К. И. Зайцев, В. Е. Карасик, С. О. Юрченко, И. В. Соколова, В. И. Рыжий

ДИАГНОСТИКА ДЕМИНЕРАЛИЗАЦИИ ЭМАЛИ ЗУБА С ПОМОЩЬЮ ТЕРАГЕРЦОВОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Рассмотрена возможность использования терагерцовой спектроскопии для диагностики деминерализации эмали зуба — первой стадии кариозного процесса. Предложен алгоритм восстановления профиля диэлектрической проницаемости эмали зуба, наиболее полно характеризующего состояние ее деминерализации. Проведена апробация алгоритма восстановления профиля диэлектрической проницаемости, включающая исследование сред с известными профилями диэлектрической проницаемости.

E-mail: kirzay@gmail.com

Ключевые слова: терагерцовая спектроскопия, диагностика деминерализации зубной эмали, профиль диэлектрической проницаемости, обратная задача.

Введение. Поверхностный слой эмали зуба отличается от ее глубоких слоев большим содержанием минеральных веществ (апатитов кальция, фосфора, магния, калия, натрия, фтора и хлора), высокой плотностью, а следовательно, и резистентностью к кариесу. Сформировавшаяся эмаль зуба не способна к регенерации, но участвует в постоянном обмене веществ, поступающих из окружающих тканей и слюны. При вымывании из эмали минеральных веществ, вызванной действием органических кислот, происходит так называемый процесс деминерализации эмали.

Реминерализация эмали — процесс восстановления плотности поврежденной эмали, заполнение эмали минералами, поступающими из ее подповерхностного слоя.

Нарушение баланса между указанными процессами приводит к снижению содержания минералов в эмали зуба и резистентности ее к кариесу. Данное состояние эмали называется деминерализацией и является начальной стадией кариозного процесса, причем на этой стадии кариозный процесс обратим [1].

Современные методы лечения начального кариеса зубов основаны на возможности внешнего воздействия на положение равновесия между деминерализацией и реминерализацией в сторону второго процесса. Начинающиеся поражения могут быть реминерализованы до нормального состояния, однако успешное лечение возможно лишь на ранних стадиях, когда белковая матрица зуба еще не затронута. Существует ряд методов аппаратной диагностики деминерализации эмали зуба, но они либо не могут применяться in vivo, либо предполагают использование вредного для организма человека ионизирующего излучения. Например, трансмиссионная микрорадиография (Transmission Microradiography (TMR)), позволяющая с высокой точностью установить глубину деминерализации зубной эмали, предполагает деление зуба на тонкие слои и изучение его in vitro [2]. Микрофокусная компьютерная томография (Microfocus Computer Tomography (MCT)) позволяет изучать строение эмали зуба in vivo [3], но в МСТ используется ионизирующее рентгеновского излучение, вредное для организма человека.

В связи с отмеченным актуальной задачей является разработка новых безвредных и эффективных методов исследования деминерализации зубной эмали in vivo. Подобный метод исследования деминерализации может быть разработан на основе терагерцовой (ТГц) спектроскопии во временной области [4].

ТГц-излучение лежит между инфракрасной и микроволновой областями электромагнитного спектра [5]. Область ТГц-частот начинается с 0,1 ТГц и заканчивается на 10 ТГц. ТГц-излучению присущи свойства как излучения миллиметрового диапазона (высокая проникающая способность), так и излучения инфракрасной области электромагнитного спектра (различные вещества в ТГц-области электромагнитного спектра обладают характерными линиями поглощения).

В ТГц-спектроскопии исследуемый объект облучается коротким импульсом ТГц-излучения, длительность которого составляет всего 1...2 пс. Регистрируется отраженный от объекта или прошедший через него сигнал — временная зависимость напряженности электрического поля E(t) — с временным разрешением до 50 фс. Столь высокое временное разрешение удается получить за счет того, что генерация и детектирование импульсного ТГц-излучения осуществляются с помощью ультракоротких лазерных импульсов оптического диапазона, длительность которых составляет 50...100 фс.

Короткий импульс ТГц-излучения содержит спектральные составляющие от 0,1 до 3,0 ТГц, что позволяет анализировать характеристики исследуемого образца с помощью фурье-анализа [5]. На основе зарегистрированных ТГц-спектрометром сигналов можно определять спектральные зависимости амплитудных коэффициентов пропускания и отражения исследуемой среды, ее диэлектрическую проницаемость и коэффициент удельного поглощения ТГц-излучения веществом [6].

Энергия кванта ТГц-излучения, а следовательно, и ионизирующая способность несоизмеримо ниже, чем у рентгеновского излучения электромагнитного спектра, что открывает возможности его использования для медицинской диагностики [7].

Впервые возможность диагностики деминерализации эмали зуба с помощью ТГц-спектроскопии во временной области была обоснована в работе [4]. За счет обработки сигналов с ТГц-спектрометра определялась зависимость содержания минеральных веществ зубной эмали от глубины — профиль содержания минеральных веществ, позволяющий охарактеризовать состояние деминерализации зубной эмали (рис. 1).



Рис. 1. Зависимость содержания минеральных веществ зубной эмали от глубины для двух образцов зубной ткани с различной степенью деминерализации [5]

Профиль содержания минеральных веществ эмали связан с зависимостью диэлектрической проницаемости эмали зуба от глубины профилем диэлектрической проницаемости эмали [4]. Для обеспечения эффективности диагностики необходимо, чтобы метод исследования деминерализации позволял определять зависимость содержания минеральных веществ на глубине не менее 1 мм с разрешением по глубине не ниже 0,05 мм.

Восстановление профиля диэлектрической проницаемости среды — обратная оптическая задача. Работа [4] не содержит полного обоснования используемого в ней метода решения обратной задачи, а также экспериментальных или теоретических исследований точности восстановления профиля диэлектрической проницаемости. Последняя играет определяющую роль при создании приборов для диагностики состояния деминерализации эмали.

Постановка задачи. Основной целью данной работы является разработка нового метода решения обратной оптической задачи по восстановлению профиля диэлектрической проницаемости среды с помощью ТГц-спектроскопии, а также апробация этого метода путем исследования сред с известными профилями диэлектрической проницаемости. Существует множество методов восстановления профиля диэлектрической проницаемости, которые чаще всего используются при обработке сигналов в радиочастотном диапазоне, например при решении задач георадиолокации (профилирование почв) [8]. В большинстве методов восстановление профиля диэлектрической проницаемости среды осуществляется в два этапа. На первом этапе из двух временных сигналов, один из которых (сигнал образца) отражен от исследуемой среды, а другой (базовый сигнал) — от эталонной зеркальной поверхности, восстанавливается импульсный отклик среды. На втором этапе из импульсного отклика среды восстанавливается профиль ее диэлектрической проницаемости.

В работах [9—13] рассмотрен способ восстановления профиля диэлектрической проницаемости среды, основанный на методе вложенных интегральных операторов рассеяния. Отметим, что восстановление профиля возможно, если исследуемая среда обладает минимальным поглощением и несущественной дисперсией оптических характеристик. Ткани зуба удовлетворяют этим требованиям [14].

В данной работе метод вложенных интегральных операторов обобщается на ТГц-область электромагнитного спектра, в связи с чем требуется решить ряд задач.

Базовый сигнал и сигнал образца, регистрируемые спектрометром, не определены в областях низких (<0,1 ТГц) и высоких (>3,0 ТГц) частот. Восстанавливаемый из этих сигналов импульсный отклик среды также не несет полезной информации в этих частотных областях. Необходимо осуществить фильтрацию импульсного отклика с целью подавления его низкочастотной и высокочастотной шумовых составляющих.

Для восстановления профиля диэлектрической проницаемости важно, чтобы импульсный отклик среды был определен в области низких частот (<0,1 ТГц), включая постоянную составляющую. Необходимо интерполировать импульсный отклик в этом частотном диапазоне.

Ниже приведены пути решения данных проблем.

Регистрация сигналов. Для восстановления профиля диэлектрической проницаемости необходимо зарегистрировать два сигнала: сигнал образца, отраженный от исследуемого объекта, и базовый сигнал, отраженный от эталонной зеркальной поверхности. В качестве эталонной отражающей поверхности используется зеркало с золотым покрытием, имеющее однородный и высокий спектральный коэффициент отражения. На рис. 2 приведена схема регистрации сигналов.

Фокусное расстояние линзы (Л) составляет 50 мм и позволяет получить близкий к нормальному угол падения излучения на объект, что необходимо для решаемой обратной задачи. Относительное отверстие линзы D/f'=1:2. Глубина резкости оптической системы позволяет регистрировать сигнал, отраженный от слоев объекта, расположенных на глубине до 2 мм.



Рис 2. Принципиальная схема измерительного отсека ТГц-спектрометра при регистрации сигнала образца (*a*) и базового сигнала (*б*):

ТГц — импульс ТГц-излучения; ПЗ — внеосевое параболическое зеркало; З — плоское зеркало; СД — светоделитель; Л — линза; ЭЗ — эталонное зеркало

Восстановление импульсного отклика среды. Пусть зарегистрированы два сигнала: сигнал образца $E_s(t)$ и базовый сигнал $E_b(t)$. Амплитудные фурье-спектры сигналов обозначим $\tilde{E}_s(v_t)$ и $\tilde{E}_b(v_t)$ соответственно. Опишем алгоритм восстановления импульсного отклика среды.

Импульсный отклик среды R(t) — результат выполнения обратного преобразования Фурье над комплексным амплитудным коэффициентом отражения $\tilde{R}(v_t)$. Использовав винеровскую фильтрацию, определим комплексный амплитудный коэффициент отражения среды:

$$\tilde{R}(v_{t}) = \frac{\tilde{E}_{s}(v_{t})}{\tilde{E}_{b}(v_{t})} \left[\frac{\left(\frac{\tilde{E}_{b}(v_{t})}{\max_{v_{t}} \left\{\tilde{E}_{b}(v_{t})\right\}}\right)^{2}}{\left(\frac{\tilde{E}_{b}(v_{t})}{\max_{v_{t}} \left\{\tilde{E}_{b}(v_{t})\right\}}\right)^{2} + \frac{N(v_{t})}{S(v_{t})}}\right],$$
(1)

где $N(v_t)$ — спектральная мощность шума; $S(v_t)$ — спектральная мощность сигнала.

Правый сомножитель в выражении (1) позволяет устранить шумовую составляющую импульсного отклика, обусловленную отсутствием полезной информации в базовом сигнале и сигнале образца в областях частот ниже 0,1 ТГц и выше 3,0 ТГц. Очевидно, что сомножитель стремится к нулю, если $N(v_t)$ превышает $S(v_t)$, и стремится к единице, если $S(v_t)$ превышает $N(v_t)$.

Полагаем, что спектральная мощность шума соответствует белому шуму:

$$N(\boldsymbol{v}_t) = \tilde{K},\tag{2}$$

где $\tilde{K} = \text{const}$ — спектральная мощность шума, $0, 0 < \tilde{K} < 1, 0$.

Модель спектральной мощности сигнала строится на основе модели сигнала ТГц-спектрометра в виде гауссова моноимпульса (первой производной от функции Гаусса). Выражение, позволяющее задать такой моноимпульс, имеет вид

$$f(t) = -2e^{\frac{1}{2}} (\pi f_{\rm c} t) \exp\left(-2(\pi f_{\rm c} t)^2\right), \tag{3}$$

где f_c — наиболее энергичная гармоника в комплексном амплитудном фурье-спектре моноимпульса, $f_c = 0, 5 \dots 0, 6$ ТГц. Модель спектральной мощности сигнала:

$$S(v_t) = \frac{\left[F_t\{f(t)\}\right]^2}{\max_{v_t} \left(\left[F_t\{f(t)\}\right]^2\right)},\tag{4}$$

где *F_t* — оператор прямого фурье-преобразования.

Очевидно, что фильтрацию необходимо осуществлять как в области положительных, так и в области отрицательных частот, формально вводимых при использовании фурье-анализа.

В результате применения винеровского фильтра обеспечивается плавный переход от определенной области значений амплитудного коэффициента отражения $(0,1 < v_t < 3,0 \text{ T}\Gamma\mu)$ к областям с нулевым значением $(v_t < 0,1 \text{ и } v_t > 3,0 \text{ T}\Gamma\mu)$, что позволяет минимизировать шумы Гиббса в восстанавливаемом импульсном отклике R(t).

Варьируя центральную частоту моноимпульса f_c (зависит от сигнала спектрометра, метода детектирования, схемы эксперимента) и спектральную мощность шума \tilde{K} (зависит от числа накапливаемых

реализаций сигнала), можно получить качественное восстановление импульсного отклика с сохранением максимального объема информации в области низких и высоких частот, а также исключить возможность появления шумов Гиббса в восстанавливаемом импульсном отклике.

Вторая проблема, которую требуется решить, — интерполяция комплексного амплитудного коэффициента отражения $\tilde{R}(v_t)$ в области низких частот (-0,1...0,1 ТГц).

Интерполяция может быть осуществлена успешно, если дисперсия оптических характеристик исследуемых сред в области ТГц-частот пренебрежимо мала. В таком случае амплитудный коэффициент отражения можно представить в виде некоторой постоянной составляющей, модулированной периодически за счет наличия в сигнале составляющих, отраженных от разных слоев объекта.

Удобно интерполировать независимо друг от друга модуль комплексного амплитудного коэффициента отражения $|\tilde{R}(v_t)|$ и его фазу $\varphi\{\tilde{R}(v_t)\}$.

Для интерполяции модуля амплитудного коэффициента отражения целесообразно использовать тригонометрическую интерполяцию. Очевидно, что модуль амплитудного коэффициента отражения является четной функцией, так как функция R(t) является действительной. Для аппроксимации $|\tilde{R}(v_t)|$ воспользуемся следующим рядом:

$$\left|\tilde{R}\left(\nu_{t}\right)\right|_{interp} = a_{0}^{\left|\tilde{R}\right|} + 2\sum_{n=1}^{N} a_{n}^{\left|\tilde{R}\right|} \cos\left(2\pi \frac{n}{T_{\nu_{t}}}\nu_{t}\right),\tag{5}$$

где $T_{v_t} = v_{t_{max}} - v_{t_{min}}$ — размеры области, в которой достоверно определен амплитудный коэффициент отражения; $v_{t_{min}} = 0,1$ ТГц и $v_{t_{max}} = 3,0$ ТГц — границы этой области; $a_0^{|\tilde{R}|}$, $a_n^{|\tilde{R}|}$ — коэффициенты интерполяции,

$$a_{0}^{|\tilde{R}|} = \frac{1}{T_{v_{t}}} \int_{v_{t_{-}\min}}^{v_{t_{-}\max}} \left| \tilde{R}(v_{t}) \right| dv_{t};$$

$$a_{n}^{|\tilde{R}|} = \frac{1}{T_{v_{t}}} \int_{v_{t_{-}\min}}^{v_{t_{-}\max}} \left| \tilde{R}(v_{t}) \right| \cos\left(2\pi \frac{n}{T_{v_{t}}}v_{t}\right) dv_{t}.$$
(6)

Для аппроксимации фазовой составляющей комплексного амплитудного коэффициента отражения $\varphi\{\tilde{R}(v_t)\}$ также используется три-

гонометрический ряд. С учетом того, что $\varphi\{\tilde{R}(v_t)\}$ является нечетной функцией, этот ряд имеет следующий вид:

$$\varphi\left\{\tilde{R}\left(\nu_{t}\right)\right\}_{interp} = a_{0}^{\varphi\left\{\tilde{R}\right\}}\nu_{t} + 2\sum_{n=1}^{N}a_{n}^{\varphi\left\{\tilde{R}\right\}}\sin\left(2\pi\frac{n}{T_{\nu_{t}}}\nu_{t}\right).$$
(7)

Коэффициенты интерполяции в (7) имеют вид

$$a_{0}^{\varphi\{\tilde{R}\}} = \frac{1}{T_{v_{t}}} \int_{v_{t}_\min}^{v_{t}_\max} \varphi\{\tilde{R}(v_{t})\} dv_{t};$$

$$a_{n}^{\varphi\{\tilde{R}\}} = \frac{1}{T_{v_{t}}} \int_{v_{t}_\min}^{v_{t}_\max} \varphi\{\tilde{R}(v_{t})\} \sin\left(2\pi \frac{n}{T_{v_{t}}}v_{t}\right) dv_{t}.$$
(8)

После интерполяции импульсный отклик можно вычислить в соответствии с выражениями при $v_t \in [-v_{t_{min}}; v_{t_{min}}]$ и $v_t \notin [-v_{t_{min}}; v_{t_{min}}]$:

$$\tilde{R}(\nu_{t})_{\text{interp}} = \begin{cases} \left| \tilde{R}(\nu_{t}) \right|_{\text{interp}} \exp\left(j\varphi \left\{ \tilde{R}(\nu_{t}) \right\}_{\text{interp}} \right); \\ \tilde{R}(\nu_{t}), \end{cases}$$
(9)

 $R(t) = \mathcal{F}_{\nu_t}^{-1} \left\{ \tilde{R}(\nu_t)_{\text{interp}} \right\}.$

Перейдем к описанию алгоритма восстановления профиля диэлектрической проницаемости среды.

Восстановление профиля диэлектрической проницаемости среды. Рассмотрим метод вложенных интегральных операторов рассеяния. В соответствии с данным методом отражение электромагнитного излучения от среды описывается интегралом свертки:

$$E^{refl}(z_0, t) = \int_{-\infty}^{t} R^+(z_0, t - t') E^{inc}(z_0, t') dt',$$
(10)

где $E^{refl}(z_0, t)$ — зависимость напряженности отраженного средой электрического поля от времени, регистрируемая в точке $z = z_0$; z — координата по глубине проникновения излучения; $R^+(z_0, t)$ — ядро интегрального преобразования (оператор рассеяния) при регистрации

сигналов в точке $z = z_0$; $E^{inc}(z_0, t')$ — зависимость напряженности падающего на среду электрического поля от времени, регистрируемая в точке $z = z_0$.

Полагаем, что обе волны (падающая и отраженная) являются плоскими, а свойства и структура среды изменяются только в направлении оси *OZ* (рис. 3).



Рис. 3. Зависимость диэлектрической проницаемости среды от глубины проникновения излучения

Подобное линейное представление процесса отражения справедливо, если в отраженном от среды сигнале отсутствуют составляющие, обусловленные многократными переотражениями излучения в слоях объекта.

 $R^{+}(z_{0},t)$ характеризует область исследуемой среды в диапазоне глубин $[z_{0}, L]$. В качестве начала отсчета оси *OZ* примем первую поверхность среды. Очевидно, что физически можно зарегистрировать сигналы $E^{inc}(z_{0},t)$ и $E^{refl}(z_{0},t)$ и определить $R^{+}(z_{0},t)$ только в случае, если $z_{0} < 0$.

Определенному на предыдущем этапе импульсному отклику R(t) соответствует ядро

$$R(t) = R^{+}(z_{0} = 0, t).$$
(11)

Можно показать [9], что вид ядра интегрального преобразования определяется исключительно свойствами среды — диэлектрической проницаемостью $\varepsilon(z)$ и эффективной удельной проводимостью $\sigma(z)$ среды — и не зависит от сигналов $E^{inc}(t)$ и $E^{refl}(t)$.

Предположим, что диэлектрическая проницаемость среды постоянна при z < 0 и z > L. Данное условие эквивалентно тому, что импульсный отклик среды равен нулю до момента времени t = 0 и с некоторого момента времени t = 2l. Для удобства введем нормированные безразмерные пространственную и временную координаты, а также осуществим нормировку ядра интегрального преобразования:

$$l = \int_{0}^{L} \sqrt{\varepsilon(z)\varepsilon_{0}\mu_{0}} dz;$$

$$x = x(z) = \int_{0}^{z} \frac{dz'}{lc(z')};$$

$$s = \frac{t}{l},$$

$$R(x,s) = lR^{+}(z,t).$$
(12)

где x — нормированная оптическая толщина (0 < x < 1); s — нормированная временная координата (0 < s < 2); l — время, необходимое для прохождения волнового фронта через исследуемую среду (от 0 до L).

Полагая, что исследуемая среда является непоглощающей $(\sigma(z)=0)$, можно записать нелинейное дифференциально-интегральное уравнение, которому будут удовлетворять вложенные ядра R(x, s) интегрального преобразования при s > 0 [9]:

$$\frac{\partial R(x,s)}{\partial x} - 2 \frac{\partial R(x,s)}{\partial s} = -\frac{1}{2} A(x) \int_{0}^{s} R(x,s') R(x,s-s') ds';$$

$$R(1,s) = 0;$$

$$R(x,0) = -\frac{1}{4} A(x).$$
(13)

где A(x) — функции, зависящие от профиля диэлектрической проницаемости $\varepsilon(z)$ среды,

$$A(x) = -\frac{d}{dx} \left[\ln \left(\frac{1}{\sqrt{\varepsilon(z(x))\mu_0}} \right) \right].$$
(14)

Для определения профиля диэлектрической проницаемости $\varepsilon(z)$ среды необходимо найти функцию A(x) путем численного решения нелинейного дифференциально-интегрального уравнения (13) с начальными условиями, записанными на основе импульсного отклика R(t).

Зная функцию A(x), можно определить профиль диэлектрической проницаемости $\varepsilon(z(x))$ среды при 0 < x < 1:

$$z(x) = c(0) l \int_{0}^{x} exp \left\{ -\int_{0}^{x'} A(x'') dx'' \right\} dx';$$

$$\varepsilon(z(x)) = \varepsilon_{1} exp \left\{ 2 \int_{0}^{x} A(x') dx' \right\}.$$
(15)

Для построения процедуры численного решения уравнения (13) преобразуем его к виду

$$\frac{\partial R(x,s-2x)}{\partial x} = -\frac{1}{2} A(x) \int_{0}^{s-2x} R(x,s') R(x,s-2x-s') ds'.$$
(16)

Проинтегрировав правую и левую части уравнения (16) по x в пределах от x - h до x и осуществив замену переменной (s = s - 2x), получим

$$R(x,s) - R(x-h,s+2h) =$$

$$= -\frac{1}{2} \int_{x-h}^{x} \left\{ A(x') \int_{0}^{s} R(x',s') R(x',s-s') ds' \right\} dx'.$$
(17)

Воспользуемся выражением (17) для построения процедуры численного решения. Введем дискретную сетку нормированных пространственной и временной координат:

$$x_{i} = ih, \qquad i = 0, 1, 2, ..., N;$$

$$s_{j} = jh, \qquad j = 0, 1, 2, ..., N - i; \qquad (18)$$

$$N = \frac{1}{h}.$$

Осуществим дискретизацию функций R(x,s) и A(x):

$$R_{i,j} = R\left(x_i, s_j\right); \qquad A_i = A\left(x_i\right). \tag{19}$$

Если использовать правило трапеций для вычисления интеграла по x в правой части выражения (17), алгоритм численного решения нелинейного уравнения принимает следующий вид:

1. Дискретизация импульсного отклика среды по временной координате:

$$R^+(2ilh), \quad j = 0, 1, 2, ..., N.$$
 (20)

2. Вычисление первого интегрального ядра на основе импульсного отклика:

$$R_{0,j} = R(0,2jh) = lR^+(0,2jlh) = lR^+(2jlh), \quad j = 0,1,2,\dots,N.$$
(21)

3. Инициализация первого значения функции $A(x_i = 0)$:

$$A_0 = A(x_0) = 0. (22)$$

4. Инкремент индекса нормированной пространственной координаты i и вычисление значений функции A(x) и вложенного ядра R(x,s), соответствующих пространственной координате x_i :

$$A_{i} = -4R_{i-1,1} \left[1 + \frac{h^{2}}{8} A_{i-1}^{2} \right];$$
(23)

$$R_{i,j} = \frac{R_{i-1,j+1} - \frac{h^2}{2} \left[A_i \sum_{k=1}^{j-1} R_{i,j-k} R_{i,k} + A_{i-1} \sum_{k=1}^{j+1} R_{i-1,j+1-k} R_{i-1,k} \right]}{1 - \frac{h^2}{8} A_i^2}.$$
 (24)

5. Повторение этапа 4 вычислений до тех пор, пока не будут получены все значения искомой A(x).

6. Вычисление профиля диэлектрической проницаемости среды осуществляется на основе найденной на предыдущих этапах функции A(x) с помощью выражений (15).

Для повышения качества восстановления профиля диэлектрической проницаемости среды можно скорректировать функцию A(x) с учетом априорной информации о профиле. Ранее было отмечено, что диэлектрическая проницаемость среды должна быть постоянной начиная с некоторой глубины z = L. Для выполнения данного условия необходимо скорректировать функцию A(x), добавив к ней некоторую константу C так, чтобы интеграл функции f(x) = $= \int_{0}^{x} A(x') dx' = \text{const}$ при $x \rightarrow 1$:

$$A_{korr}(x) = A(x) + C, \qquad C = \left(\frac{d}{dx}f(x)\right)\Big|_{x \to 1}.$$
 (25)

Введение такой коррекции существенно снижает погрешность восстановления профиля диэлектрической проницаемости среды,

обусловленную ошибкой в интерполяции низкочастотных составляющих амплитудного фурье-спектра импульсного отклика $\tilde{R}(v_t)$.

Апробация алгоритма восстановления профиля диэлектрической проницаемости среды. Рассмотренный алгоритм реализован на языке программирования MATLAB. Проведена его апробация, в ходе которой решалась задача исследования тестовых сред с известным профилем диэлектрической проницаемости среды.

Тестовые среды состояли из набора плоскопараллельных пластинок. Толщина и диэлектрическая проницаемость каждой пластинки известны, дисперсия оптических характеристик и поглощение пренебрежимо малы [15].

На рис. 4 приведены эталонные (штриховая линия) и восстановленные (сплошная линия) профили диэлектрической проницаемости тестовых сред: *а* — одиночной плоскопараллельной пластинки из высокоомного кремния; *б* — среды, состоящей из кремниевой плоскопараллельной пластинки и пластинки из высокорезистивного кварца; *в* — среды, состоящей из кремниевой плоскопараллельной пластинки и пластинки из полимера полиметилпентена; *г* — среды, состоящей из кремниевой плоскопараллельной из кремниевой плоскопараллельной пластинки и пластинки из полиэтилена высокой плотности.



Рис. 4. Эталонные (штриховая линия) и восстановленные (сплошная) профили диэлектрической проницаемости тестовых сред

Отметим, что спектрометр не регистрировал сигналы, отраженные от задних поверхностей плоскопараллельных пластинок из высокорезистивного кремния, полиметилпентена и полиэтилена высокой плотности, поэтому и восстанавливаемые профили не содержат информации от этих поверхностей.

Обсуждение результатов. Вопросы устойчивости и сходимости разработанного алгоритма решения обратной оптической задачи исследовались на моделях сред. Моделировалось распределение диэлектрической проницаемости среды и взаимодействие с ним излучения. Обработка результатов моделирования показала, что восстанавливаемые в соответствии с рассматриваемым алгоритмом профили диэлектрической проницаемости сред хорошо согласуются с распределениями $\varepsilon(z)$ модельных сред.

Обработка реальных измерений дает ожидаемые результаты с учетом априорной информации о распределении $\varepsilon(z)$ исследуемых сред.

Проанализируем основные факторы, влияющие на точность восстановления профиля диэлектрической проницаемости среды.

Восстановленные профили диэлектрической проницаемости среды содержат как низкочастотные, так и высокочастотные шумы, причем низкочастотный шум вносит существенные искажения в форму кривой $\varepsilon(z)$.

Процедура вычисления профиля диэлектрической проницаемости среды предполагает последовательный расчет ее значений с инкрементом глубины x. Очевидно, что погрешность восстановления профиля диэлектрической проницаемости среды накапливается с увеличением пространственной координаты, и чем меньше толщина исследуемого слоя L, тем выше средняя точность восстановления профиля диэлектрической проницаемости среды.

Теоретический предел разрешения по координате x в первом приближении можно определить как половину минимальной длины волны излучения, присутствующего в фурье-спектре импульсного отклика среды $\tilde{R}(v_t)$. Однако точность восстановления зависимости $\varepsilon(z)$, как видно из экспериментальных данных, существенно зависит и от других факторов (выбранного метода интерполяции, метода фильтрации при восстановлении импульсного отклика и др.).

Заключение. В работе приведено описание разработанного в НОЦ «Фотоника и ИК-техника» алгоритма решения обратной оптической задачи восстановления профиля диэлектрической проницаемости среды с помощью ТГц-спектроскопии. Апробация алгоритма путем исследования сред с известным профилем диэлектрической проницаемости показала ожидаемые результаты. Оценены факторы, влияющие на точность восстановления профиля диэлектрической проницаемости среды.

Предложенный алгоритм можно использовать при разработке нового метода диагностики деминерализации эмали зуба, однако для этого необходимо провести ряд экспериментально-теоретических исследований. Требуется установить связь между диэлектрической проницаемостью среды и содержанием в среде минеральных веществ, а также провести экспериментальное исследование образцов зубов in vitro с различной (известной) степенью их деминерализации, которые позволят оценить точность восстановления профиля содержания минеральных веществ в эмали и установить предельную глубину диагностики.

Отметим, что круг сред, исследуемых с помощью данного алгоритма, ограничен бездисперсионными, непоглощающими средами, однако алгоритм можно модифицировать. Если ввести некоторые аппроксимации дисперсионных характеристик и профилей эффективной проводимости сред, то алгоритм исследования профиля диэлектрической проницаемости среды можно использовать для неразрушающей диагностики конструкционных материалов, для контроля качества фармацевтической продукции с помощью ТГц-спектроскопии и др.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 12-08-31104 мол_а, проект № 12-08-33112 мол_а_вед).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Тодия А. Р., Ландинова В. Д., Жорова Т. Н. Сравнительная характеристика действия реминерализирующих средств при лечении очаговой деминерализации эмали // Клиническая стоматология. 2004. № 1.
- 2. Huysmans M. C., Longbottom C. The challenges of validating diagnostic methods and selecting appropriate gold standards // J Dental Res. 83: 48–52. 2004.
- 3. Skinner M. M., Kapedia R. An evaluation of microCT for assessing in 3D the concordance of dental trait expression between the dentin-enamel junction and the outer enamel surface of modern human molars // Am J Pkys Anthropol Suppl. 40:191. 2005.
- 4. Pickwell E., Wallace V. P., Cole B. E. A Comparison of Terahertz Pulsed Imaging with Transmission Microradiography for Depth Measurement of Enamel Dimeneralisation in vitro // Caries Research. 41:49–55. 2007.
- 5 L e e Y. S. Principles of Terahertz Science and Technology. Springer. 2009. P. 340.
- 6. Зайцев К. И., Фокина И. В., Федоров А. К., Юрченко С. О. Анализ спектральных характеристик воды и льда в ТГц-области спектра в процессе фазового перехода // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. Спец. выпуск «Моделирование физических и технических процессов». 2012.
- 7. Зайцев К. И., Карасик В. Е., Королева С. А., Фокина И. Н. Исследование возможности использования терагерцовых изображающих систем для

медицинской диагностики // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Приборостроение. 2012. № 4.

- 8. Владов М. Л., Старовойтов А. В. Введение в георадиолокацию. М.: МГУ. 2005. 153 с.
- 9. Kristensson G., Krueger R. J. Direct and inverse scattering in the time domain for a dissipative wave equation. II. Simultaneous reconstruction of dissipation and phase velocity profiles // J. Math. Phys. 27. 1986.
- 10. Kristensson G., Krueger R. J. Direct and inverse scattering in the time domain for a dissipative wave equation. III. Scattering operators in the presence of a phase velocity mismatch // J. Math. Phys. 28. 1987.
- 11. Kristensson G., Krueger R. J. Direct and inverse scattering in the time domain for a dissipative wave equation. IV. Use of phase velocity mismatches to simplify inversions // Inverse Problems. 5. 1989.
- K r i s t e n s s o n G. Direct and inverse scattering from dispersive media Green's functions and invariant imbedding techniques // Electromagnetic Theory. Lund Institute of Technology. 1990.
- Fuks P., Kristensson G., Larson G. Permittivity profile reconstruction using transient electromagnetic reflection data // Electromagnetic Theory. Lund Institute of Technology. 1990.
- 14. Crawley D., Longbottom C., Wallace V. P. Three-dimensional terahertz pulsed imaging of dental tissue // J Biomed Opt. 8:303–307. 2003.
- 15. THz Materials & Components Tydex J. S. Co.: http://www.tydexoptics.com/ products/thz_optics/thz_materials.

Статья поступила в редакцию 28.09.2012.