

近红外光谱在爆炸物粉末表面沾染遥测中的应用

李大成^{1,2}, 王安静^{1*}, 李扬裕¹, 崔方晓¹, 吴军¹, 曹志成¹, 王云云^{1,2}, 乔延利¹

1. 中国科学院安徽光学精密机械研究所, 中国科学院通用光学定标与表征技术重点实验室, 安徽 合肥 230031
2. 中国科学技术大学, 安徽 合肥 230026

摘要 针对爆炸恐怖事件预防和打击领域内的大范围开放空间下制爆运爆可疑人员衣物表面沾染爆炸物粉末检测问题, 研究基于近红外光谱的爆炸物粉末表面沾染遥测方法。研制了一套近红外成像光谱数据采集系统, 采集了多种爆炸物粉末和沾染基底的近红外反射光谱, 制备了多个爆炸物粉末表面沾染样本。针对表面沾染检测应用中爆炸物粉末与沾染基底近红外反射特征混叠问题, 利用近红外光谱数据处理技术构建近红外光谱解混校正模型, 去除了沾染基底信号对爆炸物粉末目标识别的干扰。针对遥测应用中光源照射不均匀问题造成的干扰(如强光反射造成的光谱信号饱和, 光线遮挡造成阴影引起的信号微弱, 引起光谱反射率测量异常问题), 对目标校正得分图进行有效过滤避免误识别问题。此外, 针对背景噪声较大时出现光谱预处理过度造成的误识别问题, 利用目标原始光谱反射率均值和得分图综合判别加以校正解决。通过实验验证, 提出的方法成功解决了表面沾染特征混叠问题、去除了遥测中光照及其他噪声因素的干扰影响, 避免了误分类, 在典型背景材质棉麻、化纤布料基底上成功识别分类 AP(高氯酸铵)、CL-20(六硝基六氮杂异伍兹烷)、NQ(硝基胍)、RDX(黑索金)、TATB(三氨基三硝基苯)、硝胺(工业炸药)、烟花爆竹等爆炸物粉末单质及混合物, 验证了系统及方法的有效性和可行性, 首次在实验室环境下实现了爆炸物粉末表面沾染遥测成像报警, 有效距离可达数十米, 具有一定应用价值与发展潜力。

关键词 近红外光谱; 爆炸物粉末; 表面沾染; 识别分类

中图分类号: O433 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2021)02-0441-07

引言

近些年, 国内外针对爆炸恐怖事件的预防手段主要是对成品爆炸物的筛查和爆炸物粉末生产运输环节的捣毁与查处, 已有的检测技术手段包括排爆犬搜查法和取样式的色谱法、质谱法及离子迁移法^[1-4]。训练犬类动物并利用其灵敏的嗅觉系统对爆炸物粉末进行甄别与追踪, 具备很高的排查能力, 但排爆犬识别种类单一、训练成本较高的缺点造成其应用规模较小。色谱法、质谱法及离子迁移法虽然识别率及灵敏度非常高, 但在线取样的检测方式限制了适用场景范围。针对大场景、开放空间下制爆运爆人员及车辆的非接触、远距离和隐蔽式新型侦测需求, 尝试新技术手段的探索与研究十分有必要。

光学红外技术是遥感领域中的一种主流手段, 通过获取远距离目标的红外图像或光谱等特征信息并加以识别。近红

外光谱技术近些年来发展迅猛, 已经被广泛应用于农产品品质鉴定(水果蔬菜类^[5-6]、茶叶类^[7-8]等)以及药品鉴定^[9-10], 取得了不错的成效。近红外光谱范围为 780~2 526 nm, 研究表明, 分子单一化学键的基频振动的倍频和合频频率范围位于近红外波段, 记录的主要信息来自于含氢基团 X—H(X=C, N, O)的倍频和合频重叠^[11]。爆炸物粉末在近红外波段也有特征信息存在, 出于实际应用考虑, 采用近红外反射光谱(红外光源照射目标, 近红外光谱仪获取目标反射光谱信息)对爆炸物粉末进行检测。同时, 近红外反射光谱技术是一种非接触式、无损耗、隐蔽性高的检测手段, 可实现一定距离的遥测感知, 适用于制爆、运爆及携爆过程中的人员或车辆爆炸物粉末表面沾染遥测问题。

将近红外光谱应用于爆炸物粉末表面沾染遥测在国内鲜有报道, 我们在实验室团队自研近红外成像光谱仪的基础上开展爆炸物粉末表面沾染近红外光谱遥测研究。在实验室内搭建了一套爆炸物粉末表面沾染遥测系统, 测量了多种爆炸

收稿日期: 2019-12-17, 修订日期: 2020-03-25

基金项目: 实验室创新基金项目(CXJJ-19S002), 中国科学院重点部署项目(KGFZD-135-16-002-2) 和国家自然科学基金项目(41505020)资助

作者简介: 李大成, 1979年生, 中国科学技术大学博士 e-mail: dcli@aiofm.ac.cn

* 通讯作者 e-mail: 916609423@qq.com

物粉末单质及混合物的近红外反射特征光谱, 针对表面沾染基底与爆炸物粉末特征混叠问题, 建立了近红外解混校正模型, 针对遥测中光照及噪声干扰问题, 采取有效抑制措施, 消除了误识别, 取得了一定的效果。

1 原理及方法

近红外光谱技术实现爆炸物粉末表面沾染遥测的实质是利用爆炸物粉末在近红外波段中由含氢基团引起的特征吸收及反射原理。实际操作中, 将红外光源和探测器放置在待测沾染目标同一侧, 并与目标保持一定距离, 探测器收集目标反射能量(图 1), 经过标准光学白板测量参考转换为目标反射率光谱, 利用近红外光谱处理技术实现目标识别分类。

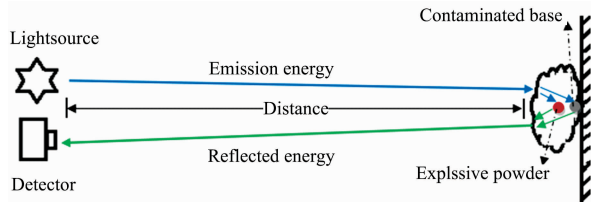


图 1 爆炸物粉末表面沾染近红外反射光谱遥测

Fig. 1 Explosive powder surface contamination remote detection by NIR reflection

图 1 中, 光源发射光线到达沾染目标, 一部分直接照射爆炸物粉末颗粒(图中红色颗粒), 另一部分直射或者散射到达沾染基底(图中灰色颗粒), 光线在这两个传输过程中被吸收及反射进而被探测器接收。因此, 探测器接收的是爆炸物粉末和沾染基底反射能量之和, 也即是, 实际探测的反射光谱混叠了爆炸物粉末和沾染基底的特征(图 2)。

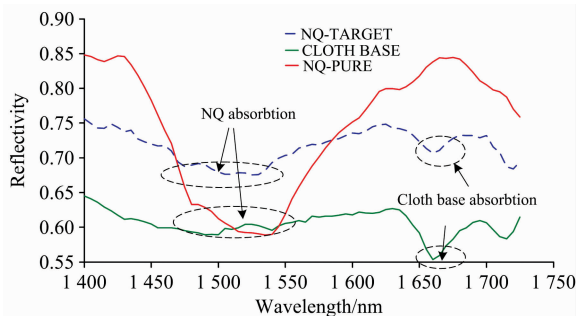


图 2 NQ 与化纤布料基底光谱特征混叠

Fig. 2 Spectral feature aliasing of NQ and chemical fiber cloth base

图 2 中, NQ-TARGET 为 NQ 化纤布料表面沾染反射率光谱, 该谱混叠了 NQ(NQ-PURE, 特征峰 1 430~1 625 nm)和基底(CLOTH BASE, 特征峰 1 635~1 680 nm)的特征, 出现两个特征峰。实际的目标识别处理中应去除沾染基底特征混叠的影响。

同时, 目标远距离探测时, 探测区域内非目标物体一方面遮挡目标, 造成阴影问题; 另一方面存在反光强烈现象, 造成眩光问题。阴影和眩光都会导致误识别, 需采取有效数

据处理加以抑制与消除。

因此, 基于近红外反射光谱技术的爆炸物粉末表面沾染遥测的数据处理流程如图 3 所示。

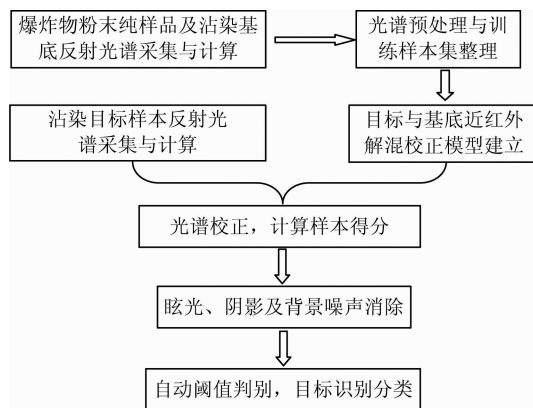


图 3 基于近红外反射光谱技术的爆炸物粉末表面沾染遥测流程

Fig. 3 Diagram of explosive powder surface contamination remote detection based on NIR reflectance spectroscopy

2 实验部分

2.1 仪器

实验用一个红外光源照射待测目标, 目标光谱数据获取设备为实验室团队自研近红外成像光谱仪, 其原理为: 使用 LCTF(液晶可调谐滤光片)设备调整测量波段频率, 在其后放置近红外短波相机采集当前波段下的目标面阵图像, 实现目标近红外光谱成像数据立方体的获取。同时, 辅助一块标准光学白板作为反射率计算参考。近红外成像光谱仪的像元数为 640×512 , 波段范围为 $1\ 000 \sim 1\ 750\ \text{nm}$, 采集波长间隔为 $5\ \text{nm}$, 测量前已完成像元均匀性校正。

2.2 材料

实验准备 5 种制式爆炸物粉末单质, 分别为 AP, CL-20, NQ, RDX 和 TATB; 两种民用混合爆炸物粉末, 分别为工业炸药硝磺(主要成分为 RDX)和烟花爆竹; 为模拟表面沾染, 准备两种代表性材质(棉麻和化纤)布料作为沾染基底。

2.3 样本光谱采集

实验近距离采集并计算不同爆炸物粉末纯样品、不同布料基底的光谱反射率光谱数据作为近红外光谱处理的训练样本集, 图 4 为各样本的典型反射率光谱。

图 4 中, 除个别样本的反射率光谱具有较明显的特征外(如 AP 有两个较为尖锐的特征峰, 分别为 $1\ 205 \sim 1\ 335$ 和 $1\ 490 \sim 1\ 625\ \text{nm}$; RDX 和硝磺有一个明显的特征峰, $1\ 635 \sim 1\ 690\ \text{nm}$), 其他样本光谱特征均表现为缓变的大包络, 并且部分样本特征存在特征重叠(如化纤布和 RDX、硝磺的特征峰重叠)。样本在近红外波段呈现特征不明显、特征交叠严重的现象也符合近红外光谱的规律^[12], 需利用近红外光谱数据处理技术进行定性或定量分析。

2.4 目标光谱数据立方体采集

实验称取一定重量(几毫克)的各爆炸物粉末样品, 并均

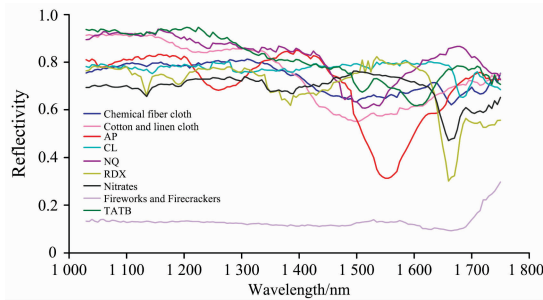


图 4 样本反射率光谱
Fig. 4 Reflectance spectra of samples

匀涂抹在布料基底上指定大小区域(十平方厘米左右)以模拟实际目标沾染。在距离目标 10 m 的位置使用红外光源照射, 并利用近红外成像光谱仪获取并计算其反射率光谱立方体数据, 作为待识别分类的目标数据。

3 结果与讨论

3.1 光谱数据预处理

根据实际光谱采集情况, 考虑仪器噪声等因素, 选择光谱预处理方法为: 5 点移动平滑滤波 + SNV(标准正态变量), 移动平滑滤波可有效消除测量随机白噪声, SNV 处理用来消除近红外光谱受固体颗粒表面粗糙度、颗粒大小以及光程变化的影响^[13]。

3.2 解混校正模型建立

选择 PLSR(偏最小二乘回归)方法建立爆炸物粉末表面沾染近红外解混校正模型, 将 2 种沾染基底当作目标与爆炸物粉末同时加入到模型训练中, 实现爆炸物粉末与沾染基底光谱特征的解混。选取 5 种爆炸物粉末单质、1 种爆炸物粉末混合物(烟花爆竹)和 2 种布料基底反射光谱各 20 条(经过人工筛选, 剔除信噪比差的光谱)进行光谱预处理, 处理后的光谱手动打标签并整理成训练样本库, 对样本库进行 PLSR 计算, 采用交叉验证法完成模型参数迭代。从训练完毕的模型 Factor 得分图情况(图 5)来看各爆炸物粉末及布料基底均能够较好地分类, 实现了特征解混。

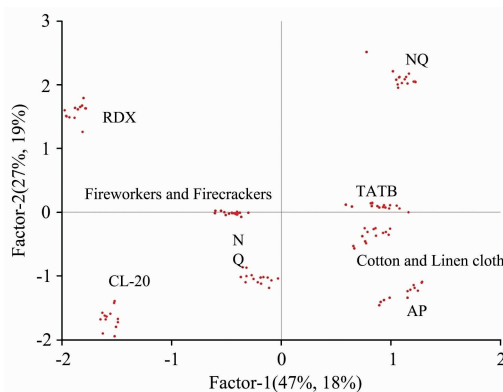


图 5 模型 Factor 得分图
Fig. 5 Factor scores of model

从各样本的预测均方根误差 RMSE(表 1)来看, 较小的 RMSE 说明校正模型具备不错的预测能力。

表 1 各样本预测均方根误差

样本名称	预测值与真实值均方根误差 RMSE
AP	0.123
RDX	0.076
CL-20	0.073
NQ	0.106
TATB	0.083
Fireworkers and Firecrackers	0.088
Cotton and linen cloth	0.072
Chemical fiber cloth	0.075

3.3 目标光谱数据立方体校正及分类识别

利用解混校正模型的校正矩阵 A 完成沾染目标光谱数据立方体校正。对沾染目标数据立方体中各像素的反射率光谱做光谱预处理, 得到待校正数据立方体 T , 用 A 对 T 进行校正, 得到各样本的校正结果: 二维得分图 S 。

$$S_{i, m, n} = A_{i, j} T_{j, m, n} \quad (3)$$

其中, i 为样本序号, 范围为 $1 \sim 8$; j 为波长序号, 范围为 $1 \sim 150$; m 为像素宽度, 范围为 $1 \sim 640$; n 为像素高度, 范围为 $1 \sim 512$ 。

各样本根据得分图自适应设置判别阈值 TD_i , 若当前像素点样本得分 $S_i, m, n \geq TD_i$, 则认为当前像素点 (m, n) 识别为当前样本所指的爆炸物粉末或布料基底(图 6, 以 CL-20 校正得分图及识别为例, 截取样本有效区域像素宽高 70×60)。

3.4 眩光及阴影去除

爆炸物粉末表面沾染遥测实际应用中, 由非目标背景物体造成的眩光和阴影会引起所测像素点处反射率光谱异常(反射率值很大或者很小), 进一步进行校正处理会造成误识别。判断各像素点处原始反射率光谱的平均值大小, 如果值明显大于 1, 则认为发生眩光现象; 如果值很小甚至接近于 0, 则认为被遮挡形成阴影。凡是被认为异常的点都需要从样本得分图中剔除, 从而避免误识别(图 7)。

3.5 预处理过度校正

实验发现在测量噪声较大的情况下, 出现个别背景物体误识别为目标爆炸物粉末的情况(如 RDX 误报)。分析 RDX 误判的原因, 将 RDX 与噪声反射率谱、RDX 与噪声预处理光谱分组进行比较与分析(图 8)。

图 8(a)中, RDX 的光谱反射率平均值在 0.7 以上, 而噪声光谱反射率平均值在 0.5 以下, 二者的差别较大; 图 8(b)中, RDX 和噪声预处理光谱不仅整体轮廓上很相似, 甚至在特征峰 $1635 \sim 1690 \text{ nm}$ 位置相似度也相当高, 出现了预处理过度现象, 造成误识别。

为了消除预处理过度带来的误识别, 进一步改进判别算法, 将光谱反射率信息加入分类判据中, 在得分阈值判别时增加反射率阈值判别, 完成预处理过度校正, 通过双重判别解决误判问题。

建立了爆炸物粉末表面沾染遥测近红外光谱解混校正模型，去除遥测眩光及阴影问题影响，对预处理过度引起的背景干扰噪声进行补偿，有效去除误识别。为验证系统可行

性，实验制备了同一基底多种爆炸物粉末同时沾染的目标样本，利用提出的方法完成各爆炸物粉末沾染的遥测与数据处理。

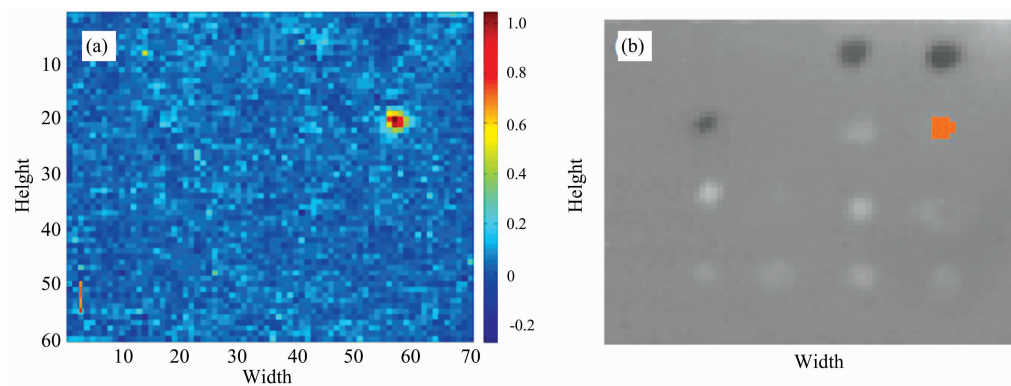


图 6 CL-20 校正得分图及阈值判别识别结果

(a): CL-20 校正得分图; (b): 阈值判别识别结果, 叠加于红外图像上

Fig. 6 Correction score image and recognition result of CL-20

(a): Correction score of CL-20; (b): Recognition result after threshold discrimination overlaid on Infrared image

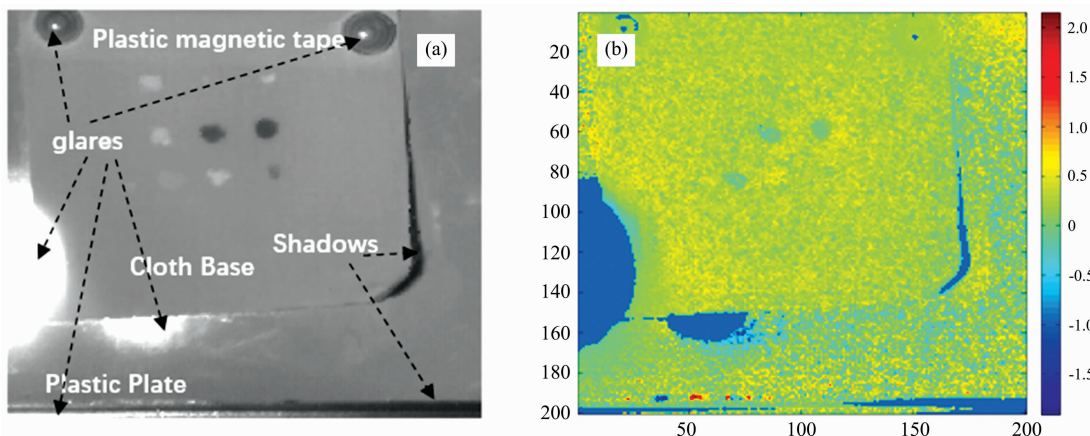


图 7 眩光与阴影去除

(a): 原始图像中的眩光与阴影; (b): 去除眩光和阴影的样本得分图

Fig. 7 Removing glares and shadows

(a): Glares and shadows in the original image; (b): Scores image after glares and shadows removed

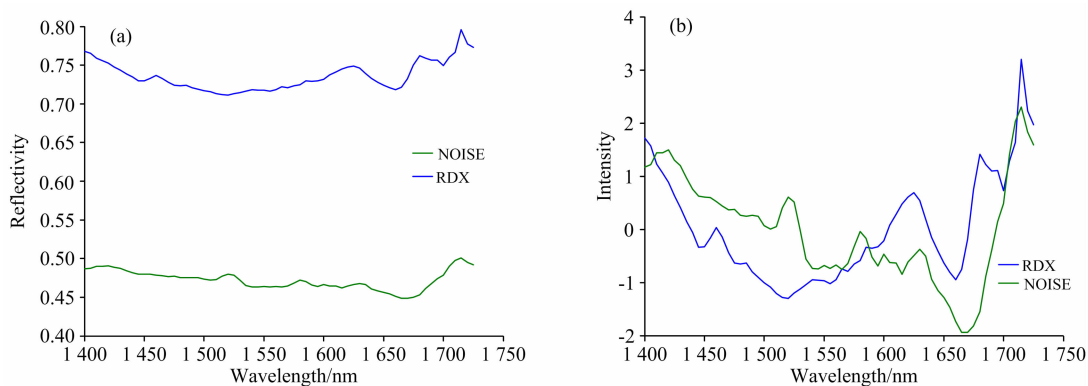


图 8 RDX 与噪声光谱对比

(a): 反射率光谱比较; (b): 预处理光谱比较

Fig. 8 Comparison of spectra between RDX and the noise

(a): Reflectivity spectra; (b): Pretreated spectra

实验结果如图 9 所示，从各样本校正识别得分图上看，沾染的各爆炸物粉末均可以被有效判别出来，实现了多种爆

炸物粉末的远距离探测同时报警，取得了初步成果。

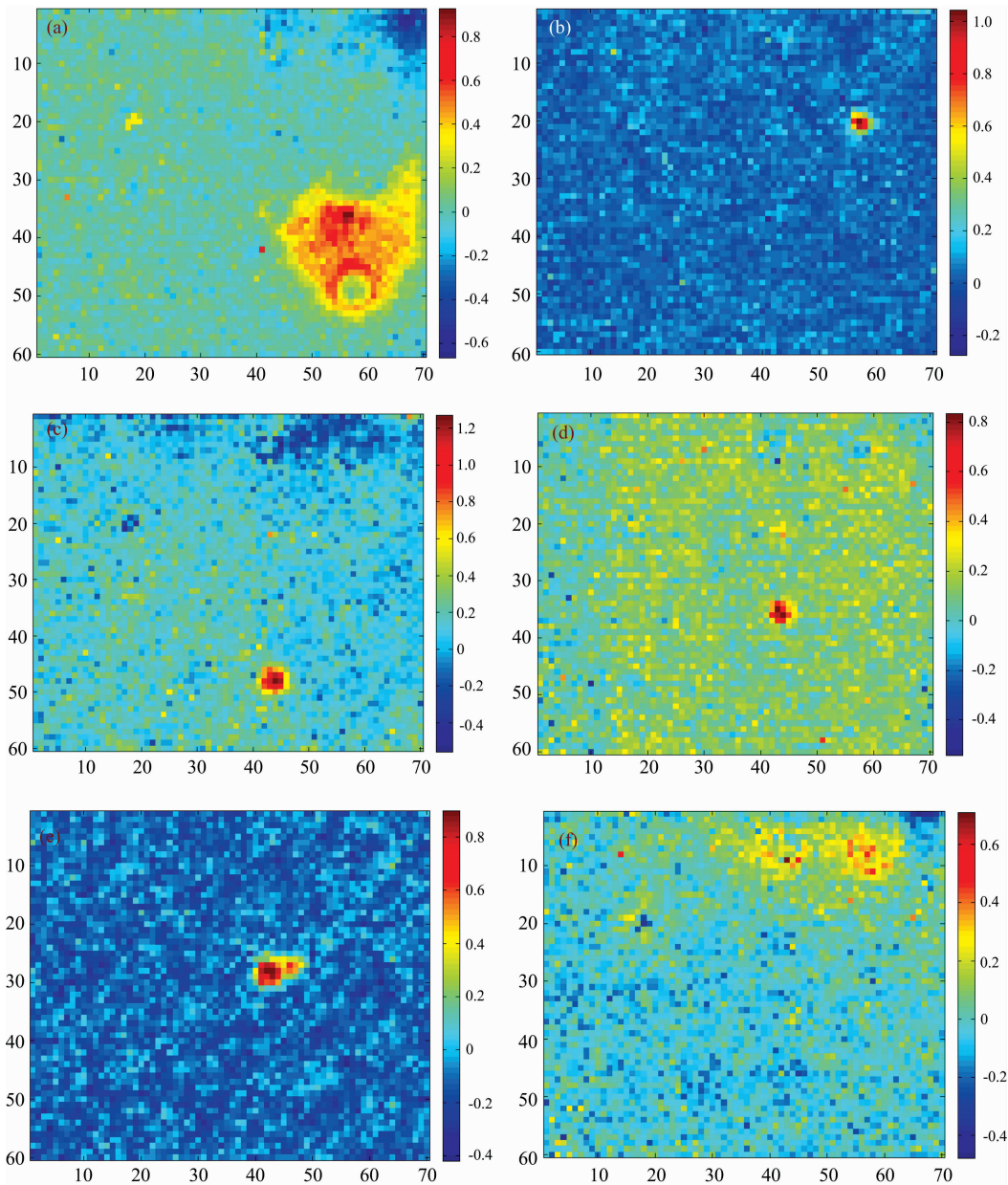


图 9 多种爆炸物粉末表面沾染同时分类效果

(a): AP; (b): CL-20; (c): NQ; (d): RDX; (e): TATB; (f): 烟花爆竹

Fig. 9 Classification result of multi-explosive powder surface contamination

(a): AP; (b): CL-20; (c): NQ; (d): RDX; (e): TATB; (f): Fireworkers and firecrackers

4 结 论

以人员衣物爆炸物粉末表面沾染近红外光谱为研究对象，研究近红外光谱技术在爆炸物粉末表面沾染遥测上的适用性，通过建立近红外反射光谱解混校正模型解决爆炸物粉

末与沾染基底特征重叠问题、遥测应用中噪声干扰问题的解决以及爆炸物粉末表面沾染遥测成像系统的建立，验证了本方法的可行性，实现了爆炸物粉末表面沾染远距离探测，系统具备一定实用性，可为打击爆炸犯罪活动提供一种新的手段。

References

- [1] LIN Hong-liang, ZHU Xiao-hong, FU Qiang, et al(林宏亮, 朱晓红, 付强, 等). Forensic Science and Technology(刑事技术), 2009, (3): 37.
- [2] XUAN Yu, SUN Nan, FU De-feng, et al(宣宇, 孙楠, 傅得锋, 等). Chinese Journal of Explosives & Propellants(火炸药学报), 2012, 35(2): 27.
- [3] WEN Meng, JIANG Lei, LIU Wei, et al(温萌, 蒋蕾, 刘巍, 等). Journal of Chinese Mass Spectrometry Society(质谱学报), 2014, 35(6): 481.
- [4] JIANG Dan-dan, PENG Li-ying, ZHOU Qing-hua, et al(蒋丹丹, 彭丽英, 周庆华, 等). Chinese Journal of Analytical Chemistry(分析化学), 2016, 44(11): 1671.
- [5] LIU Fei, WANG Li, HE Yong, et al(刘飞, 王莉, 何勇, 等). Journal of Infrared and Millimeter Waves(红外与毫米波学报), 2009, 28(4): 272.
- [6] SUN Guang-ming, LIU Fei, ZHANG Fan, et al(孙光明, 刘飞, 张帆, 等). Acta Optica Sinica(光学学报), 2010, 30(4): 1192
- [7] ZHOU Xiao-fen, YE Yang, CHEN Peng, et al(周小芬, 叶阳, 陈芑, 等). Science and Technology of Food Industry(食品工业科技), 2012, 33(5): 413.
- [8] CHEN Lin, DONG Chun-wang, GAO Ming-zhu, et al(陈琳, 董春旺, 高明珠, 等). Journal of Tea Science(茶叶科学), 2016, 36(2): 184.
- [9] HU Chang-qin, FENG Yan-chun(胡昌勤, 冯艳春). Rapid Analysis of Drugs by Near Infrared Spectroscopy(近红外光谱法快速分析药品). Beijing: Chemical Industry Press(北京: 化学工业出版社), 2009. 11.
- [10] ZHOU Rui-xue, ZHANG Ying, GUO Jing-wen(周瑞雪, 张英, 郭景文). Chinese Pharmaceutical Affairs(中国药事), 2016, 30(6): 593.
- [11] GAO Rong-qiang, FAN Shi-fu(高荣强, 范世福). Analytical Instrumentation(分析仪器), 2002, 3: 9.
- [12] LIU Qing-ge, CHEN Bin(刘青格, 陈斌). Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery(农业机械学报), 2003, 34(3): 79.
- [13] Ely D R, Thommes M, Carvajal M T. Colloid Serf. A-Physicochem. Eng. Asp., 2008, 331: 63.

Application of NIR Spectroscopy in Explosive Powder Surface Contamination Remote Detection

LI Da-cheng^{1, 2}, WANG An-jing^{1*}, LI Yang-yu¹, CUI Fang-xiao¹, WU Jun¹, CAO Zhi-cheng¹, WANG Yun-yun^{1, 2}, QIAO Yan-li¹

1. Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Key Laboratory of General Optical Calibration and Characterization Technology, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China
2. University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China

Abstract Aiming at the problem of explosive powder detection on suspected personnel and clothing surfaces in a wide open space, a remote sensing method of explosive powder surface contamination based on NIR spectroscopy was studied, a NIR imaging spectral data acquisition system was developed, the NIR reflection characteristic spectra of various explosive powder and contamination substrates was measured, numbers of explosive powder surface contamination samples were prepared. In view of the aliasing problem for NIR reflection characteristics of explosive powder and substrate, a NIR spectral unmixing correction model was constructed by using NIR spectral data processing technology to remove the interference of contaminated substrate signal on the identification of explosive powder. Aiming at the interference caused by uneven illumination of the light source (saturation due to strong light reflection and weak signal by shadow), the correction score maps were effectively filtered to avoid misidentification problems. In addition, the problem of false identification caused by excessive spectral pretreatment with large background noise was corrected by using the mean spectral reflectance and score maps. The experiments show that the problem of surface contamination aliasing is solved, the interference of illumination and other noise factors are removed, the misclassification is avoided, AP (ammonium perchlorate), CL-20 (hexanitrohexanithine), NQ (nitroguanidine), RDX (blacksorkin), TATB (triaminotrinitrobenzene), Nidi (industrial explosives), fireworks and other explosive powders and mixtures are successfully identified on the substrates of typical background materials (Cotton and linen cloth, chemical fiber

cloth), the feasibility of the system and method is verified, the remote sensing imaging alarm of explosive powder surface contamination is realized first in the laboratory, and the effective distance can reach tens of meters, the system has certain application value and development potential.

Keywords NIR Spectra; Explosive powder; Surface contamination; Classification

(Received Dec. 17, 2019; accepted Mar. 25, 2020)

* Corresponding author