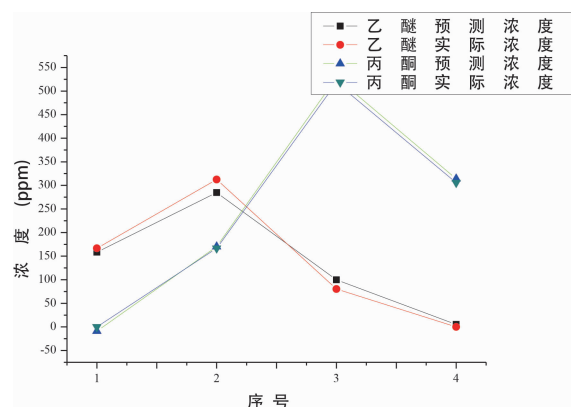


图 10 BP 网络预测浓度和实际浓度

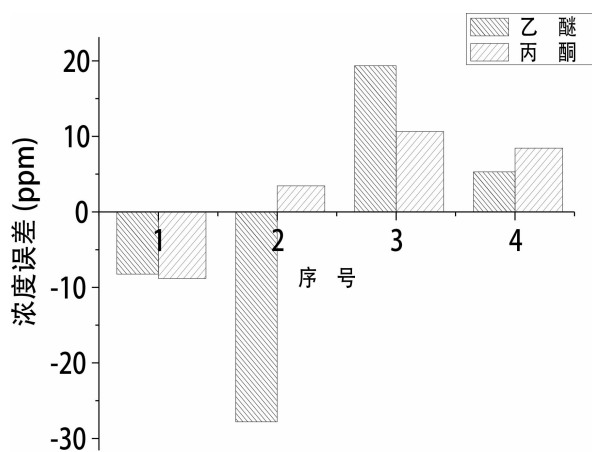


图 11 BP 网络预测误差

谱吸收系统采集 $400 \sim 4000 \text{ cm}^{-1}$ 波段光谱数据, 依据采集的多组分混合气体的光谱数据建立了“5-6-2”神经网络模型, 并进行了多组分易挥发性有机物浓度反演的研究。实验结果表明, 回归 R 值为 0.99273, 输出和目标之间的相关性较强, 预测模型效果较好; 同时反演浓度最大误差不超过 28 ppm, 预测浓度误差较小。因此, 神经网络对多组分易制毒气体进行浓度反演的结果精度较高, 具有更强的非线性拟合能力, 也给红外气体处理提供了新的研究思路。接下来还将进一步研究更准确的特征数据提取方法并增大实验数据量, 不断提高实验检测精度和稳定性。

参考文献

- [1] 白燕平, 闵顺耕, 刘翠梅. 红外光谱对毒品定性鉴定的特色优势和应用前景 [J]. 刑事技术,

- 2019, **44**(1): 48–52.
- [2] 李志豪. 用于公安禁毒制毒挥发气体检测的被动红外技术 [J]. **红外**, 2012, **33**(10): 39–42.
- [3] 田晓丽, 龚敏, 曹群, 等. SiC 热氧化 SiO₂ 的红外光谱研究 [J]. **半导体光电**, 2009, **30**(1): 80–83.
- [4] 毕卫红, 唐予军, 杨小莉, 等. 基于 AOTF 的便携式近红外光谱测量仪 [J]. **半导体光电**, 2005, **26**(3): 264–266.
- [5] 张强. 基于深度神经网络的多组分 VOCs 浓度反演方法研究 [D]. 西安: 中国科学院西安光学精密机械研究所, 2019.
- [6] 刘翠梅, 韩煜, 贾薇, 等. 13 种易制毒化学品红外光谱快速定性分析 [J]. **光谱学与光谱分析**, 2019, **39**(5): 1439–1444.
- [7] 高闽光, 刘文清, 张天舒, 等. 机载 FTIR 被动遥测大气痕量气体 [J]. **光谱学与光谱分析**, 2006, **26**(12): 2203–2206.
- [8] 李洪刚, 关淑翠, 李永刚, 等. 基于傅里叶变换红外光谱技术的多组分气体分析仪的研制 [J]. **承德石油高等专科学校学报**, 2022, **24**(5): 47–52.
- [9] 陈磊, 周新奇, 查丽霞, 等. 便携式傅里叶红外分析仪在特种气体分析中的应用 [J]. **分析仪器**, 2022, **53**(4): 12–15.
- [10] 王志芳, 王书涛, 王贵川. 粒子群优化 BP 神经网络在甲烷检测中的应用 [J]. **光子学报**, 2019, **48**(4): 147–154.
- [11] 童敏明, 张愉, 齐美星. 基于 BP 神经网络的可燃混合气体分析方法的研究 [J]. **计量学报**, 2006, **27**(2): 169–171.
- [12] 刘明铭, 孔德晟, 向钰言, 等. 基于卷积神经网络和光丝诱导荧光光谱的 NaCl 气溶胶定量分析 [J]. **中国激光**, 2023, **50**(7): 101–108.
- [13] 尹雄翼, 石元博, 王胜君, 等. 基于 ML-PCA-BP 模型的多环芳烃拉曼光谱定量分析 [J]. **光谱学与光谱分析**, 2023, **43**(3): 861–866.
- [14] 王克青, 杨琴, 张然, 等. 红外光谱和气质联用在铁质文物保护修复材料评价中的应用 [J]. **光散射学报**, 2023, **35**(3): 303–310.
- [15] 王卓, 于宗仁, 苏伯民. 古代壁画和塑像表面涂层原位无损红外光谱分析 [J]. **光谱学与光谱分析**, 2023, **43**(S1): 81–82.
- [16] 阚玉娜, 吕偲琪, 沈哲, 等. 红外光谱结合 PCA 分析研究枫香果实多元醇液化反应进程 [J]. **光谱学与光谱分析**, 2023, **43**(4): 1212–1217.
- [17] 姜飞宇, 吴雄, 高松涛, 等. 红外光谱法检测变压器油中糠醛含量 [J]. **中国测试**, 2022, **48**(S2): 72–77.
- [18] 徐惟馨, 夏静静, 韦芸, 等. 红外光谱对牛预混料中违禁添加盐酸土霉素的快速定量 [J]. **光谱学与光谱分析**, 2023, **43**(3): 842–847.
- [19] 司星宇, 左佳倩, 陈立国, 等. 口岸生物制品的红外光谱快速鉴别技术研究 [J]. **中国口岸科学技术**, 2022, **4**(S2): 69–74.
- [20] 王元忠, 沈涛. 红外光谱结合化学计量学对栽培滇重楼的产地鉴别研究 [J]. **中草药**, 2023, **54**(5): 1574–1581.
- [21] 李萍, 慕博博, 念腾飞, 等. 红外光谱(FTIR)和荧光显微镜(FM)表征再生剂在老化沥青中的扩散行为 [J]. **材料科学与工程学报**, 2022, **40**(5): 767–773.
- [22] 张旭, 闫玥儿, 张春梅, 等. 延安时期红色文献的红外光谱无损检测研究 [J]. **光谱学与光谱分析**, 2022, **42**(10): 3097–3102.
- [23] 王晓锋, 许凯, 张靖, 等. 基于傅里叶变换红外光谱技术快速测定磺丁基-β-环糊精钠的平均取代度 [J]. **中国医药工业杂志**, 2022, **53**(9): 1322–1327.
- [24] 尚超男. 红外光谱技术应用于禁塑组分的定性定量分析研究 [D]. 海口: 海南大学, 2022.
- [25] 苗文成, 孙秉才, 王海宁, 等. 红外光谱遥测技术应用研究 [J]. **炼油技术与工程**, 2022, **52**(6): 59–63.
- [26] 太惠玲, 谢光忠, 蒋亚东. 基于气体传感器阵列的混合气体定量分析 [J]. **仪器仪表学报**, 2006, **27**(7): 666–670.
- [27] 余志荣, 洪明坚. 分组全连接的近红外光谱定量分析网络 [J]. **光谱学与光谱分析**, 2022, **42**(6): 1735–1740.
- [28] 王圣毫, 李智, 郑维平, 等. 人工神经网络在近红外光谱建模中的应用及研究现状 [J]. **红外**, 2012, **33**(8): 9–15.