文章编号: 1001-3806(2020)03-0333-05

牛顿插值多项式-导数光谱无损检测车用保险杠

何欣龙,王继芬*

(中国人民公安大学 刑事科学技术学院,北京 102623)

摘要:为了提高检验鉴定效率、降低检验鉴定成本,实现对案件现场车用保险杠碎片的快速无损检测,采用了基于红外指纹光谱结合牛顿插值多项式、光谱求导和判别分析的车用保险杠鉴别方法。采集并获取奥迪等6种品牌共计40个不同型号的车用保险杠样本的红外光谱,选择牛顿多项式插值、光谱求导等方法建立了判别模型。结果表明,基于指纹区波段建立的判别模型总体准确率(80.0%)高于全波段模型(77.5%),指纹区光谱结合4次牛顿插值多项式处理后的判别准确率可到85%,经1阶导数处理后判别准确率可达100%,以判别函数DF₁和DF₂作为判别轴构建判别分类模型,6种品牌的样本均实现了100%的准确区分;红外指纹光谱结合4次牛顿插值多项式、1阶导数和判别分析可实现车用保险杠品牌快速、无损鉴别,且模型检测精度高。该方法具有普适性和一定的借鉴意义。

关键词:光谱学;车用保险杠;判别模型;种类鉴别

中图分类号: 0433.4 文献标志码: A

doi:10.7510/jgjs. issn. 1001-3806. 2020. 03. 011

The identification about the automotive bumper based on Newton interpolation polynomial-infrared derivative spectroscopy

HE Xinlong, WANG Jifen

(Institute of Forensic Science and Technology, People's Public Security University of China, Beijing 102623, China)

Abstract: In order to improve the efficiency of identification, reduce the cost of detection, and realize the rapid and non-destructive classification of the automotive bumper fragments, a rapid and accurate identification method about the automotive bumper was proposed based on infrared fingerprint spectroscopy, Newton interpolation polynomial, spectral derivation, and discriminant analysis. Infrared spectra of six kinds of brands of bumper samples including 40 different versions were acquired in this paper, and a discriminant model was established by taking Newton polynomial interpolation, spectral derivation, and other methods into account. The results show that the overall accuracy rate of the discriminant model based on the fingerprint zone (80.0%) is higher than that of the full-band model (77.5%). The accuracy rate of the discriminant based on fingerprint spectroscopy combined with 4th Newton interpolation polynomial processing can reach 85%. Selecting DF_1 and DF_2 as the discriminant axis to construct the discriminant classification model, the accuracy rate of the discriminant can be promoted to 100%. In summary, combining infrared fingerprint spectroscopy, 4th Newton interpolation polynomial, first derivative and discriminant analysis, the new method has higher accuracy in detecting the automotive bumper, and provides a new idea and reference for the identification of other physical evidence in the forensic science.

Key words: spectroscopy; the automotive bumper; discriminant model; identification

引言

车用保险杠的检测是司法鉴定研究中一项重要的 工作。在交通肇事逃逸等相关案件中,常常会在受害

基金项目:中国人民公安大学 2019 年拔尖人才培养专项 资助项目(2019ssky003)

作者简介:何欣龙(1994-),男,硕士研究生,现主要从事 刑事技术方面的研究。

* 通讯联系人。E-mail:wangjifen58@126.com 收稿日期:2019-07-18;收到修改稿日期:2019-11-03 人衣物、被撞车辆和肇事现场路面上发现并提取到车用保险杠碎片。通过对其进行检验研究,执法人员可以确定碎片的品牌等相关信息,进而追溯其来源,从而锁定(排除)嫌疑人和车辆,为事故责任认定提供线索和有力证据。

目前,针对车用保险杠的检验研究主要集中于其 材料性能和加工工艺方面^[13]。DAVOODI等人^[4]对 客车保险杠梁中环氧复合材料的力学性能展开了研 究,结果表明,除冲击强度较低外,材料在拉伸强度、杨 氏模量、弯曲强度和弯曲模量等性能方面均优于常用 的玻璃片热塑材料,这为混合天然纤维在车辆部件中 尤其是保险杠材料选择方面提供了一定的借鉴。 AGUNSOYE 等人[5]借助扫描电子显微镜、机械测试和 热重分析方法研究了碳化椰壳纳米粒子增强环氧复合 材料的结构和力学性能,从而为使用该复合材料作为 汽车保险杠的应用新材料提供了可能性。在司法鉴定 中,与保险杠检验鉴别相关的研究报道少之又少[6-7], 利用快速检测技术提高检验鉴定效率、降低检验鉴定 成本,建立可靠的车用保险杠样本快速、准确检验方 法,是一线执法人员和鉴定人员关注的重点之一。红 外光谱作为一种常用的快速检测技术,在激光技术研究 领域有着十分广泛的应用^[8-12]。OUYANG 等人^[13]借助 红外光谱技术建立了醇类汽油的分析模型,实现了对样 品 100% 的定性判别。LIU 等人[14] 采用近红外光谱结 合偏最小二乘法建立了西红柿成熟度的无损检测模型, 实验结果较为理想,这对西红柿的快速、批量分选具有 一定的实际意义。将红外光谱分析技术用于保险杠物 证的检验鉴别具有重要的实践意义和参考价值。

本文中通过牛顿插值多项式、导数滤波等方法对 车用保险杠的红外光谱数据进行预处理,使用判别分 析建立车用保险杠品牌的鉴别模型,对6种车用保险 杠样本进行识别,为快速、无损和准确的鉴别肇事现场 车用保险杠碎片提供一定的借鉴。

1 实 验

1.1 样本与仪器

实验样本:从市场上收集的6种品牌共计40个不同型号的车用保险杠样本。表1中列举了6种样本的基本信息。

Table 1 The details of 6 kinds of samples

number	brand	sample
1	Audi	Audi-1, Audi-2, Audi-3, Audi-4, Audi-5, Audi-6, Audi-7
2	Honda	Honda-1, Honda-2, Honda-3, Honda-4, Honda-5, Honda-6
3	Buick	Buick-1, Buick-2, Buick-3, Buick-4, Buick-5, Bucik-6
4	Ford	Ford-1, Ford-2, Ford-3, Ford-4, Ford-5, Ford-6, Ford-7, Ford-8, Ford-9
5	Nissan	Nissan-1, Nissan-2, Nissan-3, Nissan-4, Nissan-5, Nissan-6, Nissan-7
6	Changan	Changan-1, Changan-2, Changan-3, Changan-4, Changan-5

仪器及参量设置:红外光谱仪(Nicolet 5700, Ther-

mo Fisher Scientific 公司), 氘化三甘氨酸硫酸酯探测器(DTGS, Thermo Fisher Scientific 公司), KBr 分東器 (Thermo Fisher Scientific 公司) [6], OPUS 光谱数据处理软件(德国 Bruker 公司) [7]。扫描次数为 32 次 [15],分辨率为 4cm^{-1} ,光谱采集范围为 4000cm^{-1} ~ 400cm^{-1} 。每个样本采集 4 次光谱曲线,取平均值作为实验数据,实验温度为 $(29 \pm 3) \, ^{\circ}$ 、相对湿度为 57%。

1.2 光谱预处理

在红外光谱测量的过程中,往往由于仪器自身原 因、光源条件、实验温度等影响,存在基线漂移、高频噪 音等现象。提取有效光谱信息,建立稳健、准确的鉴别 模型是应用领域所关切的问题之一。常用的预处理方 法有光谱求导和基线校准:光谱求导是一种有效的预 处理方法,其能从重叠的吸收光谱中分离出各自的吸 收峰,消除或降低背景吸收的干扰,提高光谱的分辨 率、信噪比和检测灵敏度[16],但求导阶数的增加也会 使得导数运算中高频噪声不断放大,使得信噪比降低: 基线校准分自动校准和手动校准,相比较前者,后者依 赖主观经验,操作费时费力,实用性低,无法满足一线 执法人员和鉴定人员快速检测的需求。自动基线校准 主要有小波变换重构、插值和中值滤波等方法,其操作 简单,实用性较高。此外,其它校准方法还有基于背景 估计[17]、基于形态学算子[18-19]和频率域分析[20]等。 常用的插值方法有拉格朗日插值多项式和牛顿插值多 项式。相比较前者,后者计算简单快速,具有继承性和 易变化节点的优势,即增加节点时计算只增加一项,这 在缩短实际的运算时间方面占据很大优势。牛顿插值 多项式基本原理为如下。

假设有函数 f(x), x_0 , x_1 , x_2 , x_3 , ..., x_k 是一系列互不相等的点, 1 阶差商定义为:

$$f(x_0, x_1) = \frac{f(x_0) - f(x_1)}{x_0 - x_1}$$
 (1)

可求得 f(x) 为:

$$f(x) = f(x_0) + f(x, x_0)(x - x_0)$$
 (2) 同理, k 阶差商定义为:

$$f(x_0, x_1, x_2, x_3, \dots, x_k) = \frac{f(x_0, x_1, x_2, \dots, x_{k-1}) - f(x_1, x_2, \dots, x_k)}{x_0 - x_1}$$
(3)

可求得 $f(x_0, x_1, x_2, \dots, x_{k-1})$ 为:

$$f(x_0, x_1, x_2, \dots, x_{k-1}) = f(x_0, x_1, x_2, \dots, x_k) + f(x, x_0, x_2, \dots, x_k) (x - x_k)$$
(4)

则牛顿差值多项式为:

$$F_n(x) = f(x_0) + f(x_0, x_1)(x - x_0) + \dots + f(x_0, x_1, \dots, x_n)(x - x_{n-1}) \dots (x - x_0)$$
 (5)
插值余项为:

$$F_m(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i) f(x, x_0, x_1, \dots, x_n)$$
 (6)

实验中采用基线校准和光谱求导两种预处理方法,考察并比较红外全波段光谱、指纹光谱、牛顿多项式插值(1次项~6次项)、1阶导数、2阶导数和3阶导数等方法对分类模型的预测效果,进而选出最优预处理方法,开展对样本的识别工作。

1.3 建模方法及原理

Bayes 判别是一种较为有效的分类方法,其先通过计算样本的先验概率,即根据先期样本聚类结果计算出样本特征的各种概率密度函数,然后按照贝叶斯公式计算出后验概率,根据后验概率进行判别分析,从而实现最小错误率意义上的优化。

其基本思想为:设 $x = \{a_1, a_2, \dots, a_m\}$ 为一个待分类项,每个a为x的一个特征属性,则有类别集合:

 $C = \{y_1, y_2, \dots, y_n\}$, 计算 $P(y_1 | x), P(y_2 | x), \dots$, $P(y_n | x), \text{如果}: P(y_k | x) = \max \{P(y_1 | x), P(y_2 | x), \dots, P(y_n | x)\}, \text{则 } x \in y_k \circ$

2 结果及分析

各样本的红外光谱全波段和指纹区波段分类模型的预测结果见表 2。由表 2 可知,基于指纹区波段建立的判别模型总体准确率(80.0%)高于全波段模型(77.5%)。分析认为,车用保险杠是混合物,不同品牌的样品会存在一定差异,这些差异会在其光谱信息中呈现出来,且主要集中反映在指纹区。测量过程中由于基线漂移等现象,全波段光谱中的冗余和噪声信息远远多于指纹区,这不仅会加大分类模型的计算复杂度,更会严重影响到其预测精度,因此削弱冗余和噪声区间的影响尤为重要。指纹区由于冗余和噪声信息较少,其分类模型的精度相对较高。基于此,实验中选择红外光谱指纹区波段开展基线校准工作,以此提高模型的判别精度。

Table 2 Predicted results under full and fingerprint spectra

			1 (0)				
type	Audi	Changan	Ford	Nissan	Buick	Honda	total accuracy/%
full band spectrum	57.1	40.0	100.0	85.7	66.7	83.3	77.5
fingerprint spectrum	85.7	40.0	100.0	85.7	66.7	83.3	80.0

表 3 为借助牛顿差值多项式进行基线校准,得到 的不同插值次数处理后各品牌样本的预测结果。图1 为不同插值次数处理后的总体判别准确率。由表3可 知,在不同插值次数处理后,日产和福特品牌样本的分 类准确率均较高,长安品牌样本的分类准确率均低于 其它品牌样本分类结果,奥迪品牌样本在0次、1次、4 次和5次插值处理后的分类准确率最高(85.7%),别 克样本在 5 次插值处理后的分类准确率最高 (100%),本田品牌样本在2次、4次和6次插值处理 后的分类准确率最高(83.3%)。结合图 1.4 次牛顿 插值多项式处理后的判别准确率最高(85%),3次牛 顿插值多项式处理后的判别准确率最低(62.5%),5 次和6次插值处理后的总体判别准确率逐渐下降,这 是因为插值次数升高会使其结果越偏离原函数,出现 龙格现象,即插值节点个数增加会使得两个插值节点 之间的插值函数并无法很好地逼近被插值函数,加上 高次插值计算量大,会产生严重的误差积累,从而使得 分类模型的精度和稳定性降低。综上所述,选择4次 牛顿插值多项式进行基线校准,开展对样本进一步的 识别工作。

Table 3 Predicted results after different polynomial order

interpolation	accuracy/%								
times	Audi	Changan	Nissan	Buick	Honda	Ford			
0	85.7	40.0	100.0	85.7	66.7	83.3			
1	85.7	60.0	100.0	83.3	66.7	88.9			
2	71.4	60.0	85.7	66.7	83.4	88.9			
3	42.9	20.0	85.7	66.7	66.7	77.8			
4	85.7	60.0	85.7	83.4	83.4	100.0			
5	85.7	60.0	85.7	100.0	66.7	88.9			
6	57.1	60.0	100.0	50.0	83.3	88.9			

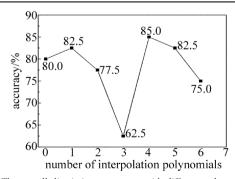


Fig. 1 The overall discriminant accuracy with different polynomial order 表 4 为在经过 4 次牛顿插值多项式处理后,各品牌样本在不同阶求导下的分类准确率情况。由表 4 可

Table 4 Predicted results after different deriva
--

	accuracy/%						1 /0/
type	Audi	Changan	Ford	Nissan	Buick	Honda	total accuracy/%
original spectrum	85.7	100.0	83.3	83.3	85.7	60.0	85.0
the 1st derivative spectrum	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0
the 2nd derivative spectrum	100.0	100.0	100.0	85.7	100.0	100.0	97.5
the 3rd derivative spectrum	100.0	80.0	88.9	100.0	100.0	100.0	95.0

知,1 阶导数处理后分类准确率最高(100%),2 阶导数(97.5%)和3 阶导数(95.0%)对识别准确率的提高没有1 阶导数效果明显,经求导后奥迪、别克和本田品牌的样本均实现了100%的准确区分,相比较1 阶和2 阶求导,长安和福特品牌的样本经3 阶求导后分类准确率反而降低,分析认为随着求导阶数的增加,光谱中的噪声信息也会不断放大,从而使得分类准确率降低。基于此,选择1 阶导数处理开展对样本品牌光谱信息的判别工作,得到了判别函数摘要(见表5)。

Table 5 The details of discriminant function

function	total	correlation	function test	Wilks' Lambda	Sig
DF_1	187.098	0.997	1 to 5	0.000	0.000
DF_2	83.153	0.994	2 to 5	0.000	0.001
DF_3	12.735	0.963	3 to 5	0.007	0.373
DF_4	4.683	0.908	4 to 5	0.096	0.913
DF_5	0.835	0.675	5	0.545	0.998

表 5 中相关性表明了不同分组与各个函数之间的关联性。相关性越强,则组别在此维度上的差异越大。Wilks'Lambda 是组内平方和与总平方和之比,其值越小,说明某个量对于模型的影响越显著。显著性(significance,Sig)是对数据差异性的评价,一般取值需小于 0.05,当其小于等于 0.001 时,表明数据具有高度统计学意义^[21]。由表 5 可知,判别模型中构建了5 个判别函数,前 2 个函数的 Wilks'Lambda 均为 0,表明前 2 个函数对模型的影响十分显著,Sig 值分别为 0和 0.001,表明判别函数(discrimination function, DF) DF₁ 和 DF₂ 对模型影响的显著性十分高,能很好解释各样本的分类情况。综上所述,选择函数 DF₁ 和 DF₂ 作为判别函数,构建判别分类模型,得到了 6 种品牌样本的空间分布图(见表 5)。

图 2 为 6 种品牌样本的判别空间分布图。由图可知,6 种品牌的样本均实现了 100% 的准确区分,其中,Buick 和 Audi 品牌样本在 DF_1 判别轴上区分明显,Honda 和 Audi 品牌样本在 DF_2 判别轴上区分明显,Nissan 和 Changan 品牌样本在 DF_1 判别轴上实现了区分,Changan 与 Ford 品牌样本在 DF_2 判别轴上实现了区分,由于 DF_1 判别轴单位长度为 5,故而使得 Nissan

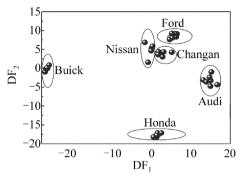


Fig. 2 The discriminant spatial distribution of each sample 和 Changan 品牌样本之间的区分不是十分明显。DF₁判别函数为 $Z_1=-3$. $247X_1+24$. $887X_2-6$. $496X_3-19$. $919X_4+22$. $019X_5-9$. $167X_6+6$. $406X_7+\cdots+4$. $284X_{28}-9$. $55X_{29}+5$. $326X_{30}+1$. $187X_{31}+4$. $044X_{32}+0$. $068X_{33}$, DF₂ 判别函数为 $Z_2=-4$. $051X_1-10$. $771X_2-0$. $491X_3+4$. $132X_4-5$. $425X_5+8$. $273X_6+1$. $942X_7+\cdots+6$. $657X_{27}-1$. $947X_{28}+2$. $797X_{29}-3$. $637X_{30}-4$. $78X_{31}+7$. $378X_{32}+0$. $277X_{33}$ 。 如果想区分未知变量,只需要在判别函数中输入其相应值,在分布图中会显示出其位置,就能区别新数据属于哪一类别。

3 结 论

借助红外指纹光谱及其 4 次牛顿插值多项式、1 阶导数与判别分析对车用保险杠进行了识别与分类,不仅实现了量少、快速和无损检验的目的,而且借助数学模型展开光谱模式识别,实现了对其更为合理和有效地鉴别。4 次牛顿插值多项式处理后的判别准确率最高(85%),3 次牛顿插值多项式处理后的判别准确率最低(62.5%),5 次和 6 次插值处理后的总体判别准确率逐渐下降,是因为插值次数升高会使其结果越偏离原函数,出现龙格现象使得分类模型的精度和稳定性降低。原始光谱、1 阶导数、2 阶导数和 3 阶导数判别模型结合 Bayes 判别分类准确率分别为 85%,100%和 97.5%和 95.0%,分析认为随着求导阶数的增加,光谱中的噪声信息也会不断放大,从而使得分类准确率降低。选择判别函数 DF₁和 DF₂作为判别轴

构建各样本判别空间分布模型,6种品牌的样本均实现了100%的准确区分,实验结果理想,表明红外指纹光谱结合4次牛顿插值多项式-1阶导数-判别分析可有效实现对奥迪等6种品牌车用保险杠的准确区分,该方法为其它物证的分类识别提供了一种新的思路和参考。

参考文献

- [1] MARTYNA A, MICHALSKA A, ZADORA G. Interpretation of FTIR spectra of polymers and Raman spectra of car paints by means of likelihood ratio approach supported by wavelet transform for reducing data dimensionality[J]. Analytical and Bioanalytical Chemistry, 2015, 407(12):3357-3376.
- [2] GRUNERT T, STEPHAN R, EHLINGSCHULZ M, et al. Fourier transform infrared spectroscopy enables rapid differentiation of fresh and frozen/thawed chicken [J]. Food Control, 2016, 60; 361-364.
- [3] BUITRAGO M F, SKIDMORE A K, GROEN T A, et al. Connecting infrared spectra with plant traits to identify species[J]. ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing, 2018, 139: 183-200.
- [4] DAVOODI M M, SAPUAN S M, AHMAD D, et al. Mechanical properties of hybrid kenaf/glass reinforced epoxy composite for passenger car bumper beam[J]. Materials & Design, 2010, 31(10): 4927-4932.
- [5] AGUNSOYE J O, ODUMOSU A K, DADA O, et al. Novel epoxy-carbonized coconut shell nanoparticles composites for car bumper application [J]. The International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 2019, 102; 893-899.
- [6] HE X L, WAN J F, L Q Sh, et al. Infrared spectral identification of vehicle bumper based on multilayer perceptron-fisher discriminant analysis[J]. China Test, 2019, 45(5):74-78 (in Chinese).
- [7] HE X L, MA Y, WANG J F, et al. Qualitative and quantitative rapid detection of mid-infrared spectroscopy for vehicle bumpers [J]. Engineering Plastics Application, 2019, 47 (5): 122-126 (in Chinese).
- [8] KITAZATO K, MILLIKEN R E, IWATA T, et al. The surface composition of asteroid 162173 ryugu from hayabusa2 near-infrared spectroscopy [J]. Science, 2019, 364 (6437):272-275.
- [9] de BRUYNE S, SPEECKAERT R, BOELENS J, et al. Infrared spectroscopy as a novel tool to diagnose onychomycosis[J]. British Journal of Dermatology, 2019, 180(3): 637-646.
- [10] HE X L, WANG J F, ZHANG Q, et al. Infrared spectral analysis of

- marker ink based on multi-classification model [J]. Chemistry, 2019, 82(2):169-174(in Chinese).
- [11] MANFREDI M, ROBOTTI E, QUASSO F, et al. Fast classification of hazelnut cultivars through portable infrared spectroscopy and chemometrics [J]. Spectrochimica Acta Part; Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2018, A189: 427-435.
- [12] CRAIG A P, BOTELHO B G, OLIVEIRA L S, et al. Mid infrared spectroscopy and chemometrics as tools for the classification of roasted coffees by cup quality [J]. Food Chemistry, 2018, 245: 1052-1061.
- [13] OUYANG Y P, CHENG L, WU H Ch, et al. Study on general model of qualitative and quantitative analysis of alcohol gasoline [J]. Laser Technology, 2019, 43(3):363-368 (in Chinese).
- [14] LIU Y D, XU H, SUN X D, et al. Non-destructive detection of tomate materity by near-infrared diffuse transmission spectroscopy [J]. Laser Technology, 2019, 43(1);25-29 (in Chinese).
- [15] HE X L, WANG J F, LIU T F, et al. Fourier infrared spectroscopy combined with chemometrics method to distinguish and identify plastic steel windows[J]. Physical and Chemical Testing (Chemistry), 2018, 54(11):1318-1323 (in Chinese).
- [16] SONG S Y, LEE Y K, KIM I, et al. Sugar and acid content of citrus prediction modeling using FT-IR fingerprinting in combination with multivariate statistical analysis [J]. Food Chemistry, 2016, 190: 1027-1032.
- [17] HONG T, HAN D, KIM D H, et al. Simultaneous estimation of PD, T_1 , T_2 , T_2^* , and ΔB_0 using magnetic resonance fingerprinting with background gradient compensation [J]. Magnetic Resonance in Medicine, 2019, 81(4); 2614-2623.
- [18] DING H, WANG X, WANG Y, et al. Ensemble classification of hyperspectral images by integrating spectral and texture features [J]. Journal of the Indian Society of Remote Sensing, 2019, 47 (1): 113-123.
- [19] CHEN H, XU W, BRODERICK N G, et al. An adaptive and fully automated baseline correction method for raman spectroscopy based on morphological operations and mollification [J]. Applied Spectroscopy, 2019, 73(3): 284-293.
- [20] AHMED M, AZAM M. Causal nexus between energy consumption and economic growth for high, middle and low income countries using frequency domain analysis[J]. Renewable & Sustainable Energy Reviews, 2016, 60: 653-678.
- [21] HE X L, WANG J F, WU F L, et al. Identification of rubber particles based on chemometrics by infrared spectroscopy [J]. Journal of Analytical Science, 2019, 35(3);357-361 (in Chinese).