

文章编号: 2095-4980(2024)03-0296-07

反射式 THz-TDS 用于轨道交通典型液体安检的实验

徐利民^{1a, 1b, 2}, 吴 衡³, 王 涛³, 程良伦³, 秦玉文^{1a, 1b, 2}

(1. 广东工业大学 a. 信息工程学院; b. 先进光子技术研究所, 广东 番禺 510006; 2. 广东省信息光子技术重点实验室, 广东 番禺 510006; 3. 广东省信息物理融合系统重点实验室, 广东 番禺 510006)

摘 要: 太赫兹时域光谱(THz-TDS)技术用于轨道交通易燃易爆危险液体的安全检测, 需要兼顾速度和准确率。一般在大量人群中, 因为检测速度限制, 不适合直接采用实验室常用的测试指纹谱之后再与样品数据库的吸收峰位置比对的方法来精确确定样品成分信息。针对轨道交通中典型液体样品, 在常温常压和正常大气湿度(25 °C、60% 空气湿度)条件下, 测试反射式 THz-TDS 的脉冲回波数据。建立非易燃易爆危险品、易燃易爆类、强酸类等分类数据库, 结合样品光谱数据库特征, 归纳了 4 种典型的时域脉冲谱线, 即含有显著次级反射峰、微小次级反射峰、无反射峰和向下反转的次反射峰。依据太赫兹时域谱线次级反射峰的特征, 结合分类识别决策模型, 快速实现了综合分类判别, 准确率达 80% 以上。

关键词: 太赫兹时域光谱; 液体检测; 轨道交通安检

中图分类号: TN21; O69

文献标志码: A

doi: 10.11805/TKYDA2022164

Reflective Terahertz Time-Domain Spectroscopy for security inspection of typical liquids in railway transportation

XU Limin^{1a, 1b, 2}, WU Heng³, WANG Tao³, CHENG Lianglun³, QIN Yuwen^{1a, 1b, 2}

(1a.School of Information Engineering; 1b.Advanced Institute of Photonics Technology, Guangdong University of Technology, Panyu Guangdong 510006, China; 2.Guangdong Provincial Key Laboratory of Information Photonics Technology, Panyu Guangdong 510006, China; 3.Guangdong Provincial Key Laboratory of Cyber-Physical System, Panyu Guangdong 510006, China)

Abstract: Speed and accuracy must both be taken into consideration when using Terahertz Time-Domain Spectroscopy(THz-TDS) for security inspection of flammable and explosive contraband liquids in railway transportation. Due to speed limitation, the exact comparison of the precise fingerprint location between testing results and database, which is the common method adopted in laboratory analysis, cannot be directly utilized for the security inspection of large passenger flow. The reflective terahertz time-domain spectroscopy data for typical liquids in railway transportation is acquired under standard temperature, pressure, and normal humidity level(25 °C, RH 60%). The categorized time-domain database for non-flammable and non-explosive liquids, flammable and explosive liquids, and strong acid, is established. Based on the database, the typical time-domain pulse patterns can be classified into four categories, namely terahertz time domain spectroscopy with obvious secondary pulse, minor secondary pulse, no secondary pulse and obvious negative secondary pulse. According to terahertz time domain characteristics, rapid detection with better than 80% of accuracy is achieved through classification decision model.

Keywords: Terahertz Time-Domain Spectroscopy; liquid testing; railway station inspection

太赫兹时域光谱技术用于轨道交通安检的特定场景中, 通常会面临检测速度和检测精确程度的矛盾。大量人群所携带液体的检测, 需同时考虑速度和检测结果的准确率。轨道交通的液体安检, 一般只需确定被测试样品是否安全, 不必确认样品具体成分。当前通常的液体安检设备基于热传导和微波检测法, 已有“同方威视”、“安天下”等, 但检测准确率较低。太赫兹时域光谱技术, 因为携带更宽谱段的信息, 有望提高液体的检

收稿日期: 2022-08-23; 修回日期: 2022-10-20

测准确率。基于超快激光激励的太赫兹脉冲高功率产生和高灵敏度探测技术的成熟度也逐渐进入到实用水平。基于自旋电子学的宽带太赫兹源可以提供更加廉价的超宽带太赫兹辐射^[1]。便携式的低成本太赫兹时域光谱系统已经可以满足商业应用,有望进一步在轨道交通液体安检中得到产业应用^[2]。本文基于轨道交通太赫兹快速安检国家重点研发专项的实验工作,总结了轨道交通典型液体(包含安全和危险液体)的太赫兹反射式时域光谱数据特征,依据时域脉冲的次级反射峰情况划分为四类:含有显著次级反射峰、微小次级反射峰、无反射峰和显著向下反转的次级反射峰。结合决策分析模型,根据时域波形特征直接快速判断液体归属种类(安全、危险或可疑),对于易燃易爆溶液的检测准确率可达95%以上;强酸强碱溶液,因为次级反射峰的强度与溶液浓度呈现明显的正向线性关系,可与普通安全液体做区分,也可实现较高的判决准确性;弱酸弱碱、低浓度酒精的次级反射峰规律与常规安全液体类似,视为可疑,需结合人工辅助检测;能够明确判断为危险溶液的准确率可达90%以上;将可疑液体归属于不能明确判断的样品,则本文的实验对危险液体的综合判断准确度可达80%以上。

本文实验数据,主要包含典型的非易燃易爆安全液体,易燃易爆类液体,酸、碱性溶液等3类样品。将待测液体装入普通塑料(聚丙烯材料)制成的容器中,测试轨道交通典型液体样品的太赫兹时域波谱数据^[3],初步建立了轨道交通典型液态样品在常温常压和正常大气湿度条件下的太赫兹时域波谱数据库,希望对推进太赫兹安检技术在轨道交通安检的产业应用有借鉴意义。

1 非易燃易爆的安全液体的反射式太赫兹时域光谱检测

全部测试过程中,保持反射式光路(如图1所示)不变,太赫兹脉冲的入射角度不变,测量的温/湿度环境均为常温常压,大气湿度(RH)60%左右。通常,光电导天线的辐射能量为几十至几百微瓦。由于采用 Advantest THz-TDS 系统,反射式光路的定位孔决定了光电导天线的发射端到接收端的距离基本固定,总光程约为28 cm。液体放置在离抛面镜8~10 cm的距离,采用1 024次时间积分提高信噪比,设置频域分辨力为7.9 GHz。由于本实验数据采用科研仪器测量,单个样品的测量时间为数分钟。测试过程采用控制变量方法,只改变样品池中液体的种类和含量百分比。样品池的材质为塑料包装,里面充满了待检测液体。

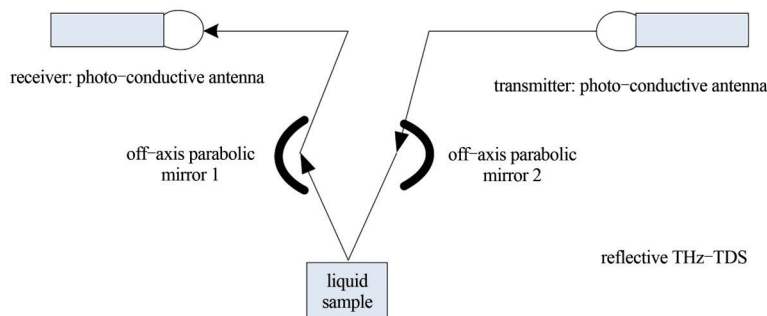


Fig.1 Reflective THz-TDS for liquid detection
图1 太赫兹时域光谱系统反射式检测液体光路图

常规非易燃易爆的安全液体归一化太赫兹时域光谱及对比效果如图2所示,为反射式测量的太赫兹脉冲波形,一般具有正向次反射峰。主反射峰为空气与塑料包装材料的第一界面的第一级反射峰,次级反射峰为塑料包装材料与溶液的第二界面的次反射峰,塑料包装材料的厚度约为2~3 mm。本文中所有液体的时域谱线均采用同样的光路结构,时域波形的主反射峰、次反射峰均为上述2个界面的反射峰。采取控制变量法,每次测量的主反射峰均反映太赫兹时域脉冲在第一界面的反射情况,次级反射峰反映溶液与塑料包装材料的界面特性。按照主反射峰进行统一归一化,更方便比较次级反射峰变化规律。为更好地对比太赫兹时域谱线,统一将反射峰的上顶点纵坐标位置设为纵轴起始点,纵坐标从顶点开始向下计算幅值。

2 典型液体危险品的反射式太赫兹时域光谱检测

2.1 酒精类易燃易爆液体

图3为不同浓度酒精的反射式太赫兹时域光谱归一化对比图和展开对比效果图。由图可见,随着酒精浓度的增高(10%~100%),整体时域谱线的液体峰呈下降趋势,直至无水乙醇谱线的幅值降至最低点,此时溶液的液体峰不容易被察觉^[4-5]。

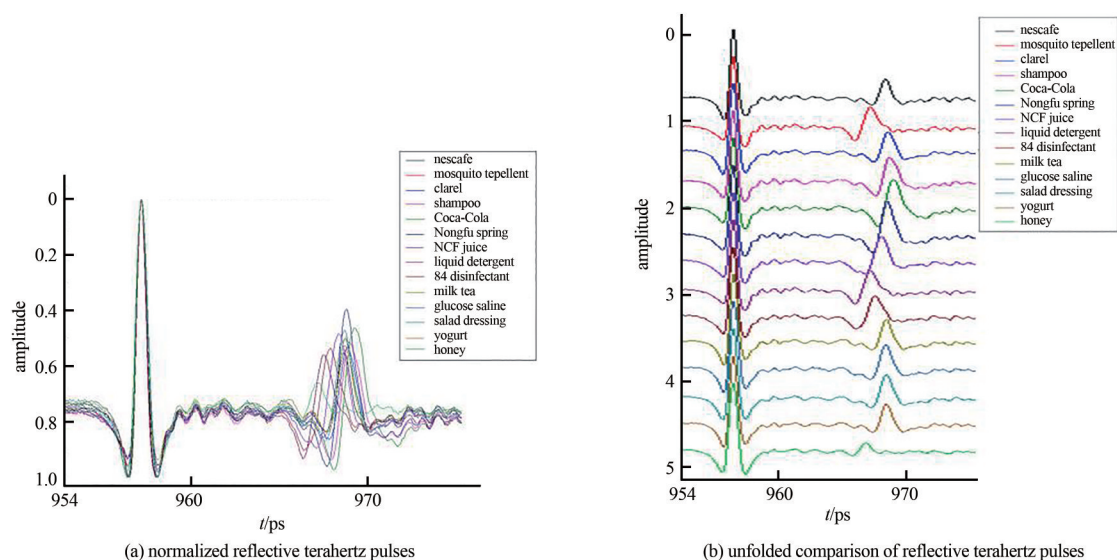


Fig.2 Comparison of reflective terahertz pulses for non-flammable and non-explosive liquids

图 2 非易燃易爆液体太赫兹时域光谱及展开对比效果

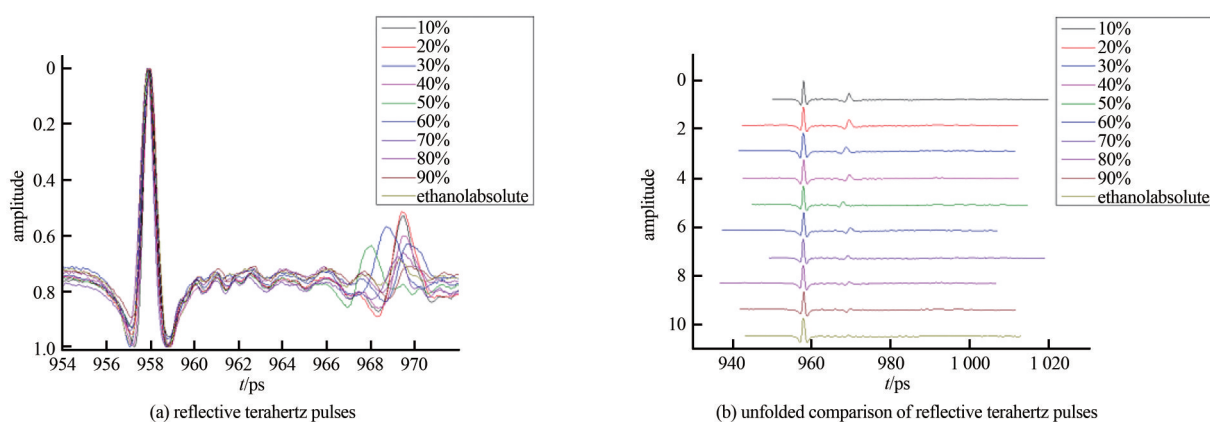


Fig.3 Comparison of reflective terahertz pulses for alcohol with different concentrations

图 3 不同浓度酒精溶液的太赫兹时域光谱及展开对比效果

2.2 酸类危险液体

针对典型强酸类液态样品,测试了不同浓度(5%、20%、60%)的硫酸、硝酸和盐酸的反射式太赫兹时域光谱波形。

1) 硫酸

对不同浓度的硫酸数据进行两次随机抽样绘图并归一化,结果如图 4 所示。根据液体峰的幅值分布,大致可推断液体峰幅值随浓度增高而呈上升趋势。

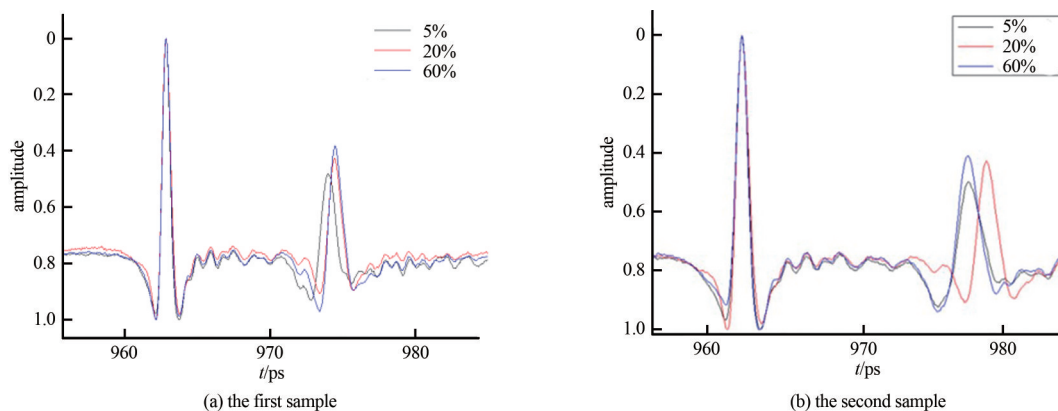


Fig.4 Comparison of reflective terahertz pulses for sulphuric acid with different concentrations

图 4 两次检测不同浓度硫酸的太赫兹时域光谱归一化对比图

2) 硝酸

对不同浓度的硝酸数据进行两次随机抽样绘图并归一化, 结果如图5所示。可以看出, 液体峰幅值趋势跟硫酸相似, 即随着浓度增高, 液体峰幅值逐渐上升。

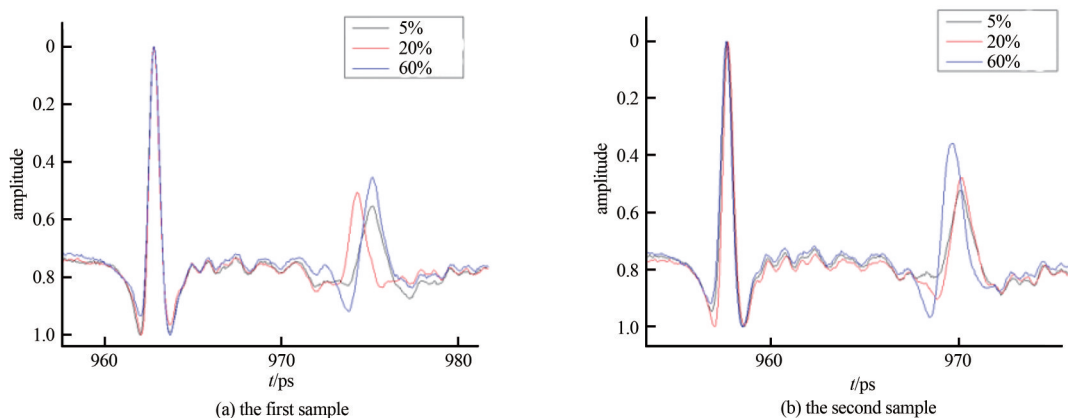


Fig.5 Comparison of Reflective Terahertz Pulses for nitric acid of different concentrations

图5 两次检测不同浓度硝酸的太赫兹时域光谱归一化对比图

3) 盐酸

对不同浓度的盐酸数据进行两次随机抽样绘图并归一化, 结果如图6所示。可以看出, 液体峰幅值趋势跟硫酸相似, 即随着浓度增高, 液体峰幅值逐渐上升。

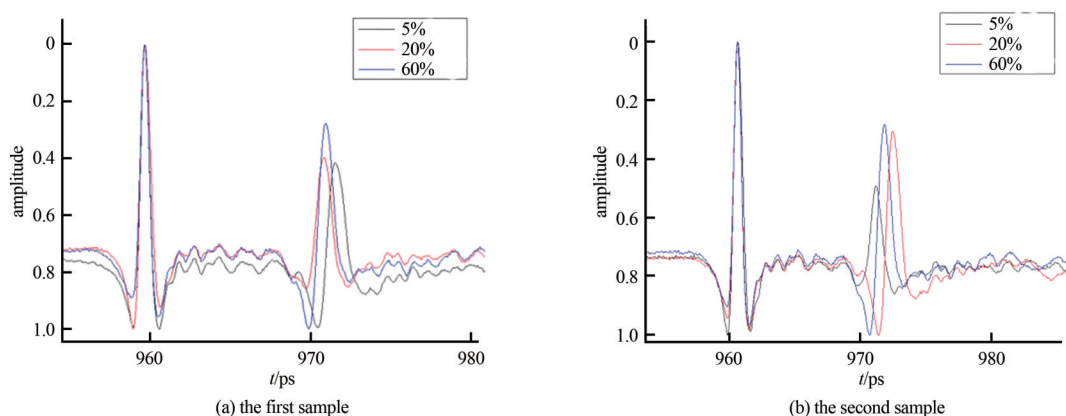


Fig.6 Comparison of reflective terahertz pulses for hydrochloric acid with different concentrations

图6 两次检测不同浓度盐酸的太赫兹时域光谱归一化对比图

以上测试是在正常大气环境中进行, 被测溶液的放置位置、环境参数在小范围内有所波动, 但数据的总体变化趋势符合单调性规律。

2.3 典型谱线形状的归类

对所有已收集的液体数据按照液体峰波形进行归类汇总, 主要分为以下四大类: 包含明显液体峰的时域谱、包含较明显液体峰的时域谱、无明显液体峰的时域谱、含向下液体峰的时域谱, 其对应的液体于图7中的归一化重叠图中给出。对所提每一类取一条谱线进行相互比对, 效果如图8所示。常规安全的液体、低浓度的酸/碱性溶液和酒精溶液均有明显或较明显的液体峰, 难以直接判决, 可以采用加水稀释的方法进行辅助判断。酸/碱性溶液稀释后的次级反射峰的相对幅值会明显下降, 而酒精溶液的次级反射峰的相对幅值会明显上升, 常规安全液体的次级反射峰的相对幅值基本无变化。据此可将常规安全液体、酸/碱性溶液和酒精溶液区分出来。当太赫兹时域脉冲无明显液体峰或包含向下液体峰的时域谱, 均可以直接准确判断液体为易燃易爆危险液体^[6-8]。

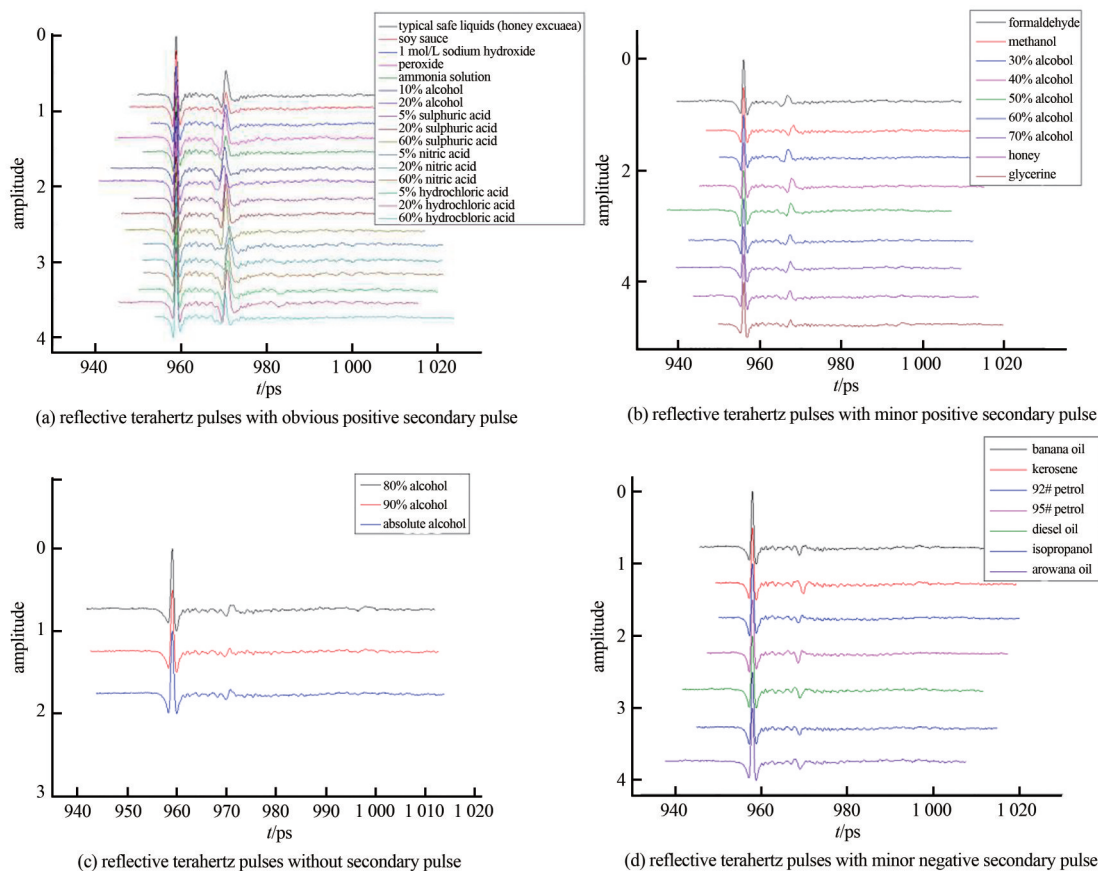


Fig.7 Four kinds of reflective terahertz pulses divided according to the secondary reflective pulse of different solutions

图 7 依据次级反射峰划分的 4 种太赫兹脉冲波形及对应的溶液

3 分类判别

通常情况下, 基于太赫兹时域光谱频域特征的判决算法需要将时域脉冲波形数据转换到频域, 计算吸收率和折射率, 并结合样品的太赫兹波谱数据库比对, 确定样品的成分信息^[9-11]。在轨道交通安检场景下, 由于需要适应快速鉴别物质的需求, 只需将被检测样品划分为安全、危险或可疑三大类。对确定为安全或危险的样品无需二次鉴别, 对确认为可疑样品, 需进行二次判决。对于安全液体和蜂蜜等特例, 次级反射峰与其他可疑样品区分不明显, 可设置人工辅助(品尝)检测方式解决不能确定而乘客又认定为安全的液体检测问题, 也可以采用掺水稀释的方法观察次级反射峰的相对幅值变化。一般酸/碱性溶液的次级反射峰会随着浓度降低, 相对幅值明显下降; 酒精溶液的次级反射峰会随着浓度降低, 相对幅值有明显上升; 常规安全液体的次级反射峰的相对幅值基本保持不变。

无水乙醇和汽油、天那水、煤油、柴油等典型的易燃易爆液体的太赫兹时域反射谱, 具有相对于主峰极小的次级峰、甚至负的次级反射峰。根据这个谱线特征, 对高浓度酒精、无水乙醇、92#汽油和 95#汽油、天那水、煤油、柴油、异丙醇等 8 种常见的易燃易爆液体, 分别获取 5 个谱线样本, 与咖啡、农夫山泉、可乐等 14 种非易燃易爆的安全液体样本相互混合, 采用 K 最邻近(K-Nearest Neighbor, KNN)决策模型对谱线进行特征提取。进行了 20 次检测实验, 准确识别易燃易爆液体 19 次, 识别率达到 95%。错误识别的情况主要是与蜂蜜、丙三醇两种小的次级反射峰谱线特征相互混淆。

硫酸、硝酸、盐酸等强酸、氢氧化钠强碱和过氧化氢强氧化剂, 具有较强的正向次级反射峰, 且次级反射峰的强度与溶液的浓度正相关, 通过加水稀释, 可以降低次级反射峰强度。对上述 5 种 20% 和 60% 浓度的强酸强碱和强氧化剂溶液分别获取 5 个谱线样本, 结合加水稀释的方法分别重复测量 5 次谱线样本, 与 14 种非易燃易爆

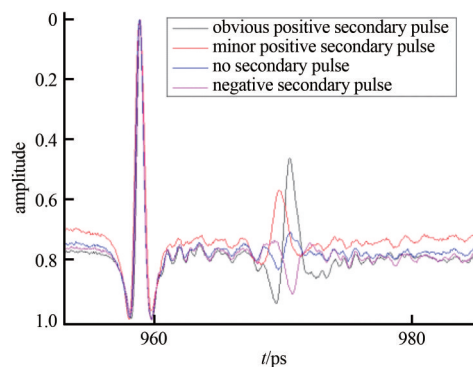


Fig.8 Comparison of four kinds of reflective terahertz pulses

图 8 四种谱线比较

爆的安全液体及加水稀释后的样本相互混合,进行了20次检测实验,准确识别强酸强碱和强氧化剂的次数18次,识别率达到90%。错误识别的情况主要是低浓度的酸碱溶液反射谱容易与酱油的反射谱相互混淆。

将8种易燃易爆液体、3种强酸溶液、一种强碱溶液和一种强氧化剂及其稀释之后的样本谱线与14种非易燃易爆的安全液体及稀释之后的样本谱线混合。在进行判别算法处理时,只在时域进行数据训练和判别,无需在频域进行常规意义上的太赫兹指纹谱识别。采用如图9所示的算法流程,结合支持向量机(Support Vector Machine, SVM)、主成分分析法(Principal Component Analysis, PCA)和决策树KNN分类模型,基于普通的PC算力(Intel i7,16 G内存),在3~5 s内即可实现判决。将易燃易爆液体、强酸强碱溶液和强氧化剂合并为危险类别,非易燃易爆的常见安全液体合并为安全类别,判决最终只输出结果为安全或危险。进行20次检测试验,均能实现超过15次以上的准确识别次数,综合准确率达80%以上。如结合安检现场对不能确定的液体人工辅助检测,可进一步提高综合检测准确度。

本文采用的数据预处理方法是将不同的太赫兹时域波谱的主反射峰统一归一化,只有次级反射峰的相对大小反映了被检测液体的性质。控制检测条件为常温常压、正常室内湿度条件,只比较主反射峰和次反射峰的相对大小,可以复现检测结果,克服时域光谱数据受环境条件的影响。图10为本文采用的判决模型,对归一化后的主峰和次级反射峰的相对幅值和正负符号、是否随着浓度稀释而发生相对幅值变化等因素进行判决,从而判断被检测液体是易燃易爆液体、强酸强碱或强氧化剂,或安全液体。

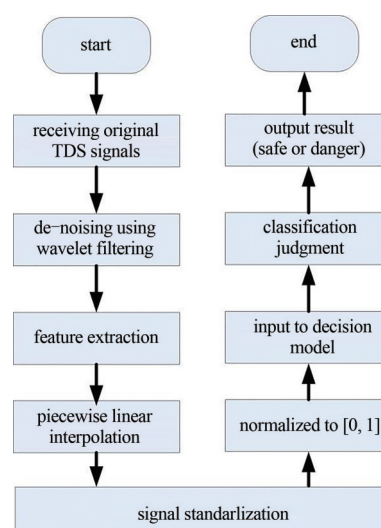


Fig.9 Feature extraction and decision process based on terahertz time-domain pulses

图9 基于太赫兹时域脉冲特征提取与判决流程

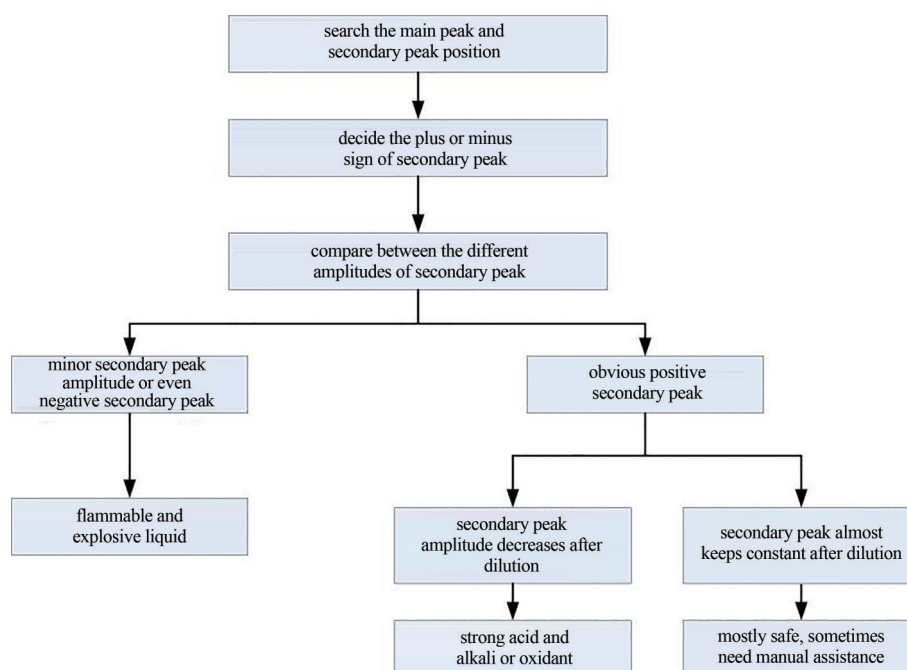


Fig.10 The decision model

图10 判决模型

4 结论

在常温常压和正常大气湿度条件下,测试了轨道交通安检场景下存放在普通塑料包装的典型液体的反射式太赫兹时域光谱数据,并建立包含部分典型样品的安全、易燃易爆、强酸/碱类等分类数据库,归纳总结了时域谱线的典型特征。限于样品可获得性和时间原因,样品种类包含10余种常规安全样品、硫酸/硝酸/盐酸3种酸性

溶液样品、氢氧化钠 1 种碱性溶液样品、过氧化氢一种强氧化剂、乙醇/汽油/柴油/煤油/天那水等 8 种易燃易爆溶液样品。

直接对时域脉冲波形做 KNN 分类判决, 在普通 PC 算力的条件下, 可快速实现分类判决。轨道交通实际检测应用中可采用压电伸缩的光纤环延迟线和 FPGA 快速采集太赫兹时域脉冲数据, 单个样品的数据采集可实现在 1~2 s 完成。本文提供的太赫兹液体检测方法, 更适应轨道交通大流量人群场景下的快速安检需求, 可为太赫兹时域光谱技术用于真实场景下的轨道交通安检提供有益的借鉴。

参考文献:

- [1] 冯正, 谭为, 成彬彬, 等. 基于自旋电子学的太赫兹波产生方法[J]. 太赫兹科学与电子信息学报, 2016, 14(4): 502–507. (FENG Zheng, TAN Wei, CHENG Binbin, et al. THz wave generation methods based on spintronics[J]. Journal of Terahertz Science and Electronic Information Technology, 2016, 14(4): 502–507.) doi:10.11805/TKYDA201604.0502.
- [2] KRUMBHOLZ N, JANSEN C, SCHELLER M, et al. Handheld terahertz spectrometer for the detection of liquid explosives[J]. Millimetre Wave and Terahertz Sensors and Technology II, 2009(7485): 748504. doi:10.1117/12.830381.
- [3] 重庆市公安局, 重庆市交通局. 关于公布《重庆市轨道交通禁止限制携带物品目录》的通告[EB/OL]. (2022-11-26). https://gaj.cq.gov.cn/zwgk/zcwj/xfgfwj/202212/t20221201_11349458_wap.html. (Chongqing Public Security Bureau and Chongqing Transportation Bureau. Notice on the publication of the catalogue of prohibited and restricted items in Chongqing rail transit[R]. [EB/OL]. (2022-11-26). https://gaj.cq.gov.cn/zwgk/zcwj/xfgfwj/202212/t20221201_11349458_wap.html.)
- [4] JEPSEN P U, JENSEN J K, MØLLER U. Characterization of aqueous alcohol solutions in bottles with THz reflection spectroscopy[J]. Optics Express, 2008, 16(13): 9318–9331. doi:10.1364/OE.16.009318.
- [5] JEPSEN P U, MØLLER U, MERBOLD H. Investigation of aqueous alcohol and sugar solutions with reflection terahertz time-domain spectroscopy[J]. Optics Express, 2007, 15(22): 14717–14737. doi:10.1364/oe.15.014717.
- [6] IKEDA T, MATSUSHITA A, TATSUNO M, et al. Investigation of inflammable liquids by terahertz spectroscopy[J]. Applied Physics Letters, 2005, 87(3): 034105. doi:10.1063/1.1999847.
- [7] BECKMANN J, MARCHETTI B, VON CHRZANOWSKI L S, et al. Optical constants of harmful and highly energetic liquids for application to THz screening systems[J]. IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology, 2016, 6(3): 396–407. doi:10.1109/TTHZ.2016.2547319.
- [8] FLANDERS B N, CHEVILLE R A, GRISCHKOWSKY D, et al. Pulsed terahertz transmission spectroscopy of liquid CHCl₃, CCl₄, and their mixtures[J]. Journal of Physical Chemistry, 1996, 100(29): 11824–11835. doi:10.1021/jp960953c.
- [9] 张磊巍, 左剑, 张存林. 葡萄糖溶液的太赫兹光谱观察[J]. 太赫兹科学与电子信息学报, 2015, 13(5): 707–711. (ZHANG Leiwei, ZUO Jian, ZHANG Cunlin. Observation of terahertz spectra of glucose solution[J]. Journal of Terahertz Science and Electronic Information Technology, 2015, 13(5): 707–711.) doi: 10.11805/TKYDA201505.0707.
- [10] 郑转平, 巩稼民. 乳清酸的太赫兹光谱研究[J]. 太赫兹科学与电子信息学报, 2019, 17(4): 563–566. (ZHENG Zhuanping, GONG Jiamin. Investigation on THz spectrum of orotic acid by THz-TDS[J]. Journal of Terahertz Science and Electronic Information Technology, 2019, 17(4): 563–566.) doi:10.11805/TKYDA201904.0563.
- [11] 姜怡欣, 范鑫怡, 于敏霞, 等. 基于太赫兹波谱的液体极性测量[J]. 光学仪器, 2019, 41(3): 1–6. (JIANG Yixin, FAN Xinyi, GAN Minxia, et al. Investigation of liquid polarity based on terahertz spectroscopy[J]. Optical Instruments, 2019, 41(3): 1–6.) doi:10.3969/j.issn.1005-5630.2019.03.0.

作者简介:

徐利民(1987–), 男, 在读博士研究生, 助理研究员, 主要研究方向为太赫兹波谱与成像、太赫兹雷达探测与成像、太赫兹通信与 6G. email: xulimin@gdut.edu.cn.

吴衡(1985–), 男, 博士, 副教授, 主要研究方向为红外与太赫兹成像、水下成像等.

王涛(1983–), 男, 博士, 副教授, 主要研究方向为智能制造、信息物理融合系统、机器视觉和太赫兹检测等.

程良伦(1964–), 男, 博士, 教授, 主要研究方向为智能制造、信息物理融合系统、物联网、太赫兹成像与检测等.

秦玉文(1960–), 男, 博士, 教授, 主要研究方向为光纤与光纤通信、光纤传感、保密通信.