

基于太赫兹光谱检测的危险品模糊识别研究

刘文涛¹, 李景文¹, 杜春燕², 孙志慧³

1. 北京航空航天大学电子信息工程学院, 北京 100191

2. 中国科学院化学研究所, 北京 100190

3. 北京理工大学光电工程系, 北京 100081

摘要 在采用太赫兹时域光谱(THz-TDS)技术对7种常见危险品进行实验研究并得到它们在0.2~2.6 THz频率范围的特征吸收谱的基础上,用模糊识别方法对7种常见危险品的太赫兹特征吸收谱进行了训练和识别。将爆炸物RDX(黑索金)、 γ -HNIW、DNT(2,4-二硝基甲苯)及毒品MA(甲基苯丙胺)、氯胺酮等的不同特征吸收峰作为模糊聚类分析数据源,利用相关系数法建立模糊相似矩阵,借助传递闭包法获得模糊等价矩阵,形成标准太赫兹吸收光谱模型库,采用极差分析进行数据预处理,计算海明贴近度,识别待检物品为隐蔽在军服后的RDX和毒品MDA(替苯丙胺)。研究表明,由分子间相互作用或声子共振模式引起的不同特征吸收是确定危险品类型和种类的依据,用模糊识别可以实现对不同种类危险物品的识别和鉴定,为太赫兹光谱技术用于危险品的检测和识别提供了一种新的有效方法。

关键词 太赫兹时域光谱; 爆炸物; 毒品; 吸收峰; 模糊识别

中图分类号: O433.4 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2010)02-0401-05

引言

恐怖袭击事件如汽车炸弹、机场等公众聚集场所的恶性爆炸及毒品问题,严重困扰着当今社会安全和人类文明进步。目前,常用的安检技术有X射线安检技术、电子安全廊、核磁共振检测技术、活化检测技术等。传统的安检技术对一些片状和液体状等特殊爆炸物易出现漏检,对危险品的种类也难于确认,且由于对人体存在一定的辐射损伤而无法用于对人员的检查。而太赫兹波(简称THz波)作为频率在0.1~10 THz范围内的电磁辐射,其波段在微波和红外光之间,在THz波频率范围内,很多相对可见光和远红外光不透明的材料是近似透明的,THz波的波长远小于微波辐射,从而可以获得更高的空间分辨率并且由于对活性组织的无损害性。THz-TDS是基于飞秒超快激光技术的远红外波段光谱测量新技术,它利用物质对THz波的吸收所引起的低频运动来获得材料的特征谱线。目前,对多种爆炸物以及毒品的探测研究发现,它们在THz范围内都有一定的指纹光谱特性^[1-4]。在利用太赫兹光谱和成像技术对危险品识别和检测的基础上,本文探索性提出用模糊识别方法对7种常见爆炸物及毒品的太赫兹吸收光谱进行模糊聚类并成功地进行了分

类识别。

1 THz-TDS在爆炸物检测中的应用

许多爆炸物都是含有硝基的芳环化合物,且多种爆炸物分子的转动和振动谱位于THz频段,运用THz-TDS技术能够得到这些物质的折光率、吸收系数等丰富的光谱和结构信息。与傅里叶变换红外光谱(FTIR)相比,THz-TDS具有高信噪比和无需低温测辐射热仪等优点,可以对炸药进行无损非电离和高灵敏度的光谱测量。国内外已经开展的对爆炸物的研究有:黑索金(RDX),2,4,6-三硝基甲苯(TNT),奥克托金(HMX),太安(PETN),2,4-二硝基甲苯(DNT)等。Kemp^[5]等利用THz技术获得了RDX, TNT, HMX, PETN等普通炸药和PE-4、塞姆汀塑胶炸药的特征指纹谱。Huang^[6]等用透射式THz-TDS(0.1~1.6 THz)和FTIR测得可用来鉴别RDX的多个特征吸收峰(0.83, 1.06, 1.34, 1.43, 1.56, 1.77, 1.98 THz),其中0.8 THz吸收被认为是RDX分子间的相互作用引起的。他们同时还利用DFT/6-311+G*对RDX结构进行优化并获得其单分子低频振动光谱,把0.83, 1.06, 1.43, 1.98 THz这4个光谱特征归于分子内振动模式,其中波数大于600 cm⁻¹的计算值与FTIR实

收稿日期: 2009-03-29, 修订日期: 2009-06-30

基金项目: 总装(973计划)项目(5131702)和国家(863计划)激光技术领域项目资助

作者简介: 刘文涛, 1983年生, 北京航空航天大学电子信息工程学院博士研究生 e-mail: wentaoliu1983@126.com

验数据符合很好^[7]。Liu^[8]等发现利用漫反射 THz-TDS 装置测定的 RDX 的吸收谱与透射谱一致且有很好的重复性,如图 1,并指出 THz 反射谱具有远场检测和鉴别隐藏在包装物或衣物下的优势。

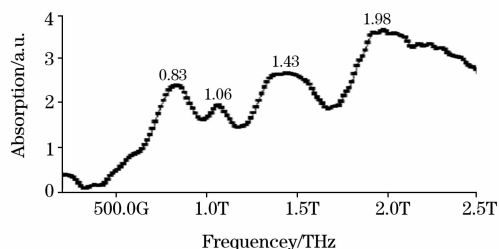


Fig. 1 Characteristic absorption of RDX

最近,Guo^[9]等利用反射式 THz 系统研究了迄今为止密度和能量水平最高的高能量密度化合物之一的六硝基六氮杂异伍兹烷(HNIW, 2,4,6,8,10,12-六硝-2,4,6,8,10,12-六氮杂四环[5.5.0.0.05,903,11]十二烷)5种晶型之一的 γ -HNIW在0.2~2.5 THz范围的光谱,如图2中①为实验测试值,②为理论计算值。其中室温下所测吸收峰1.05,1.67,1.90 THz,与理论计算基本相符,其吸收被认为是 γ -HNIW分子内振动模式,而1.52 THz的吸收则认为是由声子或分子间振动模式所引起。在计算中得到2.33 THz处的吸收,是因为他们模拟的是0 K气相中单个分子简正振动模式,而实验是在室温下进行,在此处没有发现吸收。结果说明可利用这些指纹谱来鉴别该物质。

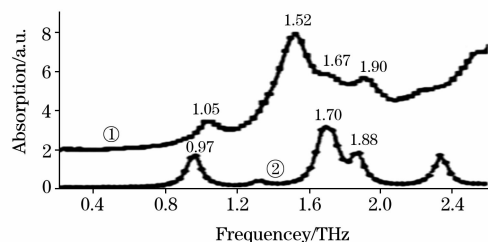


Fig. 2 Characteristic absorption of γ -HNIW

DNT, 2,4-二硝基甲苯,是军用炸药的主要成分,蒸汽压力高于TNT,探测其蒸汽浓度可以发现隐藏的地雷或未爆炸的军火,美国伦斯勒理工大学 THz 研究中心目前正在利用高斯软件对爆炸性物质振动和转动谱线进行理论模拟计算,并得到关于2,4-DNT共振吸收峰位的初步结果。首都师范大学 THz 实验室的实验数据与其计算结果有一定的一致性,根据DNT分子结构,由分子间相互作用模式及声子带隙模拟分析计算得到在0.29,0.46,0.66,1.08 THz存在吸收峰。以上实验结果及理论计算表明各种爆炸物在THz波段都具有相应的特征谱,利用这些特征光谱不仅能够分析物质的低频运动,进而理解分子集体振动模式和结构方面的性质,而且可以用于鉴别和检测爆炸物。

2 THz-TDS 在毒品检测中的应用

毒品的种类繁多,近几年利用 THz-TDS 研究较多的是苯丙胺类,包括甲基苯丙胺(MA,又名去麻黄碱或安非他命,俗称“冰毒”),替苯丙胺(MDA),替甲基苯丙胺(MDMA)。而俗称的“摇头丸”是多种致幻性苯丙胺类兴奋剂的混合物,常见的为MDMA和MDA等掺杂一定量的其他物质。对其他毒品如氯胺酮(Ketamine,俗称K粉)、吗啡、可卡因等的THz光谱也有一定的报道。

Sun等^[10]等用反射式 THz-TDS 测得0.2~2.5 THz范围内MA,MDA,MDMA的特征吸收谱,如图3,其中,1为MDMA,2为MA,3为MDA。这些指纹谱的存在正是利用THz-TDS对毒品进行无损检测的基础。Li^[11]等利用THz-TDS对MA进行了详细的研究,测得了MA在0.2~2.6 THz的THz特征吸收谱1.23,1.67,1.84,2.43 THz,并运用DFT计算了该物质的振动频率,其结果与实验值基本相符,计算还进一步说明了THz特征频率来自于集体振动模式。然而1.84 THz在计算时没有得到,作者从手性原子角度给出分析:计算采用的结构优化是能量较低的L-MA,而实验中的1.84 THz可能是由另外2种异构体D-MA引起的。这些研究表明:利用THz技术研究毒品,能够获得该物质的低频振动模式及THz波段的“指纹谱”,由此来检测和鉴别不同种类的毒品。

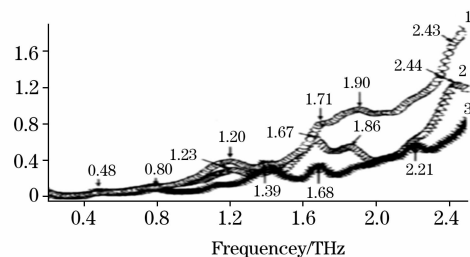


Fig. 3 Characteristic absorption of three samples

有些小组^[12-14]采用反射式发射THz的测量装置在室温氮气环境中测试氯胺酮样品,相对湿度小于4.7%,光谱实际有效范围为0.2~2.6 THz,光谱频率分辨率小于50 GHz,测得氯胺酮的特征吸收谱,如图4。从吸收谱中,可得到位于1.17,1.52,1.86,2.44 THz的特征吸收峰。从折射率谱可以看出,折射率在1.48~1.57之间变化与吸收光谱的吸收峰位置相对应,在每个吸收峰位置附近,样品折射率都随频率增大而减小,即呈现反常色散特性。

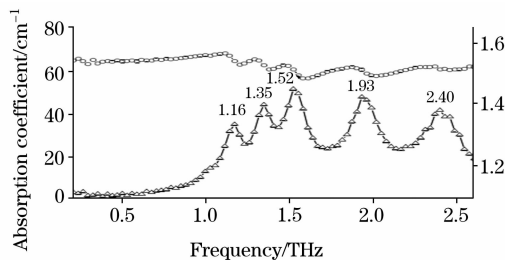


Fig. 4 Characteristic absorption of Ketamine

3 模糊聚类识别原理

3.1 模糊聚类分析

3.1.1 标定

标定又称为建立模糊相似矩阵,即标出衡量被分类对象间相似程度的统计量 $r_{ij} (i, j = 1, 2, \dots, n)$ 。设论域 $U = \{u_1, u_2, \dots, u_n\}$, 其中每个元素为一个样本, 建立 U 上的相似关系 R , R 表示相似矩阵 $r_{ij} = R(u_i, u_j)$ 。每个样本为 m 维向量 $u_i = \{x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{im}\}$ 。

3.1.2 聚类

经过标定所建立的模糊矩阵 R 是 $U = \{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ 的一个自反 $r_{ii} = 1, i = 1, 2, \dots, n$ 、对称关系 $r_{ij} = r_{ji}, i, j = 1, 2, \dots, n$, 即 R 是 n 阶模糊相似矩阵, 则存在一个最小的自然数 $k (k \leq n)$, 使得 R^k 为模糊等价矩阵, 且对于一切大于 k 的自然数 w , 恒有 $R^w = R^k \cdot R^k$ 。称为 R 的传递包矩阵, 记为 $t(R)$ 。所以通过求传递包将 n 阶模糊相似矩阵 R 改造成 n 阶模糊等价矩阵 $t(R)$ 。从模糊矩阵 R 出发, 利用求平方法 $R \rightarrow R^2 \rightarrow R^4 \rightarrow \dots$, 当第一次出现 $R^k \cdot R^k = R^k$ 时, 表明 R^k 已经具有传递性, R^k 就是所求的传递包 $t(R)$, 且 $t(R)$ 为模糊等价矩阵^[15]。

3.2 模糊模式识别

当识别对象和模式类都是论域中的模糊子集时, 讨论待识别对象归属于哪一个模式类的问题便成为衡量 2 个模糊集合之间接近程度的问题。本文采用基于择近原则的模糊识别方法^[16-18]。

4 危险品模糊识别仿真实验结果及分析

从图 1~图 4 可以看出, 爆炸物 RDX、 γ -HNIW 及毒品 MA、Ketamine 在 0.2-2.6THz 波段存在不同的特征吸收, 这是由于爆炸物及毒品种类所对应的分子结构的不同所导致的, 因此不同的 THz 吸收光谱代表不同的危险品。危险品在 THz 波段的吸收特性对时间的依赖性小, 基本不随时间而变化。因此, 能充分体现危险品在 THz 波段吸收特性的特征吸收峰是确定危险品类型和种类的依据, 在此基础上, 结合模糊识别算法能够方便有效地利用 THz-TDS 技术进行危险品的探测和无损检测。

4.1 危险品模糊聚类分析

选择已测得的 5 种危险品的太赫兹特征吸收峰作为模糊聚类分析数据源进行聚类训练, 如图 5(a), 其中, RDX、 γ -HNIW、MA、氯胺酮、DNT 分别用 u_1, u_2, u_3, u_4, u_5 表示, 待检测物品分别用 u_6 和 u_7 表示, 危险品模糊聚类分析的文件和参数设置如图 6, 使用标准差预处理方法。如果不打算进行 F 检验, 这时显著性水平的 Fa1 或 Fa2 文本框需要设置为 0。如果需要进行检验, Fa1 和 Fa2 都必须大于 0, 且 Fa1 要大于 Fa2。最后选定 Fa1 为 0.3, Fa2 为 0.15。使用相关系数进行标定。危险品模糊相似矩阵如图 7(a), 等价矩阵如图 7(b)。

	吸收峰 1	吸收峰 2	吸收峰 3	吸收峰 4
u_1 -RDX	0.83	1.06	1.43	1.98
u_2 -HNIW	1.05	1.52	1.67	1.90
u_3 -MA	1.23	1.67	1.84	2.43
u_4 -氯胺酮	1.17	1.52	1.86	2.44
u_5 -DNT	0.29	0.49	0.67	1.06

(a)

	吸收峰 1	吸收峰 2	吸收峰 3	吸收峰 4	标志
u_1 -RDX	0.83	1.06	1.43	1.98	1
u_2 -HNIW	1.05	1.52	1.67	1.90	2
u_3 -MA	1.23	1.67	1.84	2.43	3
u_4 -氯胺酮	1.17	1.52	1.86	2.44	3
u_5 -DNT	0.29	0.49	0.67	1.06	4
待检物- u_6	0.834	1.054	1.347	1.537	0
待检物- u_7	1.2	1.4	1.88	2.57	0

(b)

Fig. 5 Data source of explosive and illegal drug

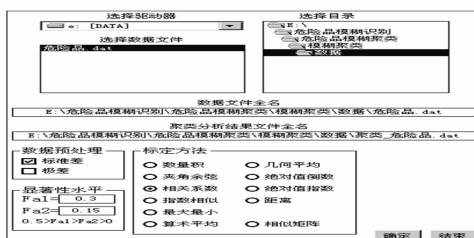


Fig. 6 Parameter settings of explosive and illegal drug

	R1	R2	R3	R4	R5
R1	1	0.735	0.413	0.481	0.153
R2	0.735	1	0.763	0.8	0.046
R3	0.413	0.763	1	0.972	0.004
R4	0.481	0.8	0.972	1	0.007
R5	0.153	0.446	0.004	0.007	1

(a)

	R1	R2	R3	R4	R5
R1	1	0.735	0.735	0.735	0.153
R2	0.735	1	0.8	0.8	0.153
R3	0.735	0.8	1	0.972	0.153
R4	0.735	0.8	0.972	1	0.153
R5	0.153	0.153	0.153	0.153	1

(b)

Fig. 7 Fuzzy matrix of explosive and illegal drug

(a): Fuzzy similar matrix; (b): Fuzzy equivalent matrix

```

结论: 在给定的临界值下, 该分类效果不显著
*****
入值: .972
第1类: u1
第2类: u2
第3类: u3 u4
第4类: u5
F检验值: 7.14
显著性为.3的F临界值: 5.557
显著性为.15的F临界值: 23.572
结论: 在给定的临界值下, 该分类效果显著
*****
入值: .8
    
```

Fig. 8 Cluster results of explosive and illegal drug

分类的部分结果如图 8。可以看出 λ 取 0.972 时分类的效果唯一显著, 这时 5 种危险品按特征吸收分为 4 类, u_1 -RDX 为一类, 向量输出标志是“1”; u_2 - γ -HNIW 为一类, 向量输出标志是“2”; u_5 -DNT 为 1 类, 向量输出标志是“4”, 这 3 类危险品为爆炸物。 u_3 -MA 和 u_4 -氯胺酮为毒品类, 向量输出标志是“3”, 如图 5(b)。

4.2 待检测物品模糊模式识别

危险品模糊聚类分析获得危险品分类并形成标准太赫兹吸收光谱模型库, 再用模糊模式识别对未分类的危险品在标准模型库中找出最接近者。

图 5(b)为待检物品模糊识别模型的数据源, 利用反射式 THz-TDS 测得待检物品的太赫兹吸收峰, 将危险品的聚类分析结果纳入模糊识别的特征吸收数据, 对待检测物品进行模糊模式识别。文件参数设置见图 9, 采用极差分析进行预处理, 计算贴进度用海明贴进度。待检物品 u_6 与标准模型 1 爆炸物 RDX 有最大贴进度, 被识别为 RDX; 待检物品 u_7 与标准模型 3 有最大贴进度, 被识别为毒品类。如图 10。

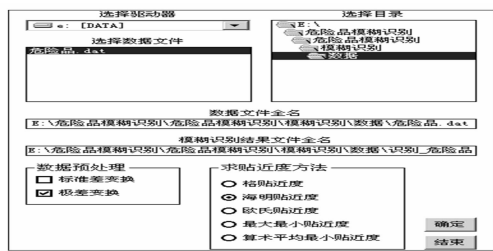


Fig. 9 Parameter settings of uninspected

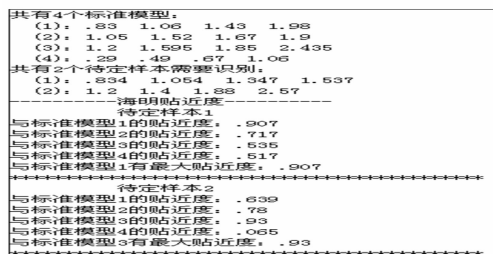


Fig. 10 Fuzzy recognition of uninspected

其中, 待检物品 u_6 的特征吸收谱如图 11, 为隐藏在军服后的爆炸物 RDX^[19], 待检物品 u_7 的特征吸收谱如图 12, 为毒品 MDA^[20]。识别结果充分表明, 用模糊聚类分析对危险品的吸收谱作训练与模糊模式识别结合起来, 能够达到正

确识别效果。

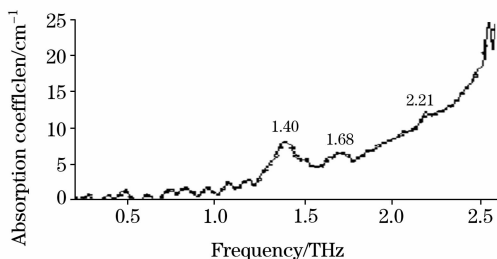


Fig. 11 Characteristic absorption of RDX hidden behind the uniform

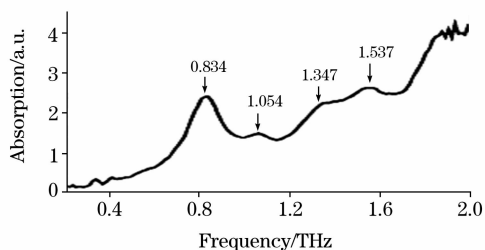


Fig. 12 Characteristic absorption of MDA

由于各个实验室的实验设备不同, 采用的数据处理方法也不尽相同, 危险样品的类别与数量都极为有限, 所得结果有时存在一定误差, 同时在理论计算方面也有许多问题需要解决, 所以得出的结论存在一定的局限性, 另外, Barber^[21]用 THz-TDS 分别得到了 10~80 cm^{-1} 范围内 HMX, RDX, PETN 不同晶面在 10~300 K 的吸收谱, 说明温度对不同单晶态爆炸物影响很大。

5 结论

目前, THz 光谱技术应用于危险品检测的研究还处于探索阶段, 国际上关于 THz 波在爆炸物及毒品检测方面的研究报道很少。本文在对几种常见危险品的太赫兹吸收谱进行模糊聚类分析训练之后, 利用模糊模式识别对特征吸收谱进行了识别研究。该识别方法过程简单、省时, 只要建立一定的危险品太赫兹特征谱数据库, 用训练好的模糊识别算法, 就可以对未知物品进行识别。研究结果表明, 用模糊识别方法可以实现对不同种类危险物品的识别和鉴定, 为太赫兹光谱技术用于危险品的检测和识别提供了一种新的有效方法。

参 考 文 献

[1] Choi M K, Taylor K, Bettermann A, et al. Phys. Med. Biol., 2002, 47: 3777.
 [2] HU Ying, ZHANG Cun-lin, SHEN Jing-ling, et al(胡颖, 张存林, 沈京玲, 等). Acta Phys. Sin. (物理学报), 2004, 53: 1772.
 [3] LIU Gui-feng, ZHAO Hong-wei, GE Min, et al(刘桂峰, 赵红卫, 葛敏, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2008, 28(5): 966.
 [4] ZHANG Cun-lin(张村林). Tetahertz Sensing and Imaging(太赫兹感测与成像). Beijing: National Defense Industry Press(北京: 国防工业出版社), 2008. 177.
 [5] Kemp M C, Taday P F, Cole B E, et al. Proc. SPIE, 2003, 5070: 44.
 [6] Huang F, Schulkin B, Altan H, et al. Appl. Phys. Lett., 2004, 85: 5535.

- [7] Rice B M, Chabalowski C F. J. Phys. Chem. A, 1997, 101: 8720.
- [8] Liu H B, Chen Y Q, Bastiaans G J, et al. Opt. Express, 2006, 14(1): 415.
- [9] Guo L T, Hu Y, Zhang Y, et al. Opt. Express, 2006, 14: 3654.
- [10] Sun J H, Shen J L, Liang L S, et al. Chin. Phys. Lett., 2005, 22(12): 3176.
- [11] Li N, Shen J L, Sun J H, et al. Opt. Express, 2005, 13(18): 6750.
- [12] JIA Yan, CHEN Si-jia, LI Ning, et al(贾 燕, 陈思嘉, 李 宁, 等). Chinese Journal of Lasers(中国激光), 2006, 34: 719.
- [13] Zhang Cunlin, Mu Kaijun, Jiang Xue, et al. Proceedings of SPIE, 2008, 6840: 84.
- [14] Zhou Qingli, Zhang Cunlin, Li Weiwei, et al. Proceedings of SPIE, 2008, 6840: 168.
- [15] Ha T m, Zimmermann M, Bunke H. Pattern Recognition, 1998, 31(3): 257.
- [16] Hisao Ishibuchi. IEEE Transactions on Industrial Electronics, 2001, 46(6): 1057.
- [17] LI Zhenquan, Kecman V, Ichikawa A. Fuzzy Sets and Systems, 2002, 130: 291.
- [18] LI Hongji. Foundation of Fuzzy Math and Practical Algorithm(模糊数学基础及实用算法). Beijing: Science Press(北京: 科学出版社), 2005. 209.
- [19] Jiang Zhiping, Zhang X C. Appl. Phys. Lett., 1998, 72(16): 1945.
- [20] Fletcher J R. Opt. Express., 2002, 10(24): 1425.
- [21] Barber J, Hooks D E, Funk D J, et al. Journal of Phys. Chem. A, 2005, 109: 3501.

Fuzzy Recognition Research on Explosive and Illegal Drug Based on Terahertz Spectroscopy Detection

LIU Wen-tao¹, LI Jing-wen¹, DU Chun-yan², SUN Zhi-hui³

1. Electronic and Information Engineering Institute, Beihang University, Beijing 100191, China

2. Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

3. Department of Optoelectronics, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China

Abstract On the base of absorption spectra in the range from 0.2 to 2.6 THz of seven common dangerous goods using terahertz time-domain spectroscopy (THz-TDS) technique, the THz absorption spectra of seven dangerous goods were identified successfully by fuzzy recognition. Using different feature absorption peaks of explosive and illegal drugs such as RDX, γ -HNIW, DNT, MA and Ketamine as data source of fuzzy cluster analysis, fuzzy similar matrix was built by correlation coefficient, fuzzy equivalent matrix was obtained by the method of transitive closure, standard model bank of THz absorption spectra was formed, and data were preprocessed by range analysis and compute Hamming approach degree. It was concluded that uninspected goods were RDX hidden behind the uniform and MDA. The research indicated that different feature absorption by interactions between molecules and phonon resonance mode is the basis for determining the type and category of dangerous goods, it is feasible to apply fuzzy recognition to the identification of dangerous goods, providing an effective new method for the secure inspection and identification of threats using THz-TDS technique.

Keywords THz-TDS; Explosive; Illegal drug; Absorption peaks; Fuzzy recognition

(Received Mar. 29, 2009; accepted Jun. 30, 2009)