



## Dobór punktów pomiarowych do identyfikacji materiałów metodą dopasowania widma w paśmie terahercowym

RADOSŁAW RYNIEC, MIECZYŚLAW SZUSTAKOWSKI

Wojskowa Akademia Techniczna, Instytut Optoelektroniki,  
00-908 Warszawa, ul. S. Kaliskiego 2, rryniec@wat.edu.pl, mszustakowski@wat.edu.pl

**Streszczenie.** Wzrastająca w ostatnim czasie liczba zamachów terrorystycznych z ofiarami śmiertelnymi, którymi są przypadkowi świadkowie zdarzenia, wymusza prace badawcze nad coraz skuteczniejszymi metodami i rozwiązaniami technicznymi usprawniającymi procedury wykrywania zagrożeń związanych z zamachami. Zadanie to jest szczególnie pilne, gdyż terroryści coraz częściej na miejsce potencjalnych zamachów wybierają sytuacje i miejsca, gdzie występuje duże skupisko ludzi i jednocześnie utrudnione są możliwości kontroli osób pod kątem wykrycia niebezpieczeństwa. Celem pracy jest zaprezentowanie metody analizy danych, opartej na wnioskowaniu statystycznym, wspomagającej opracowanie i implementację algorytmu identyfikacji materiałów niebezpiecznych metodą dopasowania właściwości spektralnych w paśmie terahercowym.

**Słowa kluczowe:** technologia terahercowa, optoelektroniczne systemy wykrywania, klasyfikacja i identyfikacja, statystyczne metody analizy zbioru danych, metody Monte Carlo

### 1. Wstęp

Od kilku lat terroryzm stał się istotnym zagrożeniem dla współczesnych społeczeństw w czasie pokoju. Zdecydowanie najbardziej rozpowszechnioną formą terroryzmu jest używanie konwencjonalnych materiałów wybuchowych zarówno do produkcji bomb, improwizowanych ładunków wybuchowych zostawianych w paczkach w różnych, najczęściej uczęszczanych przez wiele osób miejscach, podstawianych samochodach pułapkach lub też przez terrorystów samobójców. W codziennym życiu często zmieniamy swoje miejsce przebywania, korzystając przy tym z różnego rodzaju transportu prywatnego lub publicznego. Istotna i niezwykle ważna jest wtedy

pewność, że nie grozi nam niebezpieczeństwo w postaci podłożonych ładunków wybuchowych. Przed wejściem do samolotu, na lotniskach, pasażerowie wraz z bagażem są kontrolowani pod kątem posiadania broni lub innych niebezpiecznych narzędzi. Dodatkowa kontrola osobista umożliwia także wykrycie innych substancji stanowiących zagrożenie. Porty lotnicze są nieustannie wyposażane w coraz nowsze systemy do wykrywania różnego rodzaju substancji chemicznych (narkotyki, materiały wybuchowe). Są to między innymi komory, w których zasysane powietrze wokół człowieka (obiektu) jest analizowane pod kątem jego składu chemicznego. Tego typu rozwiązania są kosztowne i wymagają określonych warunków pracy. Dodatkowo stosunkowo długi czas pomiaru znacznie spowalnia przemieszczanie się ludzi, tworząc kolejki i tłok. Taka sytuacja jest nie do zaakceptowania w miejscach, gdzie w krótkim czasie przemieszcza się duża liczba ludzi. Dotyczy to głównie imprez masowych, jak koncerty czy mecze sportowe lub różnego typu wiece [1]. Oprócz komunikacji lotniczej czy imprez masowych, atrakcyjne z punktu widzenia potencjalnego ataku są środki komunikacji publicznej, takie jak transport kolejowy, autobusowy czy metro. Z tego względu skuteczne przeciwdziałanie zamachom terrorystycznym wymaga zastosowania systemów wykrywania zagrożeń także na stacjach i przystankach kolejowych, przy wejściu na stadiony, do ważnych budynków, takich jak parlament, lub innych budynków rządowych czy elektrowni jądrowych. Z przytoczonych tu przykładów widać, że przygotowując się do przeciwdziałania zamachom terrorystycznym, należy uwzględnić dwa potencjalne rodzaje scenariuszy działań terrorystów: ataki samobójcze oraz podkładanie niebezpiecznych materiałów na terenach otwartych. Należy więc szukać rozwiązań technologicznych do zdalnej detekcji zagrożeń. System taki powinien reagować odpowiednio szybko, aby nie zakłócić i nie utrudnić znacząco swobodnego przemieszczania się ludzi oraz gwarantować niski poziom fałszywych alarmów. W ostatnim czasie gwałtownie rozwijana jest technologia terahercowa charakteryzująca się szeregiem interesujących, z punktu widzenia systemów bezpieczeństwa, cech. Szczególnie istotna jest możliwość wykrywania obiektów ukrytych pod materiałami pokryciowymi, takimi jak papier czy odzież, oraz występowanie unikalnych cech spektralnych związków chemicznych, które mogą służyć do ich identyfikacji. Zastosowanie pasma terahercowego do identyfikacji materiałów wybuchowych zostało przedstawione między innymi w pracach [2, 3].

## **2. Współczesne systemy zdalnego wykrywania materiałów wybuchowych**

Zamachy terrorystyczne, które miały miejsce w USA w roku 2001 oraz w Madrycie i Londynie w 2004 i 2005 roku wywołały nadzwyczajne zainteresowanie organizacji zajmujących się bezpieczeństwem narodowym i międzynarodowym

technikami stosowanymi przez terrorystów i sposobom ich przeciwdziałania. Skupiono się na istniejących rozwiązaniach i metodach detekcji tego typu zagrożeń. Dotyczą one przede wszystkim prześwietlania bagażu osób wchodzących z przestrzeni otwartej do „zamkniętej”. „Zamknięta” przestrzeń w tym wypadku określa rejon o ograniczonym dostępie, typu pokład samolotu czy statku, ale także wagonu pociągu oraz obszar lotniska, portu i peronu kolejowego czy metra. Można tym terminem w ramach niniejszej pracy określić również rejon imprez masowych typu stadion czy hala. Dostępne aktualnie środki zapobiegawcze atakom terrorystycznym nie mogą być jednak skutecznie stosowane w miejscach takich jak stadion. Trudności w opracowaniu efektywnego systemu detekcji przeciwdziałającego zamierzeniom przestępczym dotyczą głównie zmiennych warunków jego pracy. Zmienne warunki tła mogą znacząco zniekształcić sygnał pochodzący od materiału wybuchowego, generując fałszywy alarm. Aktualnie stosowane są dwie metody detekcji materiałów niebezpiecznych, polegające na wykrywaniu cech charakterystycznych tych materiałów na tle zmiennego sygnału otoczenia. Pierwsza z nich (ang. *Bulk detection*) bazuje na obrazowaniu charakterystycznego kształtu materiału wybuchowego, określonych części składowych bomby, np. ostrych części metalowych lub zapalników czy kabli. Stosuje się w tym przypadku promieniowanie rentgenowskie, podczerwieni, mikrofalowe oraz ostatnio zakres terahercowy. Każdy z tych zakresów częstotliwości ma zarówno swoje zalety jak i ograniczenia związane z rozdzielczością i informacją, jakie ze sobą niesie. Druga metoda polega na bezpośredniej analizie oparów uwalnianych z badanej powierzchni (ang. *Trace detection*) i tym samym identyfikowaniu ich składu chemicznego metodą dopasowania. Istotną wadą tej metody jest wykazywanie obecności niebezpiecznego związku chemicznego, nawet jeśli już go nie ma w rejonie obserwacji. Stosowane obecnie technologie w systemach bezpieczeństwa mają ograniczony zasięg działania wynikający głównie z ograniczeń technologicznych źródeł oraz detektorów. Właściwość ta jest szczególnie istotna przy bezkontaktowym wykrywaniu typu *standoff*, w którym urządzenie odbiorcze i przetwarzające wraz z jego obsługą znajduje się odpowiednio daleko od badanego obiektu zagrożonego wybuchem, by móc zareagować, zanim ewentualny ładunek nie zostanie zneutralizowany. Odległość taką trudno zdefiniować, gdyż jest ona zależna od urządzenia wykrywającego oraz ilości materiału wybuchowego. Niektóre źródła podają, że odległość powinna wynosić co najmniej 10 metrów [3]. Niestety, na chwilę obecną, istniejące systemy wykrywania materiałów niebezpiecznych nie spełniają tego wymagania. Można jednak wskazać technologie, które mają potencjał osiągnięcia wymaganej odległości 10 metrów wykrywania.

Obrazowanie jest podstawową techniką wykrywania bezkontaktowego. W przypadku wykrywania materiałów wybuchowych pozwala na rozróżnienie najbardziej charakterystycznych kształtów bomby (regularne paczki, pudełka) lub też jej wypełnienie, jak części metali, zapalniki, kable i inne akcesoria. Kształt oraz

stała dielektryczna pozwalają na rozróżnienie materiałów wybuchowych na tle otoczenia przy zastosowaniu promieniowania rentgenowskiego i mikrofalowego. Różne właściwości odbicia, absorpcyjne czy rozproszenia, w określonych zakresach spektralnych dają podstawę jako dane do analizy obrazów. Promieniowanie rentgenowskie jest wykorzystywane do wykrycia materiałów wybuchowych ukrytych pod ubraniem, w bagażu lub większych paczkach. Nie można jednak ich stosować do prześwietlania ludzi czy innych organizmów żywych ze względu na jonizacyjny charakter promieniowania. Prześwietlanie rentgenowskie wymaga detektora i nadajnika po przeciwnej stronie. W nowszych rozwiązaniach stosowana jest technika rozpraszania, gdy zarówno detektor i odbiornik są po tej samej stronie analizowanego obiektu. Jaśniejszy obraz rozproszony uzyskujemy dla materiałów organicznych, a ciemniejszy dla metali. Systemy rentgenowskie pozwalają uzyskać dobrą rozdzielczość i wystarczające rozróżnienie materiałów organicznych od nieorganicznych z ok. 4 metrów. Wzrost mocy promieniowania zwiększa możliwości systemu, ale znacząco ogranicza zastosowanie do prześwietlania ludzi. Podobną analizę można przeprowadzić dla zobrazowania mikrofalowego, gdzie istotnym ograniczeniem jest rozdzielczość obrazu, oraz podczerwieni, które zobrazowuje jedynie zmiany rozkładu temperatur. Regularne kształty mogą przybierać zarówno niebezpieczne pakunki jak i przedmioty codziennego użytku, jak paczka papierosów, książki itp. Wykrywanie zmian rozkładu temperatury można także zastosować do analizy stanu psycho-biologicznego. Temperatura ciała zdenerwowanej osoby nieznacznie wzrasta. Może to wskazywać potencjalnego przestępcę.

Identyfikacja związków chemicznych bazuje na spektroskopowej analizie składu chemicznego substancji przy zastosowaniu różnych technik. Można tu wyróżnić spektroskopię molekularną jonową, podczerwieni lub rezonans magnetyczny. Znaczącą wadą tego typu systemów identyfikacji materiałów wybuchowych jest ograniczenie stosowania w wolnej przestrzeni. Wynika to z faktu, że większość materiałów wybuchowych w swoim składzie chemicznym posiada azot oraz tlen. Cząsteczki te są zakłócanie zawartością tlenu i azotu w powietrzu. Dodatkowo większość materiałów wybuchowych ma małą prężność par i wymaga urządzenia umożliwiającego zasysanie odpowiedniej ilości powietrza niezbędnej do zidentyfikowania związku chemicznego.

Pewnym uzupełnieniem powyższych metod jest intensywnie rozwijana w ostatnich latach technologia zobrazowania terahercowego oraz spektroskopii terahercowej[4].

Zastosowanie fal terahercowych w systemach bezpieczeństwa do wykrywania substancji niebezpiecznych, w tym materiałów wybuchowych, pozwala na wykrywanie obiektów ukrytych pod materiałami pokryciowymi, takimi jak odzież oraz papier czy tworzywa sztuczne. Materiały te wykazują znaczny stopień przezroczystości w zakresie terahercowym. Przy zastosowaniu do zobrazowania można uzyskać dobrą rozdzielczość. Dodatkowo, unikalne właściwości spektralne substancji mogą posłużyć do

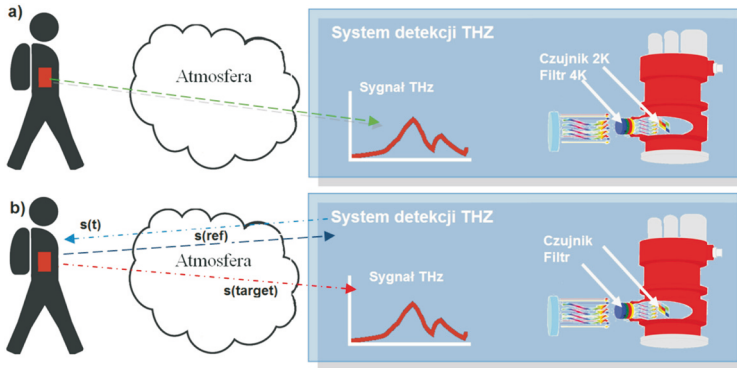
rozdzielania materiałów między sobą. Technologia terahercowa jest nową dziedziną nauki, prędko rozwijającą się od niespełna dwóch dekad. Jednak postępujący rozwój nanotechnologii pozwala sądzić, że w najbliższym czasie uda się opracować system bezpieczeństwa korzystający z właściwości fal terahercowych. W ramach 6. programu ramowego uruchomiony został Europejski Projekt Badawczy TeraEye związany z opracowaniem niskoszumowego, pasywnego terahercowego systemu bezpieczeństwa stosującego jako detektor kropkę kwantową. Instytut Optoelektroniki WAT jest jednym z wykonawców w tym projekcie.

### 3. Idea terahercowego systemu identyfikacji materiałów wybuchowych

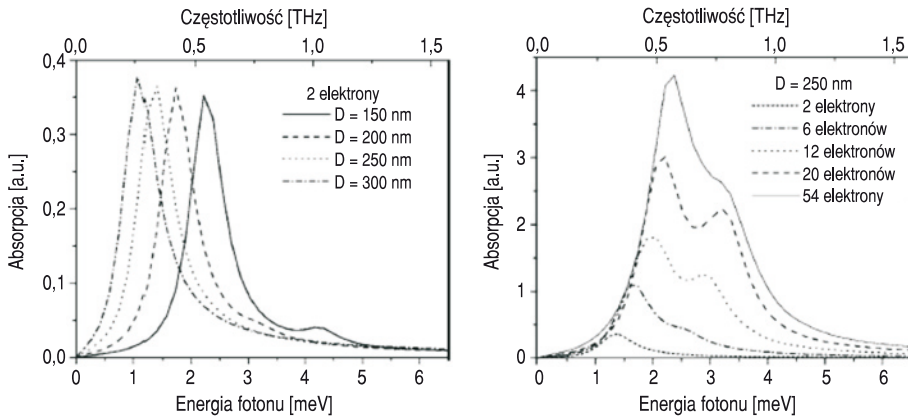
Badania dotyczące zastosowania promieniowania terahercowego związane są z główną mierze z użyciem „unikalnych” właściwości spektralnych związków chemicznych. Korzystając z naturalnego promieniowania cieplnego w paśmie terahercowym, można wykrywać sygnały pochodzące od różnych obiektów i poddawać je analizie. Proces identyfikacji jest zbliżony do znanych i powszechnie stosowanych innych metod identyfikacji spektralnych. Są to wspomniane wcześniej i szeroko opisane w [5] spektroskopia mas, spektroskopia podczerwieni lub spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego protonów. Identyfikacja w powyższych metodach związana jest z porównywaniem badanej, nieznannej próbki substancji chemicznej z wartościami w bazie danych. Taka baza danych zawiera na przykład masy cząsteczkowe, w przypadku identyfikacji metodą spektrometrii mas lub widma, w przypadku interpretacji drgań rozciągających i zginających cząsteczek, w paśmie podczerwieni. W podobny sposób można opracować algorytm rozróżniania widma w zakresie THz. Taki algorytm identyfikacji materiałów wybuchowych polegałby na porównywaniu charakterystycznych pików, wywołanych drganiami rotacyjnymi i oscylacyjnymi, w widmie substancji. System wykrywania substancji niebezpiecznych może pracować zarówno jako system aktywny lub pasywny (rys. 1).

Ze względu na niski poziom energii wypromieniowywanej z powierzchni obiektu w paśmie terahercowym ( $1 \text{ THz} = 4 \text{ meV}$ ) do detekcji w trybie pasywnym wymagane jest zastosowanie czułego detektora schłodzonego do temperatury ok.  $2 \text{ K}$ . W projekcie TeraEye zastosowano detektor działający na zasadzie tranzystora jednoelektronowego o dużej selektywności oraz czułości [6] (rys. 2).

W procesie propagacji fal terahercowych w swobodnej przestrzeni istotne znaczenie ma wpływ tłumienia atmosfery, gdzie dominującą rolę pełni para wodna. Propagujące się fale w atmosferze ulegają znacznemu tłumieniu. Ma to wpływ na kształt widma sygnału. Jest ono silnie zdeformowane, co utrudnia, a w niektórych sytuacjach wręcz uniemożliwia identyfikację. Problem ten można rozwiązać, ograniczając wpływ zmian kształtu widma sygnału propagującego się w atmosferze

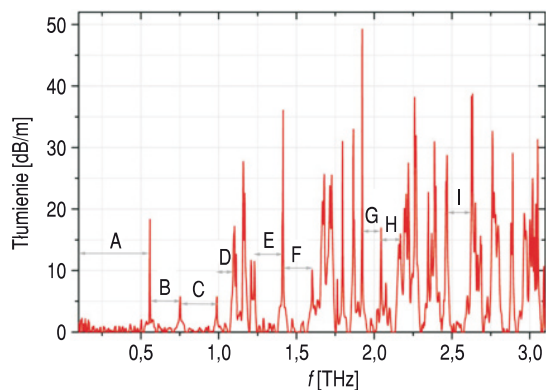


Rys. 1. Koncepcja pasywnego (a) oraz aktywnego (b) systemu identyfikacji materiałów wybuchowych



Rys. 2. Charakterystyka detektora THz [6]

w procesie identyfikacji. Analizując widmo transmisyjności atmosfery, w zakresie terahercowym, widoczne są przedziały o małej tłumienności. Wybierając tylko te przedziały częstotliwości do analizy spektralnej sygnałów, można przypuszczać, że docierający do detektora sygnał terahercowy nie będzie „poszarpany” w wyniku tłumienia atmosfery. Należy jednak dobrać takie przedziały częstotliwości bądź punkty pomiarowe, które umożliwią odtworzenie kształtu widma z ograniczonej ilości punktów pomiarowych oraz pozwolą na rozróżnianie związków chemicznych. Można wykorzystać rozwiązanie zaproponowane w pracy [7]. Autorzy wskazali dziewięć okien częstotliwości o dobrej transmisji atmosfery, sugerując potencjalny rejon funkcjonowania systemów terahercowych (rys. 3). Jednocześnie wykorzystując dostępne technologie (FT-IR — spektrometr fourierowski) zaczęto badać właściwości spektralne materiałów pokryciowych typu odzież, papier, plastik i inne tworzywa sztuczne. Zauważono, że powyżej 2 THz materiały te wykazują gwałtowny wzrost tłumienia promieniowania. Spostrzeżenie to ograniczyło zakres działania



Rys. 3. Tłumienność atmosfery w zakresie 0,1-3 THz oraz dziewięć głównych przedziałów transmisyjnych THz. A: 0,1-0,55 THz, B: 0,56-0,75 THz, C: 0,76-0,98 THz, D: 0,99-1,09 THz, E: 1,21-1,41 THz, F: 1,42-1,59 THz, G: 1,92-2,04 THz, H: 2,05-2,15 THz, I: 2,47-2,62 THz. Warunki pomiaru: temperatura 23°C, wilgotność względna 26% [9]

urządzenia TeraEye do przedziału 0,2-1,3 THz. W przedziale tym zaproponowano rozmieszczenie czternastu wąskopasmowych detektorów (typu Qdot — kropki kwantowe) tworzących liniijkę spektralną. Pojawił się zatem problem, jak rozmieścić detektory w dziedzinie częstotliwości oraz czy czternaście detektorów wystarczy, aby możliwa była identyfikacja wybranych materiałów wybuchowych.

TABELA 1

Wykaz analizowanych materiałów wybuchowych

Materiał wybuchowy	
1	Azotan amonu z opiłkami glinu (AN)
2	Azotan amonu ( $\text{NH}_4\text{NO}_3$ )
3	Emulsja materiałów wybuchowych
4	HMDT
5	HMX (oktogen)
6	PETN (pentryt)
7	RDX (hexogen)
8	Saletrol (azotan amonu zmieszany z olejem napędowym) — ANFO
9	TATP (nadtlenek acetonu)
10	TNT (trotyl)
11	Kwas pikrynowy

W Instytucie Optoelektroniki w Wojskowej Akademii Technicznej przy współpracy Wydziału Nowych Technologii i Chemii WAT oraz Instytutu Technologii Materiałów Elektronicznych (ITME) zbadano grupę kilkudziesięciu materiałów w paśmie 0,2-3 THz. Były to zarówno substancje codziennego użytku (np. cukier, mąka, kawa),



materiały pokryciowe (akryl, papier, bawełna itd.) oraz wybrane materiały wybuchowe. Szczegóły dotyczące pomiarów zostały umieszczone w pracy [8].

Zbadane zostały najbardziej charakterystyczne i najczęściej stosowane przez grupy przestępcze materiały wybuchowe (tab. 1).

#### 4. Metoda badawcza

Tłumienie atmosfery szczególnie w przedziale częstotliwości 0,1-1,3 THz osiąga miejscami nawet do 30 dB/m. Charakter zmian transmisyjności jest jednak nieregularny. Nasuwa się zatem pytanie, czy możliwa jest identyfikacja materiałów w oparciu o właściwości spektralne związków chemicznych przy zastosowaniu ograniczonej ilości danych pomiarowych. Jeśli tak, to które punkty umożliwią odtworzenie kształtu widma z jakością niezbędną do identyfikacji metodą dopasowywania i jednocześnie pozwolą na rozróżnianie materiałów. W tym wypadku równomierne rozmieszczenie wąskopasmowych detektorów nie ma zastosowania ze względu na występujące nieregularne okna o dobrej transmisji atmosfery. Aby rozwiązać problem optymalnego rozmieszczenia linijki detektorów, można posłużyć się metodą iteracyjną. Należy przeanalizować rozmieszczenie zbioru kilkunastu detektorów względem siebie, aby uzyskać ich optymalne rozmieszczenie pod kątem identyfikacji. Metoda iteracyjna wymaga rozpatrzenia bardzo dużej ilości rozwiązań. Alternatywną metodą wyznaczania optymalnego rozwiązania jest zastosowanie metod statystycznych przy użyciu losowo dobranych punktów pomiarowych. Ponieważ generacja liczb losowych przez komputery wymaga dołączenia zewnętrznego układu fizycznego wykazującego właściwości szumowe, w miejsce liczb losowych stosowane są liczby pseudolosowe, od których wymagane jest spełnianie odpowiednich wymagań co do rozkładu. Do rozwiązania powyższego problemu, gdzie rozmieszczenie poszczególnych punktów pomiarowych jest jednakowo prawdopodobne, najbardziej użyteczny jest generator dający jednostajny rozkład liczb losowych z przedziału [0-1]. W najprostszym generatorze liczb losowych o rozkładzie jednostajnym wykorzystuje się tzw. liniowy algorytm kongruentny. Kolejne liczby losowe  $x_{n+1}$  otrzymuje się z równania:

$$x_{n+1} = (ax_n + b) \cdot \text{mod } c, \quad (1)$$

gdzie liczby  $a$ ,  $b$ ,  $c$  nazywa się liczbami „magicznymi” [9, 10]. Aby generator liczb losowych był uruchamiany w inny sposób za każdym wywołaniem, należy zastosować metodę systematycznego pozyskiwania wartości początkowej, może to być na przykład zegar systemowy. Statystyczny dobór optymalnego rozmieszczenia detektorów, rozumiany jako określenie częstotliwości środkowych wąskopasmowych detektorów umożliwiających odtworzenie kształtu widma z ograniczonej ilości punktów, stanowił generator liczb pseudolosowych o rozkładzie jednostajnym



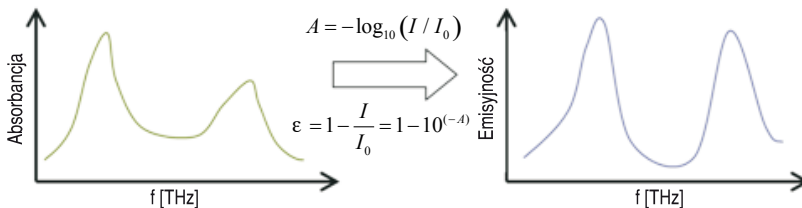
z przedziału [0,2-1,3] THz z rozdzielczością 0,001 THz. Projekt TeraEye, dla którego przeprowadzono analizę, zakłada zastosowanie liniiki detektorów składającej się z 14 elementów oddalonych od siebie co najmniej o 0,01 THz. W związku z tym pseudolosowy zbiór czternastu liczb reprezentujących częstotliwości określany będzie zdarzeniem elementarnym  $d = \{d_1, d_2, \dots, d_{14}\}$ , gdzie  $d_{m \in \langle 1, 14 \rangle}$  stanowi liczbę z przedziału [0, 2-1, 3] THz. Do poszukiwania optymalnego rozwiązania identyfikacji wygenerowano niezależny zbiór 5000-, 10000-, 20000- i 50000-elementowy, określany mianem przestrzeni zdarzeń elementarnych  $D$ .

Sygnały widma wybranych materiałów wybuchowych zostały wstępnie przygotowane do analizy w następujący sposób:

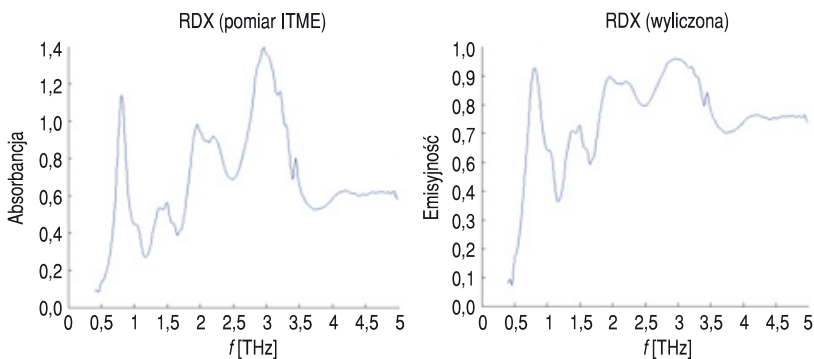
1. Żeby ograniczyć wpływ grubości próbki (ilości substancji chemicznej) na kształt widma, charakterystyki spektralne poszczególnych materiałów  $X$  zostały znormalizowane przy pomocy zależności:

$$Y_N = \frac{X - \min(X)}{\max(X) - \min(X)}. \quad (2)$$

2. Ze względu na to, że analiza dotyczy pasywnego trybu pracy systemu w systemie pasywnym, zmierzone wartości absorpcji zostały przeliczone na emisyjność, przy założeniu niewystępowania zjawisk dodatkowych typu odbicia czy rozproszenia [8] (rys. 4). Jest to najprostsz model i pierwsze



Rys. 4. Wyznaczanie emisyjności z danych pomiarowych w trybie transmisyjnym



Rys. 5. Efekt konwersji danych pomiarowych

przybliżenie promieniowania własnego materiałów wybuchowych. Efekt takiego przekształcenia przedstawiono na rysunku 5.

3. Dane pomiarowe uzyskane przy pomocy spektroskopu fourierowskiego Bruker 113 mają rozdzielczość 7,2 GHz. W punktach pomiarowych interpolowana jest wartość tłumienności atmosfery wygenerowanej przy użyciu bazy danych Hitran, z rozdzielczością 1  $\mu\text{m}$  dla standardowych warunków: temperatura 22°C, ciśnienie 1 atmosfera i wilgotność 50% na dystansie 2 m. Do interpolowania zastosowano metodę funkcji sklejaných.
4. Widmo interpolowanej transmisji atmosfery standardowej jest wymnażane z widmami analizowanych materiałów  $Y_N$  (2).

$$Y'_{i \in \langle 1, 14 \rangle} = Y_N(i) \cdot \text{atmosfera}, \quad (3)$$

Operacja ta ma na celu określenie wpływu atmosfery na propagację sygnału terahercowego (splot sygnałów). Pomijana jest informacja dotycząca przesunięcia fazy. Na rysunku 6 przedstawiono efekt splotu (linia czerwona) oraz sygnał zmierzony w próżni (kolor czarny) na tle atmosfery (kolor niebieski).

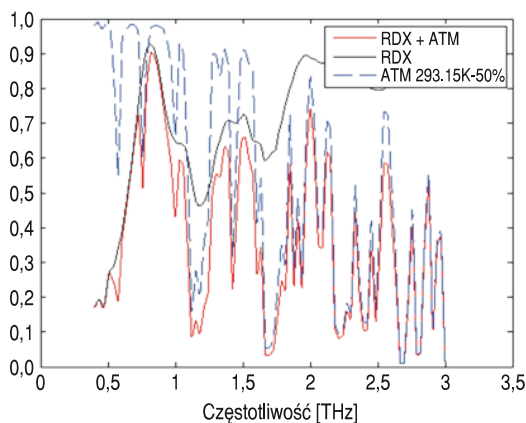
5. Dla każdego zbioru zdarzeń elementarnych  $d$ , w punktach  $\{d_1, d_2, \dots, d_{14}\}$ , interpolowana jest wartość widma zmierzonego w próżni  $Y_N$  (znormalizowana) oraz widma splecionego z atmosferą  $Y'$ . Jako miarę dopasowania zastosowano sumę kwadratów różnicy SSD oraz SAD (suma różnicy wartości bezwzględnych):

$$SSD = \sum_{i=1}^n (Y_{Ni} - Y'_i)^2, \quad (4)$$

$$SAD = \sum_{i=1}^n |Y_{Ni} - Y'_i|. \quad (5)$$

Miara dopasowania SSD i SAD jest wyliczana dla  $n = 368$  punktów obejmujących zakres 0,2-1,3 THz. Interpolowane w punktach  $d$  wartości  $Y'$  są następnie normalizowane według zależności (2). Dla znormalizowanych wartości  $Y'$  oraz  $Y_N$  odtwarzany jest kształt widma sygnału przy wykorzystaniu metody liniowej interpolacji 2D. W tabeli 2 przedstawiono wartości miar dla każdego materiału dla każdej przestrzeni zdarzeń elementarnych  $D$ . Widać, że ze wzrostem wymiaru przestrzeni  $D$ , możemy uzyskać wyniki bliskie „idealnym” — optymalne. Dalsze zwiększanie liczebności przestrzeni zdarzeń elementarnych  $D$ , w niewielki sposób może zmienić wyniki analizy. Zatem do dalszej analizy wybrana została przestrzeń  $D$  o wymiarze 50000.

W tabeli 2 przedstawiono minimalne wartości miar SAD i SSD dla poszczególnych związków chemicznych. Minimalne wartości tych miar występują dla różnych zbiorów  $d$ , częstotliwości pomiarowych. Aby znaleźć taki zbiór  $d$ , dla którego można



Rys. 6. Wpływ atmosfery na kształt charakterystyki widmowej

otrzymać jak najmniejsze wartości SSD jednocześnie dla wszystkich jedenastu materiałów wybuchowych, należy zastosować znaną z nauk ekonomicznych metodę — analizę składowych głównych (ang. *Principal Component Analysis*). Metoda ta pozwala na redukcję wymiarów zmiennych losowych bez utraty informacji o danych. W tym zadaniu zmienną losową jedenastowymiarową  $X = \{X_1, X_2, \dots, X_{11}\}$  jest macierz miar SSD dla 50000 losowań zbioru czternastu częstotliwości.

Metoda analizy składowych głównych przebiega wieloetapowo. W pierwszym etapie należy poddać zmienne losowe  $X$  standaryzacji, tak aby ich średnia wynosiła zero. Standaryzacja realizowana jest przy pomocy formuły:

$$X_n^* = X_n - \bar{X}_n, \quad (6)$$

gdzie  $X^*$  oznacza nową zmienną losową,  $\bar{X}$  wartość średnią zmiennej losowej  $X_n$ , a  $n = \{1, 2, \dots, 11\}$  określa kolejny materiał wybuchowy.

TABELA 2

Miary dopasowania dla różnej liczności przestrzeni prób

	5000		10000		20000		50000	
	SAD	SSD	SAD	SSD	SAD	SSD	SAD	SSD
AN	14,65	1,03	11,3413	0,6133	9,194	0,4357	9,6292	0,42998
Azotan amonu	15,56	1,25	10,6346	0,5376	9,8976	0,3948	9,713	0,64355
Emulsja MW	20,64	1,98	16,2386	1,0818	14,777	0,9080	14,44	0,97666
HMDT	16,28	1,19	15,5992	1,1266	14,59	0,9956	15,317	0,97835
HMX	17,61	1,33	5,7535	0,1461	5,7122	0,1876	5,204	0,13489
PETN	14,87	1,17	10,5734	0,5446	6,427	0,2118	8,9028	0,34042

cd. tabeli 1

RDX	16,34	1,31	9,8162	0,5653	9,2385	0,5261	8,338	0,47803
Saletrol	13,43	0,98	10,6511	0,616	8,400	0,37827	8,6787	0,46049
TATP	53,54	11,89	26,6168	4,5479	29,323	5,3435	26,28	4,3829
TNT	22,30	2,21	9,9391	0,5018	9,426	0,4198	8,344	0,27416
Kwas pikrynowy	21,74	2,35	15,5838	1,2631	17,971	1,5425	13,33	0,78973

Dla nowego zbioru danych  $X^*$  wyznaczana jest macierz kowariancji o wymiarze  $11 \times 11$  zgodnie z zależnością (7), która określa ilość różnych wartości w macierzy. Otrzymana macierz kwadratowa jest zatem symetryczna.

$$\text{size} = \frac{n!}{(n-2)}, \quad (7)$$

Elementy macierzy kowariancji wyznaczane są według zależności:

$$\text{cov}(X_i^*, X_j^*) = \frac{\sum_{k=1}^n (X_{ik} - \bar{X}_i) \cdot (X_{jk} - \bar{X}_j)}{(n-1)}, n = 14, \quad (8)$$

gdzie  $X_{i,j \in \langle 1,14 \rangle}^*$  to zmienna losowa reprezentująca poszczególne materiały wybuchowe. Warto zwrócić uwagę, że w mianowniku całkowita liczba zmiennych została zmniejszona o 1. Wynika to z faktu, że przestrzeń próby jest traktowana jako niepełna populacja. To znaczy, że zmienne losowe nie wypełniają wszystkich możliwych rozwiązań, lecz jego część. Macierz kowariancji wypełniana jest zgodnie z równaniem (9), a następnie wyliczane są jej wartości własne oraz wektor własny.

$$C = \begin{bmatrix} \text{cov}(x_1, x_1) & \text{cov}(x_1, x_2) & \cdots & \text{cov}(x_1, x_n) \\ \text{cov}(x_2, x_1) & \text{cov}(x_2, x_2) & \cdots & \text{cov}(x_2, x_n) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \text{cov}(x_n, x_1) & \text{cov}(x_n, x_2) & \cdots & \text{cov}(x_n, x_n) \end{bmatrix}, \quad n = 11. \quad (9)$$

Wektor własny oraz wartości własne stanowią bardzo użyteczne narzędzia przy zastosowaniu numerycznych metod, zwłaszcza analizy zbieżności w metodach rozwiązywania systemów algebraicznych równań. Wektor własny macierzy umożliwia wykrycie zależności między zmiennymi, odnajduje wzorce istniejące pomiędzy zmiennymi, a tym samym macierz zmiennych (kowariancji o wymiarze  $n$ ) można zamienić na ciąg kombinacji liniowych, zmniejszając tym samym jej wymiar. Przed przystąpieniem do zastosowania procedury analizy czynnikowej

należy jednak sprawdzić, czy wykorzystywane w badaniach zmienne pozostają w pewnych określonych relacjach. Jeśli korelacje między zmiennymi są niewielkie, jest mało prawdopodobne, że zmienne te utworzą silne i łatwe w interpretacji czynniki wspólne. Można to ocenić poprzez selekcję zmiennych, wykorzystując wskaźnik Kaisera Meyera Olkina (KMO) [11]:

$$KMO = \frac{\sum_j \sum_{h \neq j} r_{jh}^2}{\sum_j \sum_{h \neq j} r_{jh}^2 + \sum_j \sum_{h \neq j} \hat{r}_{jh}^2}, \quad (10)$$

gdzie  $r_{jh}$  to współczynnik korelacji między  $j$  i  $h$  zmienną, a  $\hat{r}_{jh}$  współczynnik korelacji cząstkowej między nimi. Dla analizowanej przestrzeni losowej  $D$  o wymiarze próbki 50000 współczynnik KMO wynosi 0,89436, czyli jest dość wysoki, co świadczy o dużej korelacji zmiennych. Wykorzystując pakiet R [11], wyznaczone zostały współczynniki określające korelacje między zmiennymi (tab. 3). Głównym problemem w analizie czynnikowej jest określenie liczby czynników wspólnych, które wystarczająco wyjaśniają korelację między obserwowanymi zmiennymi. Z obliczeń wynika, że tylko jedna wartość własna jest większa od 1 (kolumna Eigenvalue), co oznacza, że jeden czynnik wyjaśnia ponad 80% wariacji wszystkich zmiennych (kolumna Cumu). Dwa czynniki wyjaśniają już ponad 87%, a trzy 93% wariacji zmiennych. Wybierając jeden wektor własny wyjaśniający ponad 80% zmiennych, szukamy rozwiązania zadania poprzez wyznaczenie z macierzy  $11 \times 50000$  nowego wektora  $1 \times 50000$ .

TABELA 3  
Analiza składowych głównych

	Eigenvalues	Cumu
1	8,838830189	0,8035300
2	0,750606491	0,8717670
3	0,588496415	0,9252666
4	0,423756620	0,9637900
5	0,216125989	0,9834378
6	0,076076131	0,9903538
7	0,041370712	0,9941148
8	0,029415707	0,9967889
9	0,022762862	0,9988583
10	0,010854507	0,9998451
11	0,001704377	1,0000000

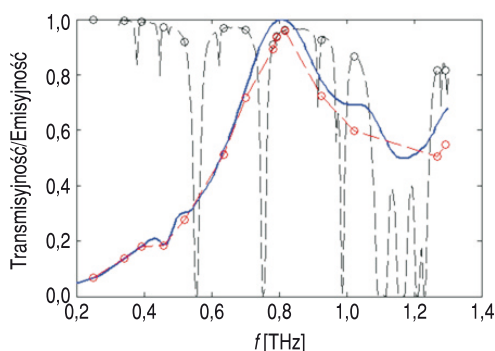
Wyznaczając minimum tej funkcji (wektora), wskazujemy losowanie, zbiór częstotliwości pomiarowych  $d_{OPT}$ , który pozwala otrzymać najlepsze dopasowanie odtworzonego kształtu widma według kryterium SSD jednocześnie dla jedenastu analizowanych materiałów (tab. 4).

TABELA 4

Optymalne rozmieszczenie wąskopasmowych detektorów

Lp.	1	2	3	4	5	6	7
[THz]	0,2511	0,34256	0,3934	0,4578	0,5196	0,6366	0,7009
Lp.	8	9	10	11	12	13	14
[THz]	0,7825	0,7933	0,8166	0,9249	1,0240	1,2683	1,2932

Rozmieszczenie detektorów według powyższego rozwiązania przedstawiono na rysunku 7. Niebieskim kolorem zaznaczono kształt widma emisyjności wyznaczonego na podstawie pomiarów w próżni. Czarna przerywana linia to transmisyjność standardowej atmosfery z wyróżnionymi wyznaczonymi punktami pomiarowymi. Widać, że te punkty znajdują się w oknach dobrej transmisji atmosfery. Czerwone punkty to interpolowane wartości  $Y'$  w punktach  $d_{OPT}$ . Można zauważyć, że zgodnie z oczekiwaniem odtworzony kształt widma emisyjności (czerwona linia) jest bardzo zbliżony do sygnału odniesienia. W tabeli 5 przedstawiono wartość miary dopasowania odtworzonego kształtu widma wyliczonego z równania (4) z ograniczonej ilości punktów pomiarowych (linijka detektorów 14-elementowa). Widać, że dla każdego z jedenastu materiałów uzyskano wartości zbliżone do minimalnego.



Rys. 7. Rekonstrukcja kształtu widma materiału wybuchowego RDX

Proces identyfikacji opierający się na porównywaniu charakterystyk spektralnych polega w głównej mierze na dopasowywaniu nieznanymi charakterystyk do tych, które znajdują się w bazie danych odniesienia (referencyjnych). W przedstawionym procesie ważne jest także wyselekcjonowanie tych cech materiałów, które

w sposób jak najbardziej jednoznaczny pozwolą na ich rozróżnianie. Podobnie jak poprzednio, analiza wyszukiwania unikalnych cech badanych związków chemicznych została przeprowadzona przy założeniu wykorzystania jedynie czternastu punktów pomiarowych. Do analizy wykorzystano te same znormalizowane widma sygnałów oraz przestrzeń prób o wymiarze próbki 50000.

TABELA 5  
Dopasowanie dla optymalnego rozmieszczenia linijki detektorów w porównaniu z możliwymi rozwiązaniami

SSD				
wartość	minimalna	maksymalna	średnia	Optymalne
1	0,4300	116,3884	29,6802	0,8649
2	0,6436	133,4748	42,7993	1,1927
3	0,9767	125,1295	41,5903	1,3863
4	0,9784	116,8431	40,0319	1,6167
5	0,1349	90,1964	26,5872	0,2555
6	0,3404	104,3602	35,1164	0,5960
7	0,4780	93,3755	17,6883	1,4820
8	0,4605	126,7365	40,5875	0,7900
9	4,3829	89,1084	39,7590	8,2413
10	0,2742	100,2461	14,7800	0,6219
11	0,7897	122,8192	41,0845	1,3605

Analiza numeryczna poszukiwania punktów o największej rozróżnialności wybranych materiałów polega na przygotowaniu dla każdego zbioru czternastu losowych punktów pomiarowych macierzy o wymiarze  $11 \times 11$ . Elementami tej macierzy są wartości *disc* wyliczone według zależności:

$$\text{disc} = \sum_{j=1}^{11} \sum_{i=1}^{11} \sum_{m=1}^n (Y_{Nj,i,m} - Y'_{j,i,m})^2, \quad (11)$$

gdzie  $m = \{1, 2, \dots, 14\}$  — ilość punktów do porównywania,  $i, j$  — materiały analizowane,  $i, j = \{1, 2, \dots, 11\}$ . Utworzonych zostaje zatem 50000 macierzy do analizy. Szukając największych różnic między materiałami w tak stworzonej macierzy, suma wszystkich elementów powinna być jak największa. By uwypuklić tę cechę, poszukiwane jest zdarzenie elementarne, dla którego suma odwrotności  $\text{disc}_k$  wszystkich elementów będzie jak najmniejsza.

$$\min \left( \frac{1}{\text{disc}_k} \right). \quad (12)$$



Ze względu na to, że macierz jest symetryczna, analizowana jest połowa odwrotności sumy. Zadanie powyższe rozwiązać można także, wykorzystując metody analizy składowych głównych, zgodnie ze schematem przedstawionym wcześniej. Dla każdego zdarzenia elementarnego  $d$  wyznaczany jest wektor jedenastoelementowy, którego elementem jest wartość korelacji między sygnałami wyznaczana z zależności:

$$\text{disc}_k = \sum_{j=1}^{11} \sum_{i=1}^{11} (Y_{Nk,i} - Y'_{j,i})^2, \quad (13)$$

gdzie  $j, k$  określają materiał analizowany  $j, k = \{1, 2, \dots, 11\}$ , a  $i$  — punkty pomiarowe  $i = 14$ .

Przy pomocy analizy składowych głównych, poszukiwane jest takie zdarzenie losowe  $d$ , dla którego dla każdego materiału wybuchowego odwrotność  $\text{disc}_k$  jest możliwie najmniejsza. Oznacza to, że wyznaczony zostanie taki zbiór częstotliwości, dla którego materiały maksymalnie różnią się między sobą. Wyznaczony zbiór przedstawiony jest w tabeli 6.

TABELA 6

Rozmieszczenie linijki detektorów umożliwiających dyskryminację materiałów wybuchowych

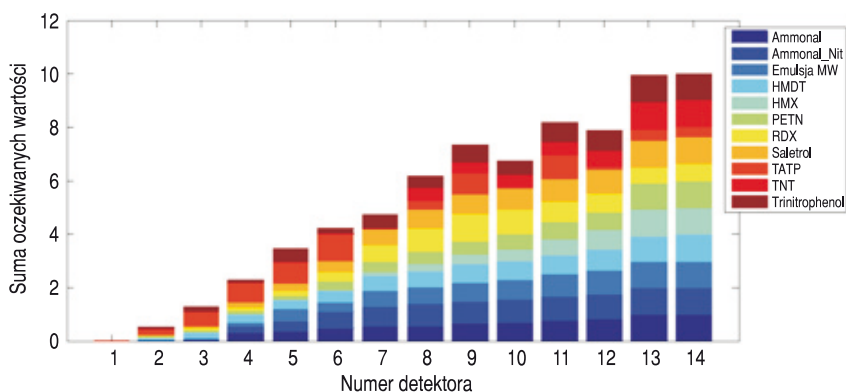
Lp.	1	2	3	4	5	6	7
[THz]	0,34461	0,37382	0,40892	0,42227	0,43342	0,51455	0,59358
Lp.	8	9	10	11	12	13	14
[THz]	0,63579	0,69684	0,96629	0,99458	1,1452	1,1819	1,2503

Aby rozwiązanie mogło jednocześnie spełniać warunek możliwości odtworzenia kształtu widma i rozróżnialności, należy oba wektory rozwiązań porównać ze sobą, szukając wspólnego minimum. Ostatecznie wyznaczono zbiór optymalnego rozmieszczenia częstotliwości pomiarowych (tab. 7). Dla wskazanych wartości częstotliwości pomiarowych zbioru  $d$  wyznaczono wartości emisyjności (metodą interpolacji 2D) poszczególnych materiałów wybuchowych. Na rysunku 8 przedstawiono ilościowy wkład wartości spodziewanej energii (znormalizowanej). Wartości te stanowią sygnały odniesienia do porównywania w procesie identyfikacji metodą dopasowywania.

TABELA 7

Optymalne rozmieszczenie detektorów do identyfikacji

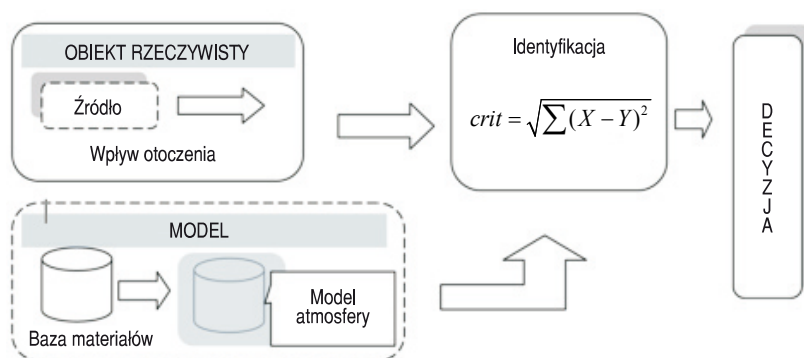
Lp.	1	2	3	4	5	6	7
[THz]	0,26662	0,3132	0,38366	0,45714	0,49305	0,57979	0,67164
Lp.	8	9	10	11	12	13	14
[THz]	0,74026	0,79776	0,86139	0,93394	1,027	1,2743	1,2921



Rys. 8. Znormalizowane wartości emisyjności poszczególnych materiałów wybuchowych

## 5. Weryfikacja modelu identyfikacji

Identyfikacja związków chemicznych metodą dopasowywania polega na porównywaniu mierzonych cech nieznanego materiału z cechami znanych materiałów umieszczonych w bazie danych. Weryfikacja modelu identyfikacji opracowanego w poprzednim punkcie polega na zniekształceniu widma materiału wybuchowego zmierzonego w próżni z widmem transmisyjności atmosfery. Do testu zastosowano sygnały referencyjne zniekształcone różnymi profilami atmosfery (różne wartości wilgotności 35-100% i droga propagacji 1,5 i 10 metrów), wygenerowanymi przy pomocy programu Hitran. Następnie poszukiwana jest w bazie danych substancja chemiczna o najbardziej zbliżonej charakterystyce spektralnej. Algorytm identyfikacji przedstawiono na rysunku 9. Do wyznaczenia stopnia podobieństwa dwóch substancji zastosowano tę samą miarę SSD (4), która wcześniej była użyta do wskazania optymalnego rozmieszczenia linijki spektralnej detektorów. W tabeli 8



Rys. 9. Weryfikacja modelu identyfikacji materiałów wybuchowych

zebrano wyniki identyfikacji, stosując powyższą metodę. W kolumnach umieszczono materiał wybuchowy, którego widmo emisyjności zostało zniekształcone wpływem atmosfery standardowej (splot), natomiast w wierszu materiały wybuchowe (odniesienia). Numery kolumn i wierszy odpowiadają materiałom chemicznym zgodnie z tabelą 1. Widać, że dla każdego z jedenastu materiałów wybuchowych udało się jednoznacznie zidentyfikować właściwy związek.

TABELA 8

Symulacja identyfikacji materiałów wybuchowych

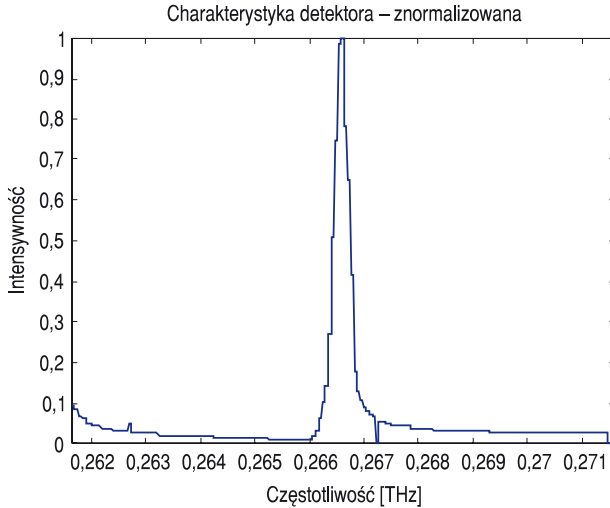
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	0,0391	0,2213	0,1208	0,1599	0,9204	0,3352	0,7297	0,1292	3,7539	0,9755	0,3511
2	0,2174	0,0693	0,2375	0,3823	1,6817	0,8149	0,7606	0,1800	4,5203	1,7290	0,8040
3	0,0836	0,2064	0,0493	0,1926	0,8906	0,3388	0,6765	0,0913	4,1276	0,9462	0,2941
4	0,0994	0,2884	0,1791	0,0850	0,8744	0,2865	0,6412	0,1669	3,4772	0,9031	0,2670
5	0,9971	1,7293	1,0174	0,8942	0,0084	0,2242	1,5061	1,0312	4,4329	0,0369	0,5106
6	0,3751	0,8184	0,4246	0,3421	0,2566	0,0303	0,8897	0,4175	3,8861	0,2808	0,2287
7	0,6953	0,5966	0,6485	0,6854	1,6911	0,9693	0,0782	0,5564	4,1113	1,5620	1,0400
8	0,1001	0,1356	0,0992	0,1910	0,9769	0,3727	0,6067	0,0478	4,3307	1,0275	0,4307
9	3,1918	3,8528	3,5983	3,1439	3,9261	3,3618	3,2556	3,7331	0,3439	3,8015	3,0512
10	1,0903	1,8042	1,1174	0,9892	0,1024	0,3098	1,4014	1,1162	4,4737	0,0139	0,6351
11	0,2764	0,6560	0,2554	0,1888	0,5482	0,1840	0,9002	0,3623	3,3231	0,6105	0,0338

Aby jak najbardziej odtworzyć warunki pomiaru, wartość widma sygnału zniekształconego wpływem atmosfery jest całkowana przebiegiem charakterystyki detektora zastosowanego w modelowym systemie identyfikacji (rys. 10).

Identyfikacja substancji chemicznych, rozumiana jako poszukiwanie najmniejszej różnicy między dwiema substancjami: nieznaną  $X_U$  oraz odniesienia w bazie danych  $X_{DB}$ , może być realizowana także innymi algorytmami. W niniejszej pracy zastosowano dodatkowo cztery miary [12]: najbardziej popularną odległość euklidesową (14), odległość euklidesową ważoną (15), odległość Manhattan ważoną (16) oraz cosinus kąta pomiędzy nieznanymi wektorami (widmami) (17).

$$Euklideoan = \sqrt{\sum_{i=1}^{14} (X_{U,i} - X_{DB,i})^2}, \quad (14)$$

$$EMS = \left( 1 + \frac{\sum_{i=1}^{14} (X_{U,i} - X_{DB,i})^2}{\sum_{i=1}^{14} X_{DB,i}^2} \right)^{-1}, \quad (15)$$



Rys. 10. Znormalizowana charakterystyka detektora [15]

$$AVD = \left( 1 + \frac{\sum_{i=1}^{14} |X_{U,i} - X_{DB,i}|}{\sum_{i=1}^{14} X_{DB,i}} \right)^{-1}, \quad (16)$$

$$Dot = \frac{\left( \sum_{i=1}^{14} X_{U,i} \cdot X_{DB,i} \right)^2}{\sum_{i=1}^{14} X_{U,i}^2 \cdot \sum_{i=1}^{14} X_{DB,i}^2}, \quad (17)$$

$$Euklidian^{-1} = \frac{1}{\sqrt{\sum_{i=1}^{14} (X_{U,i} - X_{DB,i})^2}}. \quad (18)$$

W tabeli 9 zebrano miary podobieństwa wyrażone równaniami 14-18 dla atmosfery o następujących parametrach: temperatura 22°C, wilgotność 35%, ciśnienie 1 atm. oraz odległość 1 metr. Podobnie jak przy zastosowaniu miary SSD, dla każdego z jedenastu materiałów udało się jednoznacznie zidentyfikować substancję. Dodatkowo wskazano, jaki związek chemiczny (znajdujący się w bazie danych) ma najbardziej zbliżoną charakterystykę spektralną do nieznanego (1/2 oznacza, że został zidentyfikowany AN, a jako drugi azotan amonu — tab. 1) i jaka jest różnica miar między dwoma najlepszymi dopasowaniami. Na tej podstawie można również stwierdzić, jaka miara jest „najsilniejsza”. Dla miar EMS, Dot oraz

odwrotności odległości euklidesowej (18) różnica  $\Delta MF = MF_1 - MF_2$  jest największa.  $MF_1$  określa miarę dopasowania dla najbardziej zbliżonej substancji, a  $MF_2$  drugi najbardziej zbliżony materiał. Podobne symulacje przeprowadzono dla innych wartości wilgotności w przedziale 35-100% dla 1 m oraz 5 m. Za każdym razem identyfikacja zakończyła się sukcesem. Metoda ta umożliwiła także identyfikację na podstawie charakterystyk spektralnych materiałów zebranych z literatury pomimo występujących różnic w kształcie widma w stosunku do materiałów referencyjnych. Różnice te mogą wynikać z różnych warunków pomiarów (niepodawanych przez autorów). Możliwość ich rozróżnienia świadczy o właściwych założeniach do analizy wyznaczania częstotliwości pomiarowych.

TABELA 9

Wykaz rozróżnionych materiałów

	Euklidean		EMS		AVD		Dot		Euklidean <sup>-1</sup>	
	hit	$\Delta$	hit	$\Delta$	hit	$\Delta$	hit	$\Delta$	hit	$\Delta$
1	1/3	0,0916	1/3	0,2204	1/3	0,0856	1/3	0,3596	1/3	0,3979
2	2/8	0,1050	2/8	0,1753	2/8	0,0390	2/8	0,3248	2/8	0,235
3	3/8	0,0929	3/8	0,2459	3/8	0,0979	3/8	0,4106	3/8	0,4188
4	4/1	0,1085	4/1	0,2316	4/1	0,0710	4/1	0,3712	4/1	0,4414
5	5/10	0,2282	5/10	0,1931	5/10	0,1440	5/10	0,4153	5/10	0,2643
6	6/11	0,2548	6/11	0,2509	6/11	0,2109	6/11	0,4503	6/11	0,4703
7	7/8	0,4993	7/8	0,1693	7/8	0,0319	7/2	0,2660	7/8	0,2606
8	8/3	0,0835	8/3	0,2552	8/2	0,0954	8/3	0,4300	8/3	0,4289
9	9/11	1,2365	9/11	0,0026	9/2	0,0022	9/4	0,0065	9/11	0,0024
10	10/5	0,0743	10/5	0,1806	10/5	0,1361	10/5	0,433	10/5	0,2476
11	11/6	0,2942	11/6	0,2168	11/4	0,1442	11/3	0,3712	11/6	0,4081

## 6. Podsumowanie

Zastosowanie statystycznej metody analizy danych umożliwiło wyznaczenie optymalnego rozmieszczenia detektorów o wąskiej charakterystyce spektralnej tworzących linijkę pomiarową właściwości spektralnych w paśmie terahercowym. Zagadnienie to jest niezwykle istotne z punktu widzenia identyfikacji substancji ukrytych pod różnego rodzaju materiałami pokryciowymi. Analiza wpływu materiałów pokryciowych świadomie została pominięta ze względu na fakt występowania w przybliżeniu liniowej charakterystyki tłumienia promieniowania. Zagadnienia tego nie należy jednak pomijać i będzie ono rozpatrywane w dalszej części badań, które będą dotyczyły weryfikacji modelu identyfikacji przy użyciu spektrometru TDS przy różnych parametrach atmosfery. Dotychczasowa analiza dotyczyła badań

w trybie transmisyjnym. Kolejnym etapem będzie zbadanie wyznaczonych częstotliwości pomiarowych do identyfikacji materiałów wybuchowych w odbiciowym reżimie pracy zgodnie z ideą przedstawioną na rysunku 11.



Rys. 11. Idea systemu wykrywania zagrożeń [14]

W tym trybie pracy, jako „oświetlacze” sceny, można zastosować lasery kaskadowe, których zakres pracy w ostatnim czasie zaczął zbliżać się dużymi krokami do zakresu terahercowego. Takie źródła terahercowe w połączeniu z detektorami szerokopasmowymi (np. bolometrami) pozwalają na identyfikację materiałów wybuchowych w analogiczny sposób jak selektywny detektor (kropka kwantowa) i szerokopasmowe źródło (promieniowanie naturalne).

Artykuł wpłynął do redakcji 16.11.2010 r. Zweryfikowaną wersję po recenzji otrzymano w kwietniu 2011 r.

#### LITERATURA

- [1] A. PETTERSSON, S. WALLIN, *Explosive detection a technology inventory FOI*, Weapons and protection.
- [2] C. BAKER, T. LO, W.R. TRIBE, B.E. COLE, M.R. HOGBIN, M.C. KEMP, *Detection of Concealed Explosives at a Distance Using Terahertz Technology*, Proceedings of the IEEE, 95, 8, August 2007.
- [3] *Existing and potential Standoff explosives detection techniques*, Committee on the Review of Existing and Potential Standoff Explosives Detection Techniques, National Research Council, 2004.
- [4] E. GROSSMAN et al., *Passive terahertz camera for standoff security screening*, Applied Optics, 49, 19, 1 July 2010.
- [5] R.M. SILVERSTEIN, F.X. WEBSTER, D.J. KIEMLE, *Spektroskopowe metody identyfikacji związków chemicznych*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2008.
- [6] I. VURGAFTMAN, J.R. MEYER, D.H. WU, K. BUSSMANN, B.T. JONKER, *Spectral simulation of GaAs and InAs quantum-dot terahertz detectors designed for higher-temperature operation*, Journal of Applied Physics, 100, 2006.

- [7] HAI-BO LIU, HUAZHONG, N. KARPOWICZ, *Terahertz Spectroscopy and Imaging for Defense and Security Applications*, Proceedings of the IEEE, 95, 8, August 2007.
- [8] N. PAŁKA, M. SZUSTAKOWSKI, W. CIURAPIŃSKI, R. RYNIEC, P. ZAGRAJEK, S. CUDZIŁO, M. MOŹDŻONEK, *Pomiary spektralne materiałów wybuchowych w pasmie terahercowym*, Elektronika, 1, 2010.
- [9] K. PARK, W. MILLER, *Random number generators: Good ones are hard to find*, Communications of the ACM, 12, 10, October 1988.
- [10] Z. KOTULSKI, *Generatory liczb losowych: algorytmy, testowanie, zastosowanie*, Warszawa, 2001.
- [11] M. WALESIAK, E. GATNAR, *Statystyczna analiza danych z wykorzystaniem programu R*.
- [12] S.E. STEIN, D.R. SCOTT, *Optimization and Testing of Mass Spectral Library Search Algorithms for Compound Identification*, American Society for Mass Spectrometry, 1994, 5, 1994, 859-866.
- [13] *Passive multiarray sensor*, Royal Holloway University of London, opracowanie wewnętrzne dla projektu TeraEye.
- [14] M. SHEPARD, *Explosives — Vehicle Borne IEDs and Suicide Bombers*, S&T Stakeholders Conference, May 21-24, 2007.
- [15] *Passive multiarray sensor*, Royal Holloway University of London, opracowanie wewnętrzne.
- [16] HAI-BO LIU, Y. CHEN, X.-C. ZHANG, *Detection and identification of explosive RDX by THz diffuse reflection spectroscopy*, OPTICS EXPRESS, 9 January 2006, 14, 1, 416-423.
- [17] A. GILES DAVIES, *Terahertz spectroscopy of explosives and drugs*, Materials Today, 11, 3, March 2008.

R. RYNIEC, M. SZUSTAKOWSKI

### **Identification of explosives by matching method in statistical well-chosen measuring points in THz range**

**Abstract.** The increasing interest in the development of identification methods of explosives in THz region over the past few years has been observed because of potential terrorist threats. To determine specific spectra properties of materials, both possible spectroscopic methods — Time Domain Spectroscopy (TDS) and Fourier Transform-Infrared Spectroscopy (FT-IR) are used to analyze different classes of compounds. Results of a single compound separated from the mixture of other natural products have already been published [16, 17]. This paper deals with an identification problem of more than one compound. This task was solved mathematically by means of the following methods: Monte Carlo including principal components analysis (PCA) methods and analytic methods. Investigations were limited to a detector, which is based on a single-frequency Quantum Dot matrix in 0.2-1.3 THz range. The mathematical analysis also includes the atmosphere influence on propagation of THz waves. By means of the presented methods, we indicated fourteen optimal frequency points and next we managed to identify one explosive from a set of ten explosives.

**Keywords:** THz technology, identification systems, Monte Carlo methods