

太赫兹光谱技术在爆炸物探测中的应用及研究进展

张瑞萍¹, 王 琴², 暴丽霞^{3*}

- (1. 北京警察学院 治安系, 北京 102202;
2. 联想(北京)有限公司, 北京 100089;
3. 北京理工大学 分析测试中心, 北京 102488)

摘 要: 由于其低能量、高透射、指纹谱和安全性等优点, 太赫兹光谱技术能够用于检测和辨识单质、混合物和隐匿的爆炸物, 是安全领域中具有潜力的探测技术, 在监测和防范爆炸物风险等方面有着广阔的应用前景。但是, 由于仪器、环境、样品等多种因素的影响, 导致太赫兹光谱数据信噪比下降, 无法得到有效的光谱特征峰, 严重影响寻峰比对识别爆炸物方法的有效性及准确性。为了提高太赫兹光谱数据的准确性, 探讨了机器学习技术在太赫兹光谱分析技术检测爆炸物方面的应用, 指出了机器学习可以进一步提高太赫兹光谱技术检测的准确性, 并且开发更加精细的数据处理技术和更有效的数据增强技术, 将机器学习与传统谱学分析技术相结合, 是太赫兹光谱技术探测爆炸物领域的重要发展方向。

关键词: 公共安全; 爆炸物探测; 太赫兹光谱; 机器学习

中图分类号: TN247 **文献标志码:** A **DOI:** 10.3788/IRLA20240293

0 引 言

近年来, 全球范围内频发的恐怖主义爆炸袭击事件^[1-3]导致社会动荡, 引起了世界各国对爆炸物探测的重视。爆炸物探测在监测和防范爆炸物风险等公共安全上意义重大, 各国政府都投入了巨大的资金和科研力量。光谱分析技术具有快速、准确、非接触等优点^[4], 已被广泛应用于爆炸物的分析检测中。光谱分析技术是通过测量物质内部量子能级之间的跃迁引起的辐射的波长和强度, 以确定物质性质、结构和含量的方法^[5]。根据爆炸物对各频段电磁波的吸收、反射、散射的不同, 主要检测手段有拉曼光谱技术、太赫兹技术、毫米波技术、X 射线技术等, 且检测主要利用图谱特征进行物质分析。拉曼光谱技术是一种利用分子散射光谱获取物质结构和官能团信息的技术, 广泛应用于爆炸物检测, 但受到荧光干扰、样品状态等因素的影响, 峰的重现性较差, 更多的是作为爆炸物的定性分析技术, 而且无法检测非透明材质包

装的爆炸物。毫米波技术可实现对衣物下隐藏的爆炸物的检测, 但存在侵犯隐私和辐射安全性问题。X 射线技术通过衰减情况区分不同材料^[6], 在安检领域发展成熟, 穿透性强, 但对生物有一定损害。而太赫兹技术因其独特的优势, 广泛应用在无损检测、环境监测和国防安全领域^[7], 其在爆炸物检测方面具有巨大潜力。

太赫兹波是一种频率为 0.1~10 THz 的电磁波, 波长为 0.03~3 mm, 它们的具体数值在每秒一万亿次振动的数量级范围内 (单位为 THz), 这也是它们被称为“Terahertz”的原因所在。这种特殊性质使其成为各种应用领域中的理想选择之一, 包括但不限于医学诊断仪器制造商们正在研究如何利用这些特点来改进他们的产品性能并提高准确度等情况。此外, 太赫兹波的非入侵性和生物组织的高分辨能力、强穿透性、特异性指纹谱以及安全性^[5,8]为其提供了独特的竞争力和吸引力。因此, 利用太赫兹技术对爆炸物进行检测是近年来国内外关注的热点问题之一。文中对太赫

收稿日期: 2024-07-04; 修订日期: 2024-10-10

基金项目: 北京警察学院校企合作项目 (2023KXJ09)

作者简介: 张瑞萍, 女, 教授, 硕士, 主要从事危险物品管理、防暴安全检查方面的研究。

通讯作者: 暴丽霞, 女, 工程师, 硕士, 主要从事大型仪器设备管理以及隐身材料分析表征方面的研究。

兹技术在爆炸物探测方面的优点及局限性进行归纳总结,进一步探讨了机器学习在太赫兹技术中的应用,并对未来太赫兹技术在爆炸物探测方面的研究方向提出了建议。

1 太赫兹光谱技术在爆炸物探测方面的应用

爆炸物探测领域得益于太赫兹技术的进步,在过去的 15 年中,为太赫兹频率范围内气相和固相爆炸物的检测和鉴定提供了大量的信息^[9]。利用太赫兹光谱技术能够获取爆炸物的指纹图像,并进一步分析出其内部构造信息,从而实现对爆炸物的准确识别。

1.1 太赫兹时域光谱技术的原理

太赫兹波的频率位于微波和红外之间,具有频率

高、波长短等特点,如图 1 所示。太赫兹时域光谱技术 (Terahertz time-domain spectroscopy, THz-TDS) 是一项相干光探测技术,比传统的傅里叶红外光谱法更加敏感,可以采用透射、反射、全反射等不同的测量方式。典型的 THz-TDS 实验系统通常包括超快脉冲激光器、THz 发射器、THz 探测器以及时间延迟控制系统^[5],如图 2 所示。飞秒激光器产生的宽带短脉冲信号被分为两路,一路用于激发样品,另一路作为参考信号,这两路信号最终会在探测器处相干叠加,实验者可以通过记录样品对信号的影响来获取物质的光谱信息、结构特征以及光学参数,例如折射率、吸收率和消光率等^[10]。

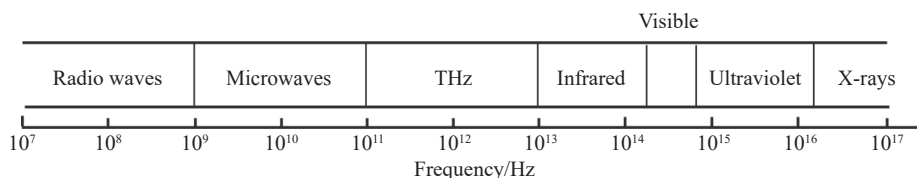


图 1 太赫兹波在电磁波谱中的位置

Fig.1 The position of terahertz waves in the electromagnetic spectrum

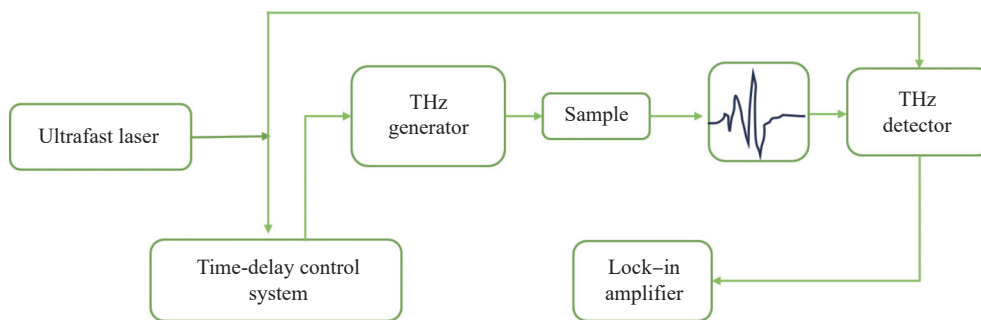


图 2 典型太赫兹时域光谱系统

Fig.2 Typical terahertz time-domain spectroscopy system

1.2 太赫兹时域光谱技术在爆炸物探测方面的研究

许多常用炸药,如 PETN、HMX、RDX、NQ、TNT 等,在 0.1~10 THz 的光谱范围内具有独特的特征,这使得太赫兹时域光谱技术成为一种爆炸物探测的理想方法^[11]。2003 年, CAMPBELL 等人首次利用太赫兹光谱获得了组合物 4(C4)、季戊四醇四亚硝酸盐 (PETN) 和赛姆烃塑胶炸药 (Semtex A) 的特征吸收光谱^[12],拉开了太赫兹技术探测爆炸物的序幕。

1.2.1 太赫兹时域光谱技术在单质爆炸物探测方面的应用

段俊杰等^[13]在 0.5~6.0 THz 范围内,利用太赫兹时域光谱技术检测了 HMX、RDX、PETN、LLM-105 和 TATB 共 5 种含能材料,并利用高斯软件对实验测得的特征吸收峰的位置进行模拟指认,分析了这些峰形成的原因,也证实了水蒸气对特征太赫兹波光谱的影响。NORBERT 等^[11]利用 THz-TDS 技术研究了 SAZ

和 SAZ 基炸药族 (AAZ、GUAZ 和 TAGAZ) 以及两种笼状材料 (HNIW 和 TEX) 的太赫兹吸收和折射率数据, 而且研究了温度对峰的位置、形状和强度的影响, 这与分子间结合势的非调和行为有关。DUAN 等利用太赫兹光谱捕捉到不同温度下 2,4,6,8,10,12-六硝基-2,4,6,8,10,12-六氮杂异伍兹烷 (CL-20) 的特征光谱, 并研究了 CL-20 温度诱导相变机理, 提出了一种从分子水平缓解 CL-20 相变的策略^[14]。HE 等人^[15] 利用 THz-TDS 分析了 CL-20 在 23.0~179.8 °C 范围内的低频吸收特征光谱, 有助于深入理解炸药相变的复杂机制和爆炸物的准确探测。基于爆炸物太赫兹光谱的指纹特性及太赫兹光谱学的灵敏性, LIU 等人利用 THz-TDS 光谱技术研究了炸药 2,2-二亚硝基乙烯-1,1-二胺 (FOX-7) 在不同温度下的特征光谱, 并结合固体密度泛函理论 (DFT) 揭示了促进多态转变的物理机制^[16]。CHOI 等在 0.3~3 THz 范围内对纯硝胺炸药 (RDX 和 HMX) 进行了反射太赫兹时域谱分析, 结果显示 RDX 的主吸收峰位于 0.84、1.08、1.50、1.92、2.30 THz, HMX 的主吸收峰位于 1.75、2.50、2.90 THz, 如图 3 所示。RDX 和 HMX 具有完全不同的光谱, 这有利于区分它们^[17]。KOALLA R 等利用反射模式 THz-TDS 光谱和固态 DFT 技术研究了 4-氨基-3,5-二硝基吡唑 (ADNP) 在 0.1~3.0 THz 范围内的特征光谱^[18], 结果表明, 吸附系数在 0.36、1.20、1.52、1.77、2.40、2.75 THz 位置呈现出 6 个明显的吸收峰, 该实验结果与理论计算吻合得很好, 而且在低频模式下出现了红移, 这归因于非调和性和温度效应的综合作用。

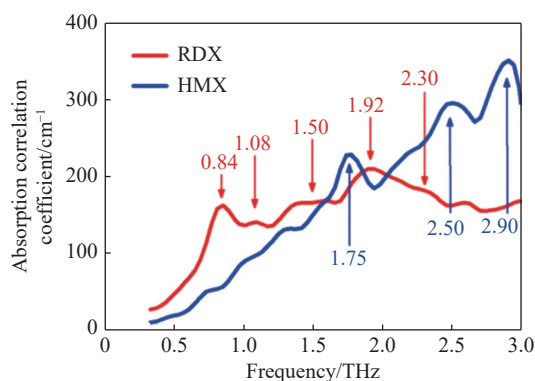


图 3 RDX(红色)和 HMX(蓝色)的吸收系数光谱

Fig.3 Absorption coefficient spectra of RDX (red) and HMX (blue)

1.2.2 太赫兹时域光谱技术在混合及隐匿爆炸物探测方面的应用

爆炸物的隐匿性和成分多样性均增加了探测的难度, 而太赫兹波的“指纹性”使得该技术在爆炸物探测上具有很大优势。PIERNO 等利用 THz-TDS 技术获得了常用普通包装材料隐匿下的 PETN、RDX、TNT 和 Semtex 的太赫兹光谱数据库, 而且记录的太赫兹频谱有足够的信噪比来识别隐藏的爆炸物^[19]。在另一项研究中, 将 TNT、PETN 和 RDX 样品在甲醇中制备成 1 mg/mL 的溶液, 并用 THz-TDS 进行表征。测试结果表明, 每个时间信号在强度和形状上都有明显不同, 这表明所鉴定的化合物具有独特的特征^[20]。CHOI 等^[21] 则采用 THz-TDS 技术检测到含能材料混合物中含有 PETN、RDX 和 TNT 3 种主要成分。SLEIMAN 等通过 THz-TDS 测量了环三亚甲基三胺 (RDX)、季戊四醇四硝酸酯 (PETN) 及其混合物的吸收光谱, 通过对吸收率 THz 图像应用偏最小二乘判别分析, 并将每个像素分类为 RDX、PETN 或 RDX/PETN 混合物, 成功实现了爆炸物的识别和分类^[22-23]。

为了参考鉴定高氮化合物, HUANG 等利用 THz-TDS 在 0.5~2.0 THz 范围内测量了 5-氨基四唑硝酸 (5-ATN)、肼双四唑-(4-甲基-1,5-二氨基四唑) (BMDATHBT)、氧化剂 (SrNO_3 、 KClO_3 、 KClO_4) 和混合物的太赫兹光谱^[24]。不敏感含能材料 2,6-二氨基-3,5-二硝基-吡嗪-1-氧化物 (LLM-105) 在 1.27、1.59、2.00、2.08、2.20、2.29 THz 出现了特征 THz-TDS 吸收峰。DFT 模拟结果与实验结果吻合较好, 除了 2.29 THz 的峰值, 可能是由于晶格振动或其他原因^[25]。他们还发现, 1,1-二氨基-2,2-二乙烯 (FOX-7) 的特征峰位于 1.59 THz 和 2.12 THz。对于 RDX, 有 5 个主要的吸收峰位于 0.82、1.05、1.50、1.92、2.20 THz 附近, 这与 CHOI 的结果非常吻合^[17,26]。PALKA 等将材料与 PE 粉混合压成颗粒, 利用 THz-TDS 系统, 在 0.8~3 THz 范围内测量了 6 种新型含能材料的太赫兹吸收光谱: SAZ (Azotetrazolate pentahydrate)、AAZ (Diammonium azotetrazolate)、GUAZ (Guanidinium azotetrazolate)、TAGAZ (Triamino-guanidinium azotetrazolate)、HNIW (Hexanitrohexa-azaisowurtzitane) 和 TEX (Tetraoxadinitro-isowurtzitane)^[11]。各种材料的太赫兹特征光谱如表 1 所示。其中,

HNIW 的吸收峰 (0.84、1.45、2.28、2.77 THz) 与 GUO 的结果不同^[27], 这是因为 HNIW 的结晶形式不同。

表 1 不同爆炸物的特征太赫兹光谱

Tab.1 Characteristic terahertz spectrum of different explosives

Types of explosives	Characteristic peak position/THz	The range of spectrum/THz	Reference
RDX	0.84, 1.08, 1.50, 1.92, 2.30	0.3-3	[17]
HMX	1.75, 2.50, 2.90	0.3-3	
LLM-105	1.27, 1.59, 2.00, 2.08, 2.20, 2.29		
FOX-7	1.59/2.12	0.2-2.4	[25]
RDX	0.82, 1.05, 1.50, 1.92, 2.20		
SAZ	1.34, 1.81, 2.35, 2.57, 2.75, 2.92		
AAZ	1.76, 2.40, 2.55, 2.71, 2.86		[11]
GUAZ	1.38, 2.01, 2.31, 2.55, 2.84, 2.91	0.8-3	
TAGAZ	1.10, 1.46, 1.67, 2.12, 2.25, 2.38, 2.96		
HNIW	0.84, 1.45, 2.28, 2.77		
TEX	1.71, 2.33, 2.53, 2.91		

太赫兹光谱技术在探测单质及混合爆炸物、探测隐匿爆炸物以及分析爆炸物特征吸收峰等方面的研究对建立爆炸物光谱数据库具有重要意义, 同时, 也推动了太赫兹光谱技术在安检领域的应用。文中所涉及爆炸物的特征太赫兹光谱见表 1, 由于受样品、环境、检测仪器、方法等方式的影响, 同种物质的特征光谱会有所不同。

2 机器学习在太赫兹光谱技术探测爆炸物中的应用

太赫兹光谱技术可以探测爆炸物的特征光谱, 实现对爆炸物的识别和鉴定。然而, 由于许多原因, 如设备的不稳定性和环境条件, 太赫兹光谱的数据质量可能受到影响。例如, 光源的变化和机械系统的震动可能会引起仪器的噪音; 空气中水分子的强吸附效应会导致信号与噪音的比例降低, 从而使虚假或微弱的峰值增加, 使得基于特征峰来区分化合物的方式变得无效。另外, 如果频谱解析能力不高, 即使是具有相似吸收峰中心频率的化学物质也难以被准确定位。所有这些情况都极大地削弱了利用特征峰比对法鉴别物质的能力及可靠性。而机器学习技术具有自适应性、高效、准确的特点, 在一定程度上可以解决这些问题^[5]。

针对单一依靠特征吸收峰辨识方式的不稳定性

难题, 曾子威及其团队采用多项机器学习策略提升太赫兹光谱技术的爆炸物鉴别精确度^[28-29]。首先, 他们提出了一种无需依赖于吸收峰准确性的物质识别路径: 从各种不同的频率分辨率与不同障碍物隐匿条件中提取物质的太赫兹光谱, 并使用 Xception 网络对样本集合进行训练识别。实验证明该方案能够有效地区分各类隐藏式炸药, 且准确率为 94%。这种方法并不受系统解析能力或吸收谱精度的限制, 从而提供了新型的技术途径用于非破坏性探测和确定性识别藏有爆炸物的场所。此外, 由于水分会对太赫兹波产生强吸收效应, 可能引发虚假峰值、微弱峰值、叠加峰值等问题, 这会极大地影响寻找峰值的精度, 因此, 他们收集了湿度分别为 2%、15%、35%、45% 和 60% 的环境下爆炸物的太赫兹吸收光谱信息, 然后运用连续的小波变换把光谱转换频域, 形成具有独特特性的频域尺度图像, 接着借助深度学习方法, 构建由残差卷积神经网络 (ResNet-50) 构成的基本网络框架, 并对以上 5 种湿度条件下获得的爆炸物频域尺度图进行网络分类, 最终得出的测试集分类准确率高达 96.6%, 并将其他相对湿度的爆炸物的时域信号代入系统, 分辨率达到 96.2%, 如表 2 所示。研究结果显示, 基于 ResNet-50 网络和小波变换的太赫兹物质辨识方法在高湿度环境下比传统的寻峰方法有显著提高, 而且该方法无需复杂的预处理操作, 使得太赫兹

光谱探测技术更加适用于工程应用,为爆炸物的准确探测提供了技术支持。胡其枫等^[30]探索两种深度学习算法——循环神经网络 (RNN) 的一维谱线分类网络和基于卷积神经网络 (CNN) 的二维谱图分类网络在光谱识别上的应用。证明两种算法在光谱识别方面表现出色,准确率分别达到 97.5% 和 99.6%,并且准确率和运行速度均优于传统的 K-NN 方法。为克服自然环境下的湿度及其他噪声干扰,对光谱数据进行 S-G 滤波处理后,光谱数据特征更加明显,算法准确率进一步提高。比较 RNN 和 CNN 方法后发现,CNN 方法更能适应不同样本浓度和数据维度的变化,具有更强的鲁棒性。这项研究为太赫兹技术在无损安全检测领域提供了算法支持。为克服目前手动挑选光谱特性和传统机器学习分类技术处理光谱时的限制,虞浩跃等研究出了两种模式,能够自动提取与识别太赫兹光谱^[31]。第一种模式采用双向长短时记忆网络 (Bidirectional Long Short-term Memory Recurrent Neural Network, BLSTM-RNN),它能直接从太赫兹光谱中提取有效的特征,从而实现对复杂太赫兹光谱的数据高效且精准地识别分类,并且成功解决了由于初始太赫兹光谱数据维度过高而导致的模型难于训练的问题。然而,这种模式也面临着参数调整困难及无法根据数据灵活扩展模型复杂度的挑战。另一种模式采用多粒度级联森林 (multi-Grained Cascade Forest, gcForest) 算法模型直接自动提取太赫兹光谱中的有效特性,同时其模型复杂度可随数据量的变化自行调节,这使其能在各种规模的太赫兹光谱数据集中提供高精度的识别能力。研究表明,两种模式均可应用于爆炸物领域的定性鉴别。

表 2 不同方法的识别率对比

Tab.2 Recognition rates comparison of different methods

Relative humidity	Method	
	Traditional peak searching algorithm	Wavelet transform +ResNet-50
2%	95%	99.6%
50%	40%	96.6%
55%	35%	96.6%
67%	-	96.2%

3 结 论

太赫兹光谱技术在爆炸物探测领域具有极大的应用前景,对于爆炸物风险监测和防范具有重要的技术支撑作用,但是在检测过程中受仪器、环境、样品状态等因素影响,会导致特征太赫兹光谱峰识别的准确度下降。随着机器学习算法的不断优化和数据集的逐步扩大,机器学习将会成为未来太赫兹光谱技术探测爆炸物的一个重要手段,但是它也面临一些问题,比如由于光谱数据的获取和处理成本较高,导致数据集通常较小,不能满足机器学习需要大量带标签数据的需求;另外,机器学习模型的解释性较差,不能满足某些需要精确解释的问题的需求。鉴于此,未来机器学习在太赫兹光谱分析方面的应用有以下趋势:一是需要开发更加精细的数据处理技术和更有效的数据增强技术,以解决大数据量的问题;二是机器学习需要与传统的光谱分析相结合,以满足精细解释的问题,比如异常检测等。

参考文献:

- [1] ALLEN E, HENDERSON B. Westminster attack: Everything we know so far about the events in London [EB/OL]. (2017-03-22) [2024-10-10]. <https://www.telegraph.co.uk/news>.
- [2] WHITEHEAD T. Middle class daughter of magistrate who turned to suicide bomb plotter [EB/OL]. (2018-08-14) [2024-10-10]. <https://www.telegraph.co.uk/news>.
- [3] MACKINTOSH E, FOX K. Manchester attack: What we know and don't know [EB/OL]. (2017-05-23) [2024-10-10]. <https://edition.cnn.com/2017/05/23/europe/manchester-arena-what-we-know/index.html>.
- [4] ZHANG W, TANG Y, SHI A R, et al. Recent developments in spectroscopic techniques for the detection of explosives [J]. *Materials*, 2018, 11(8): 1364-1387.
- [5] LIU Qiang, ZHANG Gao, WANG Jiayu, et al. Research progress in the application of spectral analysis technology for explosive and propellant [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2023, 46(12): 1023-1042. (in Chinese)
- [6] LIU Xiaodong. Research on explosive detection technology based on terahertz spectroscopy[D]. Taiyuan: North University of China, 2016. (in Chinese)
- [7] LIU Zhaoguo, ZHOU Huanli, HE Weidi, et al. Development of terahertz detectors with low dimension materials (Invited) [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2021, 50(1): 20211015. (in

- Chinese)
- [8] ALEXANDER S, IVAN Z, ZOI-HELENI M, et al. Detection of explosives by Terahertz synthetic aperture imaging-focusing and spectral classification [J]. *C R Physique*, 2008, 9: 248-261.
 - [9] MEGAN R, LEAHY-HOPPA, MICHAEL J F, et al. Terahertz spectroscopy techniques for explosives detection [J]. *Anal Bioanal Chem*, 2009, 395: 247-257.
 - [10] PAN Yanhui, ZHANG Jifeng, SHEN Zhenyu, et al. THz spectroscopic and Imaging technology in explosives detection [J]. *Forensic Science and Technology*, 2017, 42(6): 491-495.
 - [11] PALKA N, SZALA M, CZERWINSKA E. Characterization of prospective explosive materials using terahertz time-domain spectroscopy [J]. *Applied Optics*, 2016, 55(17): 4575-4583.
 - [12] CAMPBELL MB, E HEILWEIL J. Non-invasive detection of weapons of mass destruction using THz radiation[C]//Conference on Terahertz for Military and Security Applications, 2003, 5070: 38-43.
 - [13] DUAN Junjie. Wideband terahertz spectroscopic detection and analysis of pyrotechnics[D]. Xi'an: Xi'an University of Technology, 2017. (in Chinese)
 - [14] DUAN Yongwei, LIU Quancheng, WANG Minhang, et al. Insights into temperature-induced phase transition mechanism of CL-20 using terahertz spectroscopy [J]. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2024, 307: 123640.
 - [15] HE Xiangyang, ZHANG Qi, WANG Minchang, et al. Terahertz spectral properties of temperature induced phase transition of CL-20 [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2022, 51(12): 20220137. (in Chinese)
 - [16] LIU Quancheng, ZHANG Qi, LI Guilin, et al. Terahertz spectral investigation of temperature induced polymorphic transformation of 2, 2 dinitroethylene-1, 1-diamine [J]. *RSC Adv*, 2021, 11: 6247-6253.
 - [17] CHOI K, HONG T, SIM K I, et al. Reflection terahertz time-domain spectroscopy of RDX and HMX explosives [J]. *J Appl Phys*, 2014, 115: 023105.
 - [18] KOALLA R, MUKHERJEE S, MANGALI S, et al. Experimental and theoretical investigation of Low-Frequency vibrational modes of 4-Amino 3, 5 Dinitro Pyrazole in terahertz frequency domain [J]. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2024, 313: 124092.
 - [19] PIERNO L, FIORELLO A M, SCAFE S, et al. THz-TDS analysis of hidden explosives for homeland security scenarios [C]//Proceedings of the 2013 6th UK, European, China Millimeter Waves and THz Technology Workshop, 2013: 1-2.
 - [20] RAHMAN A. Dendrimer based terahertz time-domain spectroscopy and applications in molecular characterization [J]. *J Mol Struct*, 2011, 1006: 59-65.
 - [21] CHOI J, RYU S Y, KWON W S, et al. Compound explosives detection and component analysis via terahertz time-domain spectroscopy [J]. *Journal of the Optical Society of Korea*, 2013, 17(5): 454-460.
 - [22] SLEIMAN J B, BOUSQUET B, PALKA N, et al. Quantitative analysis of hexahydro-1, 3, 5-trinitro-1, 3, 5, triazine/pentaerythritol tetranitrate (RDX -PETN) mixtures by terahertz time domain spectroscopy [J]. *Appl Spectrosc*, 2015, 69: 1464-1471.
 - [23] SLEIMAN J B, PERRAUD J B, BOUSQUET B, et al. Identifying explosives by chemometrics with terahertz spectral imaging[J]. *SPIE Newsroom*, 2015: 1-2.
 - [24] HUANG Ping, QIU Rui, TANG Yuxiang. Study on terahertz spectroscopic of energetic ion salt and oxidizer [J]. *The Journal of Microwave Power and Electromagnetic Energy*, 2015, 49: 21-28.
 - [25] MENG Zengrui, SHANG Liping, DU Yu, et al. Absorption characteristics and simulation of LLM-105 in the Terahertz range [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2015, 35(7): 1779-1782 (in Chinese)
 - [26] DU Yu, LI Jingming, ZONG Hehou, et al. Absorption spectrum studies on the RDX crystals with different granularity in terahertz frequency range [J]. *J Electron Sci Technol*, 2014, 2(12): 150-155.
 - [27] GUO Lantao, ZHANG Liangliang, WANG Xiaohong, et al. Time-resolved terahertz spectroscopy of explosive materials [J]. *Chinese Optics Letters*, 2005, 3: 117-119.
 - [28] ZENG Ziwei, LI Hongguang, GUO Yufeng, et al. High-accuracy terahertz spectral identification method for concealed dangerous goods [J]. *Chinese Journal of Quantum Electronics*, 2023, 40(3): 340-348. (in Chinese)
 - [29] ZENG Ziwei, JIN Shangzhong, LI Hongguang, et al. Terahertz spectral features detection and accuracy identification of explosives in high humidity environment [J]. *Optics and Precision Engineering*, 2023, 31(7): 1065-1073. (in Chinese)
 - [30] HU Qifeng, CAI Jian. Research of terahertz time-domain spectral identification based on deep learning [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2021, 41(1): 94-99. (in Chinese)
 - [31] YU Haoyue. Research on automatic feature extraction and recognition of terahertz spectroscopy[D]. Kunming: Kunming University of Science and Technology, 2019. (in Chinese)

Application and research progress of terahertz spectroscopy technology in explosive detection

ZHANG Ruiping¹, WANG Qin², BAO Lixia^{3*}

(1. Department of Public Security, Beijing Police College, Beijing 102202, China;

2. Lenovo (Beijing) Co., Ltd., Beijing 100089, China;

3. Analysis and Testing Center, Beijing Institute of Technology, Beijing 102488, China)

Abstract:

Significance Due to its advantages of low energy, high transmission, fingerprint spectroscopy, and safety, terahertz spectroscopy technology can be used to detect and identify single substances, mixtures, and hidden explosives. It is a promising detection technology in the field of security and has broad application prospects. However, owing to various factors including instruments, environment, and samples, the signal-to-noise ratio of terahertz spectral data decreases, making it difficult to obtain effective spectral characteristic peaks, which seriously affects the effectiveness and accuracy of peak finding comparison methods for identifying explosives. In order to improve the accuracy of terahertz spectral data, the application of machine learning technology in terahertz spectral analysis technology for detecting explosives was explored. It was pointed out that machine learning can further improve the accuracy of terahertz spectral technology detection, and develop more refined data processing techniques and more effective data augmentation techniques. Combining machine learning with traditional spectral analysis techniques is an important development direction in the field of terahertz spectral technology for detecting explosives.

Progress Firstly, spectral technology is a commonly used method for substance detection. Based on the different absorption, reflection, and scattering of electromagnetic waves by explosives in different frequency bands, the main detection methods include Raman spectroscopy, terahertz technology, millimeter wave technology, X-ray technology, etc. Among these detection methods, terahertz technology is widely used in explosive detection due to its non invasiveness, high resolution of biological tissues, strong penetration, specific fingerprint spectra, and safety advantages. Next, the principle of terahertz spectroscopy technology and its research in explosive detection are introduced in detail. This article summarizes the research on terahertz spectroscopy technology in detecting single substances and their mixed explosives, detecting hidden explosives, and analyzing the characteristic absorption peaks of explosives. It is of great significance for establishing an explosive spectrum database and also promotes the application of terahertz spectroscopy technology in the field of security inspection. However, due to the influence of factors such as samples, environment, and detection instruments on the detection results, the ability and reliability of using characteristic peak comparison method to identify substances are greatly weakened. Machine learning technology has the characteristics of adaptability, efficiency, and accuracy, which can solve these problems to a certain extent. This emphasizes the important application of machine learning in terahertz spectroscopy technology.

Conclusions and Prospects Terahertz spectroscopy technology has great application prospects in the field of explosive detection, and plays an important technical support role in explosive risk monitoring and prevention. However, during the detection process, factors such as instruments, environment, and sample status can affect the accuracy of identifying characteristic terahertz spectral peaks. With the continuous optimization of machine

learning algorithms and the gradual expansion of datasets, machine learning will become an important means of detecting explosives in future terahertz spectroscopy technology. The future application of machine learning in terahertz spectral analysis has the following trends: Firstly, it is necessary to develop more sophisticated data processing techniques and more effective data augmentation techniques to solve the problem of large amounts of data; Secondly, machine learning needs to be combined with traditional spectral analysis to meet the requirements of fine interpretation, such as anomaly detection.

Key words: public safety; explosive detection; terahertz spectrum; machine learning

Funding projects: The Collaborative Project between Beijing Police College and the Bureau (2023KXJ09)