

文章编号: 0258-7025(2007)05-0719-04

利用误差逆传播神经网络法识别 几种毒品的太赫兹光谱

贾 燕, 陈思嘉, 李 宁, 逯美红, 江德军, 王光琴, 沈京玲

(首都师范大学物理系, 北京 100037)

摘要 在采用太赫兹时域光谱(THz-TDS)技术对 9 种常见毒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,用误差逆传播(BP)神经网络法对 9 种常见毒品的太赫兹吸收光谱进行了训练及识别。首先,用 9 种毒品的太赫兹吸收谱训练已经建立的误差逆传播神经网络;然后,选用与训练光谱不同时间测得的 9 种毒品的太赫兹吸收光谱作为检测光谱,经过二阶导数预处理之后分别输入到训练好的误差逆传播神经网络中进行识别,识别率达到 89%。该误差逆传播神经网络模型采用 MATLAB 语言编制程序。识别结果充分表明,用误差逆传播神经网络可以实现对不同种类毒品的识别和鉴定,为太赫兹光谱技术用于毒品的检测和识别提供了一种有效的方法。

关键词 光谱学;毒品识别;太赫兹吸收光谱;误差逆传播神经网络

中图分类号 O 433.4 **文献标识码** A

Identification of Terahertz Absorption Spectra of Illicit Drugs Using Back Propagation Neural Networks

JIA Yan, CHEN Si-jia, LI Ning, LU Mei-hong,

JIANG De-jun, WANG Guang-qin, SHEN Jing-ling

(Department of Physics, Capital Normal University, Beijing 100037, China)

Abstract On the base of absorption spectra in the range from 0.2 to 2.6 THz of nine illicit drugs using terahertz time-domain spectroscopy (THz-TDS) technique, the THz absorption spectra of the nine different illicit drugs were identified successfully by back propagation (BP) neural networks. Firstly, absorption spectra of the nine illicit drugs, which were pretreated by second derivation, were used to train the BP neural network. Secondly, absorption spectra of the nine illicit drugs which were measured in different time, pretreated by second derivative too, were identified by BP neural network and the identification rate of 89% was achieved. The model of BP neural network was processed in Matlab. The results indicated that it is feasible to apply BP neural network model on the identification of illicit drugs, and providing an effective method in the secure inspection and identification for illicit drugs using THz-TDS technique.

Key words spectroscopy; illicit drugs identification; terahertz absorption spectra; back propagation neural networks

1 引 言

毒品对吸毒者个人身心健康和社会都有极为严重的危害。目前还缺乏有效的毒品探测和检测方法,在海关用于探测毒品的的方法主要是使用警犬和

X 射线。前者要求必须有少量被探物质散落在外,后者则不能确定种类,而且对人体有辐射危害。在实验室用于检测毒品的的方法主要有化学显色法、色谱法、核磁共振、紫外光谱、荧光分析法和 X 射线荧

收稿日期:2006-10-14;收到修改稿日期:2006-12-18

基金项目:国家自然科学基金(10390160)和北京市教育委员会科技发展计划重点项目(KZ200610028016)资助课题。

作者简介:贾 燕(1978—),女,山东泰安人,硕士研究生,主要从事太赫兹光谱检测方面的研究工作。

导师简介:沈京玲(1957—),女,北京人,教授,主要从事太赫兹光谱、非线性光学及混沌方面的研究。

E-mail: sjl-phy@mail.cnu.edu.cn (通信作者)

光谱等。这些传统方法对样品都有一定程度的损坏,属于有损检测方法,并且不能很好地检测带有一定包装的毒品。因此,迫切需要一种快速简洁的方法来实现对毒品的检测和识别。

太赫兹波($1\text{ THz}=10^{12}\text{ Hz}$)是介于毫米波和红外光之间的电磁辐射,在无线电物理领域称为亚毫米波(SMMW),在光学领域则习惯称之为远红外辐射(FIR)。太赫兹波具有自身的特点:能有效穿透衣服、信封以及塑料包裹等材料而且对人体没有伤害;其单光子能量特别低,可以做到无损检测;另外,由于有机分子间的弱相互作用(如氢键)及大分子的骨架振动(构型弯曲)、偶极子的旋转和振动跃迁以及晶体中晶格的低频振动的吸收频率均对应于太赫兹波段,因此使太赫兹时域光谱(THz-TDS)技术在该波段对海洛因、吗啡、可待因、苯丙胺等有机分子进行探测成为可能^[1~3]。2003年 Kodo Kawase 等使用太赫兹参量振荡器应用空间图样成分分析的方法对苯丙胺类毒品甲基安非他明(MA)和 4,5-亚甲基二氧基苯丙胺(MDA)进行了成像研究^[4,5]; B. Fischer 等报道了吗啡、可卡因的太赫兹吸收光谱^[6];在国内,首都师范大学物理系太赫兹实验室利用太赫兹时域光谱和成像技术对系列毒品进行了研究,并得到了一定的研究结果^[7~15]。

在利用太赫兹光谱和成像技术对毒品的识别和检测的基础上,本文用误差逆传播(BP)神经网络方法对 9 种常见毒品的太赫兹吸收光谱进行了训练并成功地进行了识别。

2 太赫兹时域光谱技术及毒品的太赫兹光谱

2.1 太赫兹时域光谱技术实验装置

实验采用反射式太赫兹产生装置(图 1 所示),所用激光器是光谱物理公司的自锁模可调谐式钛蓝宝石激光器,激光中心波长为 810 nm,脉宽为 100 fs,重复频率为 82 MHz,激光输出功率为 980 mW。激光器产生的飞秒激光脉冲经过二分之一波片(HWP)再经分光镜(BS)分为两束:透过 BS 的一束为抽运光,经过斩波器和延迟器(由反射镜 M_2, M_3 组成)后,再经反射并经准直后通过凸透镜 L_1 会聚于发射晶体 InAs<100>上,从而激发出太赫兹电磁波,太赫兹波经过离轴抛物面镜 PM1~PM4 准直聚焦于电光探测晶体上;经 BS 反射的一束作为探测光,经过一系列反射镜 RM6~RM11 和凸透

镜 L_2 后经偏振片 P 打在高阻硅片上,经反射打在电光探测晶体(ZnTe)上,在电光晶体上与载有样品信息的太赫兹波相遇,再通过四分之一波片(QWP),由渥拉斯顿棱镜(PBS)分成偏振方向相互垂直的两束光,最后由差分探测器通过测量两偏振分量的差异而解调出太赫兹信号,通过计算机进行数据采集,进而得到样品信息。

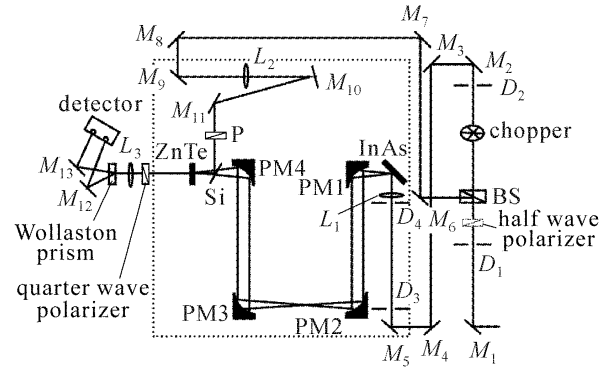


图 1 THz-TDS 实验装置示意图

Fig. 1 Schematic setup of the THz-TDS

实验时把样品放在 PM2 的焦点上;同时为了减少空气中水分对太赫兹的吸收,提高实验精度,将有太赫兹存在的区域置于充有氮气的有机玻璃罩中,如图 1 虚线所示;实验时温度 $21\text{ }^{\circ}\text{C}$,湿度小于 4%。

2.2 毒品的太赫兹光谱

毒品在太赫兹波段存在特征吸收,如图 2 所示的 MA,MDA,3,4-亚甲二氧基甲基安非他明(MDMA)三种常见毒品的吸收谱,在 $0.2\sim 2.6\text{ THz}$ 波段存在不同的特征吸收,这完全是由于毒品的不同所导致的。因此,称毒品在这个波段的太赫兹吸收谱线为“指纹谱”,这些“指纹谱”充分体现了毒品在太赫兹波段的吸收特性。毒品的“指纹谱”信息是确定毒品类型和种类的依据,因此,通过一定的识别算法能够方便有效地利用太赫兹技术进

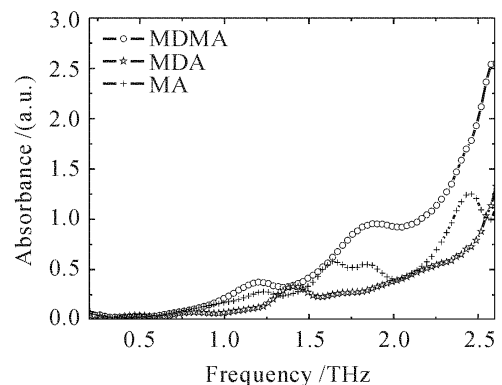


图 2 MDMA,MDA,MA 的吸收谱

Fig. 2 Absorption spectra of the MDMA, MDA, MA

行毒品的探测和无损检测。

所用的识别算法中,采用 2005 年 1 月测得的 9 种毒品的太赫兹吸收谱作为训练光谱,实验温度为 21 ℃,湿度为 3.8%;用同年 4 月测得的 9 种样品的太赫兹吸收谱作为检测光谱,实验温度为 21 ℃,湿度为 4%。

3 误差逆传播神经网络的建立及识别结果

3.1 人工神经网络

人工神经网络(Artificial Neural Network,简称 ANN)是由大量简单的处理单元(称为神经元)广泛地相互连接而形成的复杂网络。它是基于数值计算的知识处理系统,其模型建立在实例学习的基础上,采用并行推理方法,具有联想、记忆和归纳等特征。

3.2 误差逆传播神经网络介绍

误差逆传播网络是一种后向传播前向反馈网络。典型的误差逆传播网络是 3 层前馈阶层网络,即:输入层、隐含层(也称中间层)和输出层。中间层可以有一层、二层甚至更多层以便于分析各层因素间的相互作用。各层之间实行全连接,同层之间没有任何连接,如图 3 所示。

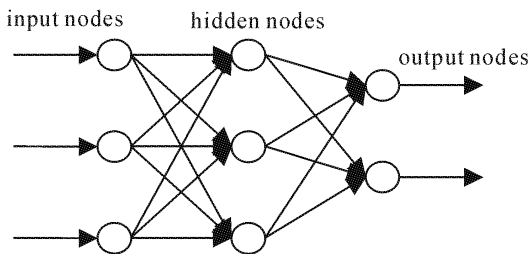


图 3 三层 BP 神经网络

Fig. 3 Three layer BP neural network

误差逆传播网络的学习过程由 4 个过程组成:输入模式由输入层经中间层向输出层的“模式顺传播”过程;网络的希望输出与网络实际输出之差的误差信号,由输出层经中间层向输入层逐层修正连接权的“误差逆传播”过程;由“模式顺传播”与“误差逆传播”的反复交替进行的网络“记忆训练”过程;网络趋向收敛即网络的全局误差趋向极小值的“学习收敛”过程。即:“模式顺传播”—“误差逆传播”—“记忆训练”—“学习收敛”4 个过程。

3.3 模型的建立

建立毒品的太赫兹光谱识别模型的具体步骤为:1) 确定模型输入/输出量,建立两者的映射关

系。2) 实验采集输入样本,建立模型的训练样本数据集。3) 确定所用模型的层数和隐含节点数。4) 根据需要,对实验数据,即训练样本进行预处理。5) 对样本进行训练,获得各自的连接权值和域值。6) 对模型进行检验,采用未学习过的数据来验证模型的分析评估能力。

采用误差逆传播神经网络,三层网络结构,即:输入层、隐含层、输出层。如图 4 所示:输入层 34 个节点,隐含层 75 个节点,输出层 9 个节点。

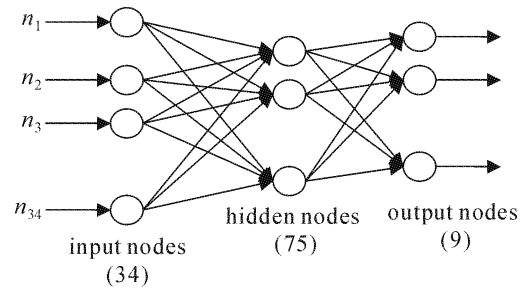


图 4 三层误差逆传播神经网络示意图

Fig. 4 Schematic diagram of three layer BP neural network

用提取的每种毒品的太赫兹特征吸收谱上的 34 个特征点(共 9 种毒品)作为输入向量 \mathbf{P} (34×9),输出目标向量为 \mathbf{T} (9×9),期望的无噪声训练误差为 10^{-1} ,采用量化连接梯度算法来训练误差逆传播网络。

3.4 识别结果

该网络模型采用 MATLAB 语言编制程序,利用 1 月份实验所得的 9 种毒品的太赫兹吸收谱数据经过二阶导数处理后作为训练光谱,经过训练学习之后,误差值可以达到无噪声时的 0.1 及有噪声时的 1 以下,并且将网络的训练权值和域值储存起来。

对所训练的网络模型进行检测,选择 4 月份测得的 9 种毒品的太赫兹吸收谱作为检测光谱,经过二阶导数处理之后分别输入到训练好的网络中进行识别。9 种毒品作为训练样品 \mathbf{P} ,同时建立了相应的目标向量 \mathbf{T} ,每种毒品都对应一个目标向量值。例如,咖啡因的目标向量输出值是“1”,海洛因的目标向量输出值是“2”,氯胺酮的目标向量输出值是“3”等。识别检测时,输入第一种检测毒品咖啡因太赫兹吸收谱,网络输出了正确的目标向量值“1”,输入第二种检测毒品海洛因太赫兹吸收谱,网络输出了错误的目标向量值“9”(实际海洛因的输出向量值应该是 2),而其他的 7 种检测毒品,网络都给出了正确的输出目标向量,如表 1 所示。

识别结果充分表明,用二阶导数方法对 9 种毒

表 1 9 种毒品的识别结果

Table 1 Identifying results of nine illicit drugs

Object vector (T) Sample vector (P)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	Expected output	Actual output
1 Caffeine	1									1	1
2 Heroin		1								2	9
3 Ketamine			1							3	3
4 MA				1						4	4
5 MDA					1					5	5
6 MDMA						1				6	6
7 O^3 -monoacetylmorphine							1			7	7
8 O^6 -monoacetylmorphine								1		8	8
9 Acetylcodeine									1	9	9

品的吸收谱作预处理和误差逆传播神经网络结合起来,能够达到一定的识别效果,9种毒品中有8种毒品被成功地识别出来,识别率达到89%,只有海洛因识别结果是错误的,这可能与样品本身的吸收特性有关系,也可能与我们选择的网络以及网络的训练有一定的关系。

4 结 论

在对9种常见毒品的太赫兹吸收谱进行二阶导数预处理之后,利用误差逆传播神经网络对光谱进行了训练和识别研究。该识别方法过程简单、省时,只要建立一定的毒品太赫兹光谱数据库,用训练好的误差逆传播神经网络,就可以对未知毒品进行识别。研究表明,用误差逆传播神经网络可以实现对不同种类毒品的识别和鉴定,为太赫兹光谱技术用于毒品的检测和识别提供了一种新的有效方法。

致谢 感谢公安部第一研究所的梁来顺研究员、史艳宁在毒品实验样品上提供的帮助。

参 考 文 献

- 1 Yan Haitao, Wang Weining. Experimental and theoretical study of carnosine in THz range [J]. *Chin. Phys. Lett.*, 2005, **22**(12):3179~3181
- 2 Wang Weining, Yue Weiwei, Yan Haitao *et al.*. The time-domain spectroscopy of amino acids [J]. *Chinese Science Bulletin*, 2005, **50**(15):1561~1565
- 3 Yue Weiwei, Wang Weining, Zhao Guozhong *et al.*. THz spectrum of aromatic amino acid [J]. *Acta Physica Sinica*, 2005, **54**(7):3094~3100
岳伟伟,王卫宁,赵国忠等. 芳香族氨基酸的太赫兹光谱研究[J]. *物理学报*, 2005, **54**(7):3094~3100
- 4 Kodo Kawase, Yuichi Ogawa, Yuuki Watanabe *et al.*. Non-destructive terahertz imaging of illicit drugs using spectral

- fingerprints [J]. *Opt. Express*, 2003, **11**(20):2549~2554
- 5 Kodo Kawase. Terahertz imaging for drug detection & large-scale integrated circuit inspection [J]. *Optics & Photonics News*, 2004, **15**(10):35~39
- 6 B. Fischer, M. Hoffmann, H. Helm *et al.*. Chemical recognition in terahertz time-domain spectroscopy and imaging [J]. *Semicond. Sci. Technol.*, 2005, **20**(7):S246~S253
- 7 Sun Jinhai, Shen Jingling, Liang Laishun *et al.*. Experimental investigation on terahertz spectra of amphetamine type stimulants [J]. *Chin. Phys. Lett.*, 2005, **22**(12):3176~3178
- 8 Li Ning, Shen Jingling, Sun Jinhai *et al.*. Study on the THz spectrum of methamphetamine [J]. *Opt. Express*, 2005, **13**(18):6750~6755
- 9 Meihong Lu, Jingling Shen, Ning Li *et al.*. The detection and identification of illicit drugs using terahertz imaging [J]. *J. Appl. Phys.*, 2006, **100**(10):103104-1~103104-5
- 10 Jia Yan, Li Ning, Lu Meihong *et al.*. Inspection and identification of illicit drugs THz spectra and imaging [J]. *Modern Scientific Instruments*, 2006, **2**:41~44
贾燕,李 宁,逮美红等. 太赫兹光谱和成像技术在毒品识别和检测方面的应用[J]. *现代科学仪器*, 2006, **2**:41~44
- 11 Jia Yan, Lu Meihong, Li Ning *et al.*. Comparison between tablet and powder illicit drugs on terahertz spectra [C]. *Collectanea of Optoelectronics Technology & Systems*, Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2005. 861~865
贾燕,逮美红,李 宁等. 片状和粉末状毒品的太赫兹吸收光谱比较[C]. 第十一届全国光电技术与系统年会论文集,北京:电子工业出版社,2005. 861~865
- 12 LI Ning, Shen Jingling, Sun Jinhai *et al.*. Terahertz time-domain spectroscopy and calculations of methamphetamine [C]. *Collectanea of Optoelectronics Technology & Systems*, Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2005. 877~881
李 宁,沈京玲,孙金海等. 甲基苯丙胺太赫兹时域光谱研究[C]. 第十一届全国光电技术与系统年会论文集,北京:电子工业出版社,2005. 877~881
- 13 Meihong Lu, Yan Zhang, Jinhai Sun *et al.*. Identification of maize seeds by terahertz scanning imaging [J]. *Chin. Opt. Lett.*, 2005, **3**(Suppl.):S239~S241
- 14 Lantao Guo, Liangliang Zhang, Xianhong Wang *et al.*. Time-resolved terahertz spectroscopy of explosive materials [J]. *Chin. Opt. Lett.*, 2005, **3**(Suppl.):S1~S3
- 15 Sun Jinhai, Zhao Guozhong, Zhang Liangliang *et al.*. Effect of applied electric and magnetic field on THz radiation [J]. *Chinese J. Lasers*, 2005, **32**(2):192~195
孙金海,赵国忠,张亮亮等. 外加电场和磁场对太赫兹辐射产生的影响[J]. *中国激光*, 2005, **32**(2):192~195