

激光与光电子学进展

基于微波谐振技术的活性炭质量检测

郑家忠^{1,2}, 李志刚¹, 陈凤³, 郭忠明³, 王澍¹, 计敏^{1*}¹中国科学院合肥物质科学研究院, 安徽 合肥 230031;²中国科学技术大学, 安徽 合肥 230026;³龙岩烟草工业有限责任公司, 福建 龙岩 364030

摘要 为提高活性炭含量检测的效率与精度, 基于微波谐振技术设计了一种活性炭滤棒微波幅值变化信号采集装置, 并将高斯滤波和惩罚最小二乘算法相结合对微波幅值变化信号进行降噪和基线扣除处理。首先, 比较了不同高斯窗口长度的滤波效果, 选用非对称最小二乘法、自适应迭代重加权惩罚最小二乘法、非对称重加权惩罚最小二乘法和多约束重加权惩罚最小二乘法等 4 种处理方法对微波幅值变化信号进行基线校正, 再求出基线校正后微波幅值变化信号的峰高、峰面积与半峰全宽, 然后比较了基于支持向量回归机、偏最小二乘算法与反向传播神经网络建立的模型的预测结果。结果显示, 活性炭质量的最好模型为“峰面积-活性炭质量”, 模型决定系数为 0.9924, 平均绝对误差为 0.7979 mg, 相对标准偏差为 1.4962%。活性炭质量重复性检测最大标准差为 1.85 mg, 活性炭质量检测的最小绝对偏差为 0.03 mg, 活性炭质量检测最小相对偏差为 0.05%。该方法为烟用活性炭滤棒中活性炭的定量分析提供了一种快速有效的方法。

关键词 测量; 微波谐振技术; 基线校正; 惩罚最小二乘法; 活性炭; 质量

中图分类号 TS4; TP2

文献标志码 A

DOI: 10.3788/LOP222354

Activated Carbon Weight Detection Based on Microwave Resonance Technology

Zheng Jiazhong^{1,2}, Li Zhigang¹, Chen Feng³, Guo Zhongming³, Wang Shu¹, Ji Min^{1*}¹Hefei Institutes of Physical Science, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, Anhui, China;²University of Science and Technology of China, Hefei 230026, Anhui, China;³Longyan Tobacco Industry Co., Ltd., Longyan 364030, Fujian, China

Abstract Based on microwave resonance technology, a microwave amplitude change signal acquisition device of an activated carbon filter rod is created, and noise reduction and baseline deduction of the microwave amplitude change signal is combined with Gaussian filtering and the penalty least squares algorithm to improve the efficiency and accuracy of the detected activated carbon content. At first, the filtering effects of different Gaussian window lengths are compared. Following that, four processing methods were used to correct the baseline of the signal spectrum, including asymmetric least squares, adaptive iteratively reweighted penalized least squares, asymmetric reweighted penalized least squares, and multi-constrained reweighted penalized least squares, the peak height, peak area, and half-peak width of the microwave amplitude change signals after baseline correction were obtained. The models developed using the partial least squares algorithm, neural networks, and support vector regression were then compared. Finally, the repeatability, accuracy, and sensitivity of the detection device were assessed. The results revealed that the best model for activated carbon weight was “peak area-activated carbon weight” with a model determination coefficient of 0.9924, an average absolute error of 0.7979 mg, and a relative standard deviation of 1.4962%. The maximum standard deviation of activated carbon weight repeatability was 1.85 mg, the minimum absolute deviation for activated carbon weight testing was 0.03 mg, and the minimum relative deviation of activated carbon weight detection was 0.05%, resulting in a quick and effective method for quantifying analysis of activated carbon in an activated carbon filter rod for tobacco.

Key words measurement; microwave resonance technology; baseline correction; penalized least squares; activated carbon; weight

收稿日期: 2022-08-21; 修回日期: 2022-09-29; 录用日期: 2022-10-09; 网络首发日期: 2022-10-19

通信作者: *jimin@aiofm.ac.cn

1 引言

随着卷烟开始向无公害方向发展,着力开发低焦油、低危害的卷烟产品是顺应卷烟市场发展潮流的必要之举。卷烟滤嘴在卷烟降焦减害中发挥着举足轻重的作用,在卷烟过滤嘴中添加活性炭、聚乙二醇、多孔葛根颗粒等添加剂能够起到降低烟气有害成分释放量、提升卷烟品质等作用^[1],是卷烟降焦减害的一个重要发展方向^[2]。其中,活性炭因多孔、体表面积大等物理特性,具备高效的吸附能力,在复合型卷烟过滤嘴的生产中得到广泛应用。虽然活性炭能够减少有害烟气的释放,但同时也会造成香烟中自然香气的减少,导致香气量不足,从而降低卷烟的抽吸品质^[3]。因此,为了在降焦减害的同时保证卷烟的感官质量,需要精准控制过滤嘴中活性炭的施加量。受限于滤嘴加工工艺,不同批次生成的卷烟过滤嘴中的活性炭含量具有一定差异,目前,行业内主要通过人工剖切滤嘴,使用天平称重实现活性炭含量的检测,该方法耗时费力、无法满足大规模抽样检测的需求,更无法对活性炭滤棒的实际生产情况进行评估。因此,在卷烟生产的质量管控环节亟须一种能够实现无损、快速测量滤嘴中活性炭质量的方法。

微波是波长范围在 1 mm~1 m 之间,频率范围在 300 MHz~300 GHz 之间的电磁波,具有频率高、频带宽、波长短等特点。微波测量方法主要包括反射法、透射法和共振法^[4],其中,微波谐振法多用于体积较小物质参数的测量。微波谐振法基于微波谐振腔微扰理论实现样品介电属性的检测^[5],基本检测原理为:一定介

电常数的介质放入谐振腔内部会引起谐振频率 f 和品质因数 Q 的变化,通过测量谐振频率 f 和品质因数 Q 即可获得被测样品的电磁特性。多年来,微波谐振技术以其无损、灵敏、快速、安全等特性在各个行业中得到广泛应用,该技术目前已在烟草原料及制品的水分和密度检测领域得到一定的应用^[6-8],但在卷烟滤嘴活性炭测量中尚未有报道。

活性炭的介电常数大于 11^[9],而滤棒的主要成分醋酸纤维丝束的介电常数约为 1~5^[10],两者差异较大,因此,可以使用微波谐振技术对二者进行区分并反演活性炭的质量。本文将微波谐振技术用于复合型卷烟滤棒活性炭含量的测量。首先,设计了一套微波谐振腔微扰测量装置用于快速采集活性炭滤棒的微波幅值变化信号;其次,研究了微波幅值变化信号的预处理算法,提高信号的信噪比;然后,求取了预处理后微波幅值变化信号的特征值;最后,基于支持向量回归(SVR)算法构建了“特征值-活性炭质量”回归模型,实现了滤嘴中活性炭质量的测量。所提基于微波谐振技术的活性炭质量检测方法不需人工,测量一支滤棒只需 0.5 s,为大规模批量检测提供了一种快速、无损、准确的方法。

2 实验方法

2.1 实验样品

实验对象为烟用活性炭滤棒(以下简称滤棒)。图 1 为实际滤棒的基本结构,其中,A 部分为滤嘴段,B 部分为活性炭段,C 部分为烟丝连接段,在实验中需要准确检测出 B 部分活性炭的质量。

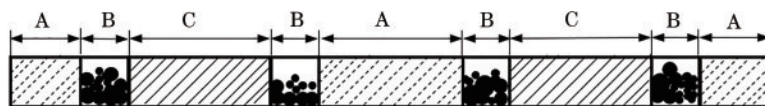


图 1 活性炭滤棒示意图

Fig. 1 Schematic diagram of activated carbon filter rods

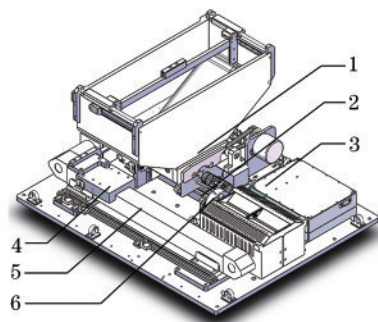
2.2 实验装置

图 2 为基于微波谐振腔研发的测量装置,本文基于该装置实现了滤棒中活性炭质量的测量。该装置主要由下料装置 1、滤棒导槽 2、滤棒推动滑块 4、推动平台 5、微波谐振腔 6 及微波信号发生及数据处理模块 3 等构成。

2.3 微波幅值变化信号预处理

2.3.1 微波幅值变化信号采集

检测装置的检测过程为:下料装置以每秒 120 支的速度将滤棒投入到滤棒导槽中,再由滤棒推动滑块推动滤棒匀速(1.35 m/s)通过微波谐振腔,实现对滤棒等间距采样。滤棒匀速通过微波谐振腔时,对微波谐振腔造成微扰,微扰后,谐振频率 f_0 发生偏移,信号功率 $p(f_0)$ 因为谐振频率偏移而衰减,信号处理模块会根据微波谐振腔微扰前后的信号功率改变量 $\Delta p(f)$



1: feeding device; 2: filter rod guide groove; 3: microwave signal generation and data processing module; 4: filter rod push slider; 5: push platform; 6: microwave resonator

图 2 活性炭质量检测装置示意图

Fig. 2 Schematic diagram of activated carbon weight detection device

获得谐振频率的改变量 Δf , 然后将谐振频率改变量转换为电压信号, 最后经过模数转换电路, 将电压信号转换为数字信号(微波幅值变化信号)。图 3(a)为微波谐振腔微扰前后的谐振曲线, 横坐标 f 为信号频率, 纵坐标 $p(f)$ 为信号功率, f_0 为微波谐振腔微扰前的谐振

频率, f_s 为微波谐振腔为微扰后的谐振频率, 图 3(b)为一根滤棒匀速通过微波谐振腔, 数据处理模块输出的微波幅值变化信号, 横坐标为采样点, 纵坐标微波幅值变化信号, A 部分为烟丝连接段, B 部分为活性炭段, C 部分为滤嘴段。

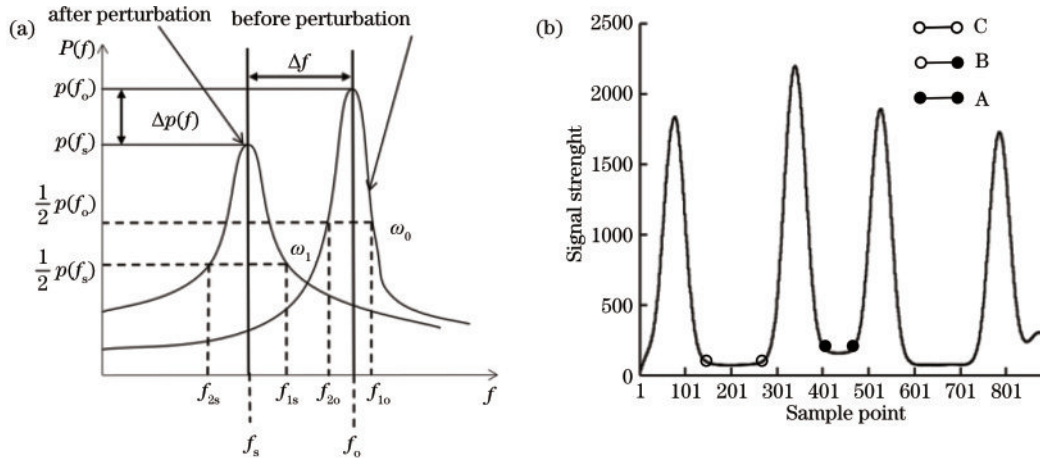


图 3 微波谐振腔微扰前后谐振曲线及微波幅值变化信号示意图。(a) 谐振曲线;(b) 微波幅值变化信号示意图

Fig. 3 Schematic diagram of the resonance curve and microwave amplitude change signal before and after perturbation of microwave resonator. (a) Resonance curve; (b) schematic diagram of a microwave amplitude change signal

2.3.2 基于高斯滤波的信号滤波

采集到的微波幅值变化信号包含滤棒的信号和各种噪声信号(采集、处理和传输过程中的信号), 在定量分析中, 噪声会带来误差, 因此, 首先应剔除噪声信号。在恒温恒湿条件下, 将图 1 所示的滤棒静置于微波谐振腔中, 检测装置正常工作, 连续采集若干个数据, 进行统计分析。图 4 为噪声统计结果, 由图 4 可知, 噪声呈正态分布, 为高斯噪声。

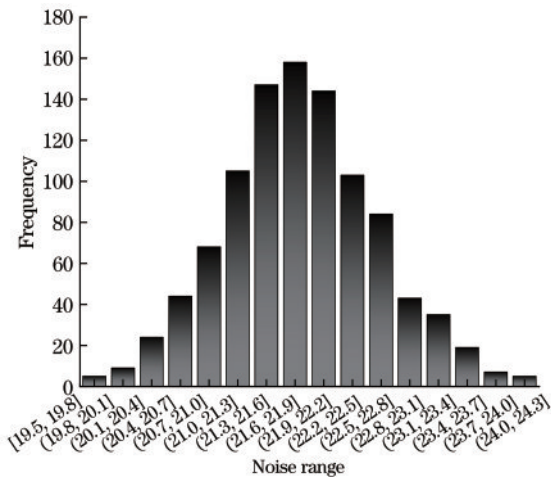


图 4 数据直方图

Fig. 4 Data histogram

高斯滤波是一种线性平滑滤波, 对于高斯噪声具有较好的抑制效果, 因此本文研究采用高斯滤波器进行信号预处理。高斯滤波满足越接近滤波位置权值越大的规律, 且权值分布符合高斯分布

$$y(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right), \quad (1)$$

式中: σ 表示高斯函数的宽度; σ 越大高斯滤波器的频带越宽, 平滑程度越好; x 表示当前点到对应滤波点的距离; $y(x)$ 表示当前点在滤波点的权值。

本文用二项式的展开系数作高斯函数的逼近, 二项式的展开系数可由杨辉三角形确定, 用杨辉三角形的第 n 行作为高斯滤波器的一个具有 n 个点的一维逼近。在实时系统中, 将 n 个连续采样值作为一个序列, 序列长度始终固定为 n , 每次采样一个新数据放在序列尾部, 同时删除序列头部的一个数据, 将序列中所有数据的加权结果作为滤波结果, 不同 n 值的滤波结果会有差异。

对于长度为 $m (m \geq n)$ 的待处理数据, 则 x 处的滤波结果为

$$g(x) = [y_{x-(n-1)/2} \cdots y_x \cdots y_{x+(n-1)/2}] \times \mathbf{w}^T \times \frac{1}{2^{n-1}}, \quad (2)$$

式中: y 为待处理数据; x 为当前滤波位置; \mathbf{w} 为高斯滤波器的模板权值, 是 $1 \times n$ 的行向量, 当 $n = 15$ 时, $\mathbf{w} = [1 \ 14 \ 91 \ 364 \ 1001 \ 2002 \ 3003 \ 3432 \ 3003 \ 2002 \ 1001 \ 364 \ 91 \ 14 \ 1]$ 。

2.3.3 基于惩罚最小二乘算法的基线校正

由于滤棒制造工艺, 滤嘴段与烟丝段介电常数不同, 因此采集的微波幅值变化信号不同, 整个微波幅值变化信号的基线会产生一定的漂移, 如图 5 中虚线所示, 基线漂移会导致所求峰高与峰面积偏离真实值, 给定量分析带来误差。在起始点由于谐振腔内部介电常

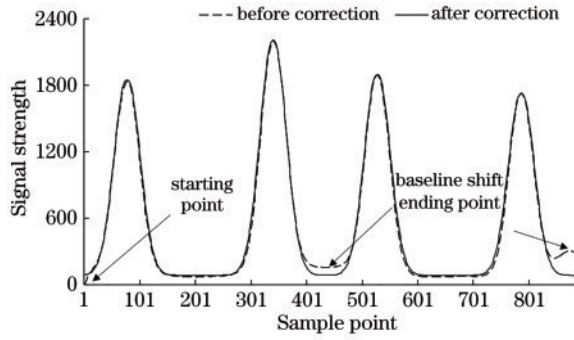


图 5 基线校正前后微波信号

Fig. 5 Microwave signals before and after baseline correction

数变化较快,微波幅值变化信号变化过快,给波峰左边界的确定带来了困难。在结束点由于滤棒推动滑块的原因,微波幅值变化信号会出现一个小峰,给波峰右边界的确定带来了困难。因此,需要消除样品本身带来的不利因素,准确地计算出峰高与峰面积等。图 5 为基线校正前后的微波幅值变化信号,基线扣除前后微波幅值变化信号的整体趋势没有改变,基线趋于一条水平线,峰的左右边界明显。因此,本文采用基线校正算法消除样品本身带来的不利因素。常用的基线校正方法包括:多项式拟合^[11-12]、形态学^[12-13]、小波变换^[14]、傅里叶变换^[15]和惩罚最小二乘法^[16]。在这些方法中,惩罚最小二乘法因其在基线扣除中的高效性和简便性,一直被广泛采用。1922年,Whittaker^[17]首次提出惩罚最小二乘法并用作数据平滑,此后,越来越多的科研人员在惩罚最小二乘法的基础上做出了改进^[18-21]。

2.4 微波幅值变化信号特征提取

不同质量的活性炭匀速通过微波谐振腔时,引起的谐振频率的改变量不同,导致最终输出的微波幅值变化信号不同。因此,本文通过提取微波幅值变化信号的特征值,如峰高(H)、峰面积(A)、半峰全宽(W)等,建立微波幅值变化信号特征值与活性炭质量的模型。为实现特征值的精准识别,建立了以下算法,主要包括波峰区域检测、提取特征值峰高、峰面积、半峰全宽,基本实现步骤如流程图图 6 所示。

波峰特征点包括:波峰左边界、波峰右边界、波峰峰值点,提取方法如下。

$$\text{若 } \begin{cases} y'(i) = 0 \\ y'(i+1) > 0 \end{cases}, \text{ 则 } (i, y(i)) \text{ 为波峰左边界。}$$

$$\text{若 } \begin{cases} y'(i) \geq 0 \\ y'(i+1) < 0 \end{cases} \text{ 或 } \begin{cases} y'(i-1) > 0 \\ y'(i) \leq 0 \end{cases}, \text{ 则 } (i, y(i))$$

为波峰峰值点。

$$\text{若 } \begin{cases} y'(i-1) < 0 \\ y'(i) = 0 \end{cases}, \text{ 则 } (i, y'(i)) \text{ 为波峰右边界。}$$

其中, $y(i)$ 为采集的微波信号, $y'(i)$ 为差分信号, i 为采样点。

图 7 为波峰特征点及特征值,其中,

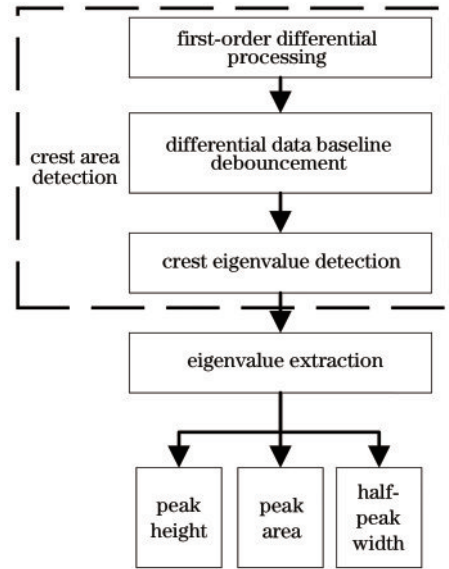


图 6 峰高与峰面积获取流程图

Fig. 6 Flow chart of peak height and peak area acquisition

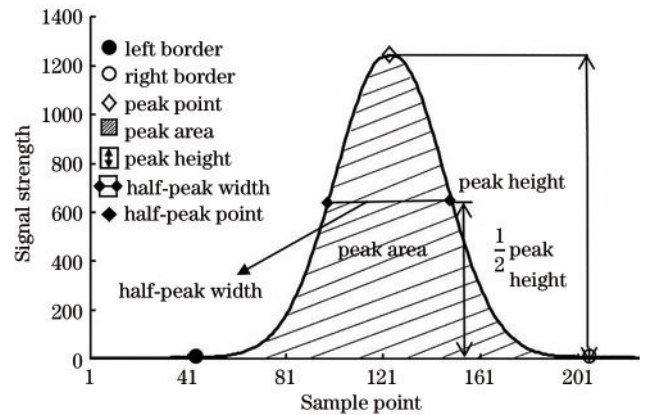


图 7 提取特征值

Fig. 7 Eigenvalue extraction

$$\begin{cases} A = \int_{i_{\text{left}}}^{i_{\text{right}}} y(i) di \\ H = y(i_{\text{peak}}) \\ W = i_{0.5H\text{right}} - i_{0.5H\text{left}} \end{cases}, \quad (3)$$

式中: i_{right} 为波峰右边界; i_{left} 为波峰左边界; i_{peak} 为波峰峰值点; $i_{0.5H\text{right}}$ 为半波峰右边界点; $i_{0.5H\text{left}}$ 为半波峰左边界点。

其中,波峰区域,即波峰左边界至波峰右边界包含了活性炭段的信息,非波峰区域分别包含了滤嘴段与烟丝连接段的信息。

2.5 基于 SVR 的“特征值-活性炭质量”回归模型

SVR 是一种依照有限样本信息,在学习及泛化能力良好的条件下,将输入非线性转化到高维空间的决策函数,从而实现线性回归^[22],在处理小样本、非线性问题上具有很大的优势,同时在数据集、参数确定的情况下能够得到全局最优解,目前在回归分析有较为成功的应用^[23],因此采用 SVR 对活性炭质量进行评估。

2.5.1 SVR 回归算法

支持向量机是一种通过构建最小间隔划分超平面的分类算法^[24],对于给定的样本集

$$D = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_m, y_m)\}, (y_i \in \mathbf{R}). \quad (4)$$

通过训练学习得到一个回归模型 $f(x)$, $f(x)$ 与 y 尽可能相近,

$$f(x) = \omega^T \varphi(x) + b, \quad (5)$$

式中: ω 和 b 为待确定的参数; $\varphi(x)$ 为非线性映射函数。

SVR 构建了一个宽度为 2ϵ 的间隔带,如图 8 所示,当训练样本落在间隔带以外时会造成计算损失。

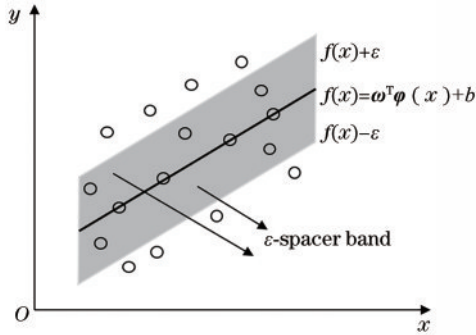


图 8 支持向量机回归示意图

Fig. 8 Support vector machine regression diagram

SVR 问题可表示为

$$\begin{cases} \min_{\omega, b, \xi, \hat{\xi}} \frac{1}{2} \omega^2 + c \sum_{i=1}^m (\xi_i + \hat{\xi}_i) \\ f(x_i) - y_i \leq \epsilon + \xi_i \\ y_i - f(x_i) \leq \epsilon + \hat{\xi}_i \\ \hat{\xi}_i \geq 0, \xi_i \geq 0 \end{cases}, (i = 1, 2, \dots, m), \quad (6)$$

式中: c 为惩罚因子; ξ_i 和 $\hat{\xi}_i$ 是 1 对松弛因子。为了求解上述问题,引入拉格朗日函数将原问题转换为对 SVR 的求偶问题,通过变换求解得到目标方程为

$$f(x) = \sum_{i=1}^m [(\hat{\alpha}_i - \alpha_i) \kappa(x_i, x_j)] + b, \quad (7)$$

式中: $\hat{\alpha}_i$ 和 α_i 为对偶变量; $\kappa(x_i, x_j) = \varphi(x_i)^T \varphi(x_j)$ 。

2.5.2 活性炭质量的回归模型建立

采集完活性炭的微波幅值变化信号后,破坏滤棒,用精度为 0.1 mg 的电子天平称量 B 部分活性炭的质量(10 次测量的平均值),然后提取微波幅值变化信号特征值峰高、半峰全宽及峰面积,建立“特征值-活性炭质量”的模型。

为消除特征值的数值大小不平衡、量纲不同对预测结果的影响,对原始数据进行归一化处理(见下式),将所有数据归一化到区间 $[0, 1]$ 内。

$$V_{nor} = \frac{V_{original} - V_{min}}{V_{max} - V_{min}}, \quad (8)$$

式中: V_{nor} 为归一化值; $V_{original}$ 为原始值; V_{min} 为最小值; V_{max} 为最大值。

为获得最佳的回归模型,建立了一元回归模型与多元回归模型,各模型核函数选择线性核函数,不同模型的惩罚因子 c 、损失函数值 p 不同。表 1 展示了基于 SVR 建立的不同“特征值-活性炭质量”模型的模型公式,其中, AHW 代表特征值峰面积、峰高、半峰全宽与活性炭质量进行多元回归,下同。

表 1 活性炭质量建模结果

Table 1 Modeling results of activated carbon weight

Eigenvalue	Model formula
A	$M = 42.803A + 34.418$
H	$M = 40.089H + 33.625$
W	$M = 55.370W + 35.171$
AH	$M = 23.5507A + 17.7795H + 34.6415$
AW	$M = 33.7886A + 10.2371W + 36.0585$
HW	$M = 31.1707H + 13.6721W + 33.7931$
AHW	$M = 24.7973A + 14.8684W + 4.2529W + 34.1854$

3 实验结果与讨论

3.1 高斯滤波器的优化

基于 2.3.2 节对微波幅值变化信号噪声的分析结果,本文采用高斯滤波器对微波幅值变化信号进行平滑滤波。在滤波过程中,高斯滤波器的宽度对信号的信噪比(R_{SN})有较大影响,为尽可能提升信噪比,获得最佳的滤波效果,选取了不同长度的高斯滤波器开展优化实验,并使用 R_{SN} 和均方根误差(R_{MSE})对滤波效果进行评价,其中 R_{MSE} 越小越好, R_{SN} 越大越好。

$$\begin{cases} R_{SN} = 10 \lg \sum_{i=1}^n \frac{y(i)^2}{[y(i) - \hat{y}(i)]^2} \\ R_{MSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [y(i) - \hat{y}(i)]^2} \end{cases}, \quad (9)$$

式中: n 为微波幅值变化信号的采样点数; $y(i)$ 为原始信号; $\hat{y}(i)$ 为滤波后的信号。表 2 展示了不同高斯窗口长度的滤波结果。

表 2 不同高斯窗口长度的滤波结果

Table 2 Filtering results with different Gaussian window lengths

n	19	17	15	13	11	9	7
R_{SN} /dB	13.4944	13.3680	13.7638	11.8601	11.3876	11.8142	6.6117
R_{MSE}	0.02689	0.00335	0.00266	0.00300	0.00297	0.00267	0.03575

从表 2 可以观察到,当高斯窗口长度 $n=15$ 时,微波信号的 R_{SN} 达到了 13.7816 dB, R_{MSE} 为 0.00266, 此时滤波效果最佳。因此,高斯滤波器的宽度设置为 15。

3.2 基线校正算法的优化

为获得最优的基线扣除效果,本文选取了 4 种具有代表性和比较新颖的惩罚最小二乘法及其改进的算法[非对称最小二乘法(ASLS)^[18]、自适应迭代重加权惩罚最小二乘法(AIRPLS)^[19]、非对称重加权惩罚最小二乘法(ARPLS)^[20]、多约束重加权惩罚最小二乘法(DRPLS)^[21]]进行微波幅值变化信号基线校正。

4 种基线校正方法拟合得到基线如图 9 所示。从图 9 可以看出,DRPLS 算法对基线有较好的拟合效果,所得到的基线能够更好地拟合本底,与微波幅值变化信号真实基线最为接近,可以精确拟合微波幅值变化信号特征峰附近的基线,基线校正后的本底扣除最为显著。ASLS、AIRPLS 算法的估计基线沿着底部中间信号穿过,不是沿着微波幅值变化信号真实基线的底部,这会造成校正后微波幅值变化信号向下凹陷,导致微波信号小于真实值。ARPLS 算法所得基线存在不同程度的偏低现象,从而导致信号高于真实值,两者均会影响定量分析的准确性。为了更具体地比较各种算法的拟合效果,求取基线校正后取非特征峰区域信号的方差,方差越小,说明基线校正后信号的基线越平缓,拟合效果越好^[25],去除特征峰后信号强度方差如表 3 所示。

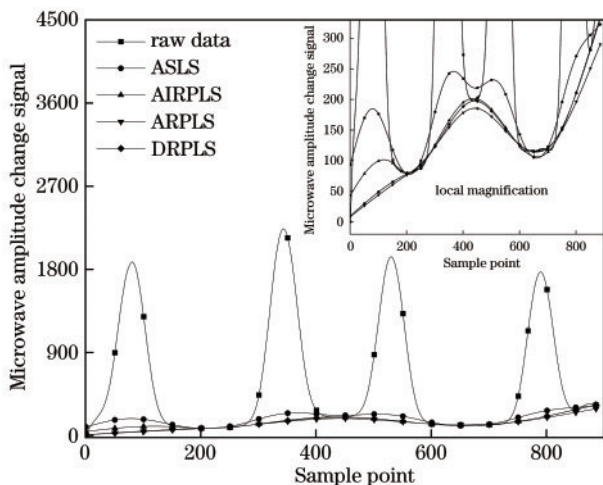


图 9 原始微波信号及基线校正结果

Fig. 9 Original microwave signal and baseline correction results

由表 3 可以看出,DRPLS 算法在去除特征峰后信号的方差较小,为 0.3523,表明 DRPLS 算法在样品非特征峰区域的基线最平缓,波动最小,拟合效果最佳。综上所述,DRPLS 算法可以有效去除微波幅值变化信号的基线,为活性炭质量的定性分析的精度提供了保障。

表 3 去除特征峰后信号的方差

Table 3 Variance of the signal after removing characteristic peaks

Baseline correction algorithm	Variance
ASLS	0.8649
AIRPLS	0.7577
ARPLS	0.5620
DRPLS	0.3523

3.3 多方法回归性能评估

本文采用 SVR、反向传播(BP)神经网络^[26-27]与偏最小二乘(PLS)^[28]3 种建模方法建立模型,选取 80% 的数据进行建模,并利用预测集中的 20% 的未知样本的预测能力来评估 PLS、SVR 和 BP 建立的模型的实际预测能力。

3.3.1 评价指标

在数值回归分析中,一般采用决定系数(R^2)、平均绝对误差(M_{AE})、相对标准偏差(R_{SD})作为评价模型的指标。因此,在本节实验中,采用上述三个指标对采用的回归方法的性能进行评估,各指标的计算公式为

$$\left\{ \begin{array}{l} R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (m_{\text{weigh}} - m_{\text{calculate}})^2}{\sum_{i=1}^n (\bar{m} - m_{\text{calculate}})^2} \\ M_{AE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |m_{\text{weigh}} - m_{\text{calculate}}| \\ R_{SD} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|m_{\text{weigh}} - m_{\text{calculate}}|}{m_{\text{weigh}}} \times 100\% \end{array} \right. \quad (10)$$

式中: $m_{\text{calculate}}$ 为模型预测值; m_{weigh} 为活性炭称重值; \bar{m} 为称重值的平均值; n 为称重值的个数。

3.3.2 不同模型的预测结果

表 4 为 3 种不同建模方法建立的模型的预测效果。从表 4 可以看出,SVR 建立的模型,评价指标 M_{AE} 、 R_{SD} 均优于 PLS 与 BP 建立的模型,而 R^2 优于 BP 建立的模型,略低于 PLS 建立的模型。SVR 建立的模型中,不同特征值与活性炭质量建立的模型的评价指标不相同,最优的模型为“峰面积-活性炭质量”模型,其预测结果 M_{AE} 为 0.7979 mg, R^2 为 0.9924, R_{SD} 为 1.4962%, 优于另外 6 种模型。因此,为了更加准确地预测出烟用活性炭滤棒中活性炭的质量,应采用 SVR 建立的“峰面积-活性炭质量”模型。

3.4 实验验证

为验证活性炭质量测量方法的检测性能,利用重复性和精度对测量方法进行评价。

3.4.1 重复性实验

为评价活性炭质量检测的重复性,对同一支滤棒测量 10 次,测量结果见表 5。从表 5 可以看出,检测结果最大标准差为 1.85 mg,最小标准差为 0.91 mg,测量结果的重复性较好。

表 4 不同建模方法的预测效果比较

Table 4 Comparison of prediction effects of different modeling methods

Modeling method	SVR			PLS			BP			
	M_{AE}/mg	R^2	$R_{SD}/\%$	M_{AE}/mg	R^2	$R_{SD}/\%$	M_{AE}/mg	R^2	$R_{SD}/\%$	
Unary regression	A	0.7979	0.9924	1.4962	1.0492	0.9904	1.8462	1.0633	0.9898	1.8975
	H	1.2960	0.9797	2.1979	1.3205	0.9797	2.2553	1.3793	0.9807	2.3374
	W	3.2299	0.8533	5.9031	3.3309	0.8555	6.2243	3.4779	0.8453	6.4493
Multiple regression	AH	0.8643	0.9921	1.5569	0.8880	0.9923	1.6042	0.9274	0.9918	1.7285
	AW	1.1155	0.9870	2.1967	1.0355	0.9905	1.8114	1.2560	0.9820	2.4971
	HW	1.1639	0.9845	2.1777	1.1527	0.9846	2.0913	1.2467	0.9818	2.3107
	AHW	0.8439	0.9918	1.6362	0.8950	0.9922	1.6094	0.9714	0.9863	1.8172

表 5 活性炭质量检测重复性($n=10$)

Table 5 Repeatability of activated carbon weight detection ($n=10$)

unit: mg

Serial number	M1	M2	M3	M4
1	39.75	56.71	60.33	70.01
2	38.83	54.12	60.92	72.00
3	40.66	54.60	57.20	70.70
4	39.99	54.13	56.42	70.54
5	37.88	58.33	57.60	70.27
6	37.92	56.51	60.67	71.08
7	39.41	53.28	55.51	68.86
8	39.77	53.19	56.29	68.86
9	38.09	55.24	58.27	72.17
10	38.83	55.33	57.18	71.28
Weight value	39.2	55.3	58.9	70.1
Standard deviation	0.91	1.56	1.85	1.08

3.4.2 活性炭质量精度实验

为评价活性炭质量检测的精度,对同一支滤棒测量 10 次,测量结果见表 6。从表 6 可以看出,检测结果的最大绝对误差为 3.39 mg,最小绝对误差为 0.03 mg,

最大相对误差为 5.76%,最小相对误差为 0.05%,最小 M_{AE} 为 0.80 mg,最小 R_{SD} 为 1.41%,测量结果具有较高的精度。

表 6 活性炭质量检测精度结果

Table 6 Precision results of activated carbon weight detection

Serial number	Absolute error /mg				Relative error /%			
	Location 1	Location 2	Location 3	Location 4	Location 1	Location 2	Location 3	Location 4
1	0.55	1.41	1.43	0.09	1.39	2.56	2.43	0.13
2	0.37	1.18	2.02	1.90	0.93	2.13	3.42	2.72
3	1.46	0.70	1.70	0.60	3.73	1.26	2.89	0.86
4	0.79	1.17	2.48	0.44	2.02	2.12	4.21	0.62
5	1.32	3.03	1.30	0.17	3.36	5.47	2.21	0.24
6	1.28	1.21	1.77	0.98	3.26	2.20	3.01	1.39
7	0.21	2.02	3.39	1.24	0.53	3.66	5.76	1.78
8	0.57	2.11	2.61	1.24	1.44	3.82	4.43	1.76
9	1.11	0.06	0.63	2.07	2.83	0.12	1.07	2.95
10	0.37	0.03	1.72	1.18	0.95	0.05	2.92	1.69
Weight value	39.2	55.3	58.9	70.1	39.2	55.3	58.9	70.1
Average value	0.80	1.29	1.91	0.99	2.05	2.34	3.23	1.41

4 结 论

本文利用微波谐振腔采集了烟用活性炭滤棒的微波幅值变化信号,并建立了一种活性炭质量的测量方法,首先,将原始微波幅值变化信号进行高斯滤波和基线校正,然后提取微波幅值变化信号的峰面积等特征值,最后基于 SVR 建立活性炭质量与峰面积的模型。结果表明,该方法具有较高的活性炭质量检测精度和检测速度。活性炭质量重复性检测的最大标准差为 1.85 mg,最小为 0.91 mg,活性炭质量检测的绝对误差为 0.03~3.39 mg,活性炭质量检测的相对误差为 0.05%~5.76%,测量一支滤棒仅需要 0.5 s。该方法在卷烟滤嘴活性炭质量的无损、快速、高精度测量中具有较好的应用前景。

参 考 文 献

- [1] 孙学辉,杨松,孙培健,等.基于卷烟降焦减害的滤嘴添加剂研究与应用进展[J].烟草科技,2017,50(2):86-96.
Sun X H, Yang S, Sun P J, et al. Progress in research and application of filter additives to reducing tar and harmful components in cigarette smoke[J]. Tobacco Science & Technology, 2017, 50(2): 86-96.
- [2] 何景福.新型材料在卷烟降焦减害中的应用[J].郑州轻工业学院学报(自然科学版),2007,22(S1):53-57.
He J F. Application of new type materials in reducing the tar and harmful components of cigarette smoke[J]. Journal of Zhengzhou University of Light Industry (Natural Science), 2007, 22(S1): 53-57.
- [3] 解晓翠,常纪恒,于川芳.活性炭在卷烟滤嘴中的应用研究综述[J].郑州轻工业学院学报(自然科学版),2012,27(2):40-45.
Xie X C, Chang J H, Yu C F. Review of the application research of activated carbon in cigarette filter[J]. Journal of Zhengzhou University of Light Industry (Natural Science), 2012, 27(2): 40-45.
- [4] 朱小会,陈艳,姚毅.微波检测在烟草水分检测中的应用[J].中国西部科技(学术),2007,6(9):39,41.
Zhu X H, Chen Y, Yao Y. The application of the microwave in the testing of the tobacco water content[J]. Science and Technology of West China, 2007, 6(9): 39, 41.
- [5] 龚志文.基于微波技术的烟用胶囊制品检测方法与系统研究[D].合肥:中国科学技术大学,2018.
Gong Z W. Research on detection method and system of tobacco capsules products based on microwave technology [D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2018.
- [6] 徐达旺,张济民,王永军,等.利用微波谐振技术检测物体密度的软件设计[J].电子测量技术,2016,39(5):167-170.
Xu D W, Zhang J M, Wang Y J, et al. Software design of material density detecting by using microwave resonant technology[J]. Electronic Measurement Technology, 2016, 39(5): 167-170.

- [7] 张世伟.卷烟水分几种快速测量方法的比较研究[J].科技与企业,2012(18):278-279.
Zhang S W. Comparative study on several fast measurement methods of cigarette moisture[J]. Science-Technology Enterprise, 2012(18): 278-279.
- [8] 官长荣,宋朝鹏,赵明月,等.微波技术在烟草行业中的应用[J].中国烟草科学,2003,24(3):34-36.
Gong C R, Song C P, Zhao M Y, et al. Application of microwave technology in tobacco industry[J]. Chinese Tobacco Science, 2003, 24(3): 34-36.
- [9] 刘彦超,刘海玉,乔晓磊,等.活性炭微观结构与介电性能的研究[J].炭素技术,2019,38(3):15-19.
Liu Y C, Liu H Y, Qiao X L, et al. Microstructures and dielectric properties of activated carbons[J]. Carbon Techniques, 2019, 38(3): 15-19.
- [10] 卢智远,孙文权,吴志刚,等.烟支湿度与密度检测的微波谐振腔传感器研究[J].传感技术学报,2007,20(5):1030-1033.
Lu Z Y, Sun W Q, Wu Z G, et al. A study on microwave resonance cavity sensor for detecting cigarette humidity and density[J]. Chinese Journal of Sensors and Actuators, 2007, 20(5): 1030-1033.
- [11] 宁志强,刘家祥,吴越,等.基于改进迭代多项式拟合的红外光谱基线校正方法[J].激光与光电子学进展,2020,57(3):033001.
Ning Z Q, Liu J X, Wu Y, et al. Infrared spectrum baseline correction method based on improved iterative polynomial fitting[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2020, 57(3): 033001.
- [12] González-Vidal J J, Pérez-Pueyo R, Soneira M J. Automatic morphology-based cubic p-spline fitting methodology for smoothing and baseline-removal of Raman spectra[J]. Journal of Raman Spectroscopy, 2017, 48(6): 878-883.
- [13] 司赶上,刘家祥,李振钢,等.基于形态学与多项式拟合的紫外拉曼荧光背景扣除算法研究[J].光学学报,2022,42(22):2230001.
Si G S, Liu J X, Li Z G, et al. Research on fluorescence background subtraction algorithm of UV Raman based on morphology and polynomial fitting[J]. Acta Optica Sinica, 2022, 42(22): 2230001.
- [14] 郭媛,赵学珏,张锐,等.小波变换应用于谐波谱线的噪声滤除与基线校正[J].光谱学与光谱分析,2013,33(8):2172-2176.
Guo Y, Zhao X H, Zhang R, et al. The noise filtering and baseline correction for harmonic spectrum based on wavelet transform[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2013, 33(8): 2172-2176.
- [15] 王丽,邵利民.基线对傅里叶变换红外光谱的目标因子分析结果的影响研究[J].分析化学,2021,49(3):474-481.
Wang L, Shao L M. Influence of baseline on target factor analysis results of Fourier transform infrared spectroscopy [J]. Chinese Journal of Analytical Chemistry, 2021, 49 (3): 474-481.
- [16] Chen Y L, Dai L K. An automated baseline correction method based on iterative morphological operations[J].

- Applied Spectroscopy, 2018, 72(5): 731-739.
- [17] Whittaker E T. On a new method of graduation[J]. Proceedings of the Edinburgh Mathematical Society, 1922, 41: 63-75.
- [18] Eilers P H C. A perfect smoother[J]. Analytical Chemistry, 2003, 75(14): 3631-3636.
- [19] Zhang Z M, Chen S, Liang Y Z. Baseline correction using adaptive iteratively reweighted penalized least squares[J]. Analyst, 2010, 135(5): 1138-1146.
- [20] Baek S J, Park A, Ahn Y J, et al. Baseline correction using asymmetrically reweighted penalized least squares smoothing[J]. Analyst, 2015, 140(1): 250-257.
- [21] Xu D G, Liu S, Cai Y Y, et al. Baseline correction method based on doubly reweighted penalized least squares[J]. Applied Optics, 2019, 58(14): 3913-3920.
- [22] 杨友良, 王禄, 马翠红. 改进粒子群算法优化 SVR 的 LIBS 钢液元素定量分析[J]. 激光与光电子学进展, 2020, 57(5): 053002.
Yang Y L, Wang L, Ma C H. Quantitative analysis of liquid steel element in LIBS using SVR improved by particle swarm optimization[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2020, 57(5): 053002.
- [23] 陈鹏, 齐超, 刘人玮, 等. 基于支持向量机回归的 LIBS 飞灰含碳量定量分析[J]. 光学学报, 2022, 42(9): 0930003.
Chen P, Qi C, Liu R W, et al. Quantitative analysis of carbon content in fly ash using LIBS based on support vector machine regression[J]. Acta Optica Sinica, 2022, 42(9): 0930003.
- [24] 周志华. 机器学习[M]. 北京: 清华大学出版社, 2016.
Zhou Z H. Machine learning[M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2016.
- [25] 江晓宇, 李福生, 王清亚, 等. 基于惩罚最小二乘算法的土壤重金属检测光谱基线校正[J]. 农业机械学报, 2021, 52(8): 205-212.
Jiang X Y, Li F S, Wang Q Y, et al. Spectrum baseline correction for soil heavy metal detection based on penalized least squares algorithm[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2021, 52(8): 205-212.
- [26] 胡军, 刘燕德, 孙旭东, 等. 基于 BP 神经网络的太赫兹时域光谱对面粉中苯甲酸的定量检测研究[J]. 激光与光电子学进展, 2020, 57(7): 0730002.
Hu J, Liu Y D, Sun X D, et al. Quantitative determination of benzoic acid in flour based on terahertz time-domain spectroscopy and BPNN model[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2020, 57(7): 0730002.
- [27] 刘秀航, 黄宇辉, 张艳喜, 等. 基于 BP 神经网络补偿卡尔曼滤波的激光-MIG 复合焊缝熔宽在线检测[J]. 中国激光, 2022, 49(16): 1602011.
Liu X H, Huang Y H, Zhang Y X, et al. Online weld width detection of laser-MIG hybrid welding based on Kalman filter algorithm compensated by BP neural network[J]. Chinese Journal of Lasers, 2022, 49(16): 1602011.
- [28] 杨晖, 黄林, 刘木华, 等. 激光诱导击穿光谱结合移动窗口偏最小二乘对脐橙中重金属 Cd 的检测[J]. 激光与光电子学进展, 2017, 54(8): 083002.
Yang H, Huang L, Liu M H, et al. Detection of cadmium in navel orange by laser-induced breakdown spectroscopy combined with moving window partial least square[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2017, 54(8): 083002.