

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ ИДЕНТИФИКАЦИИ ВЕЩЕСТВА НА ОСНОВЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ МАЛОПЕРИОДНОГО ТЕРАГЕРЦОВОГО ИМПУЛЬСА¹

1. Введение

В последние 25 лет во всем мире наблюдается бурное освоение терагерцового (ТГц) диапазона частот. Это происходит, в частности, из-за того, что в этом диапазоне лежат спектры вращательных переходов многих важных неорганических и органических молекул, включая белки и ДНК. Как следствие, терагерцовое излучение (Т-лучи) применяются как для изучения биологических, так и неорганических веществ [1-17]. Это особенно актуально в связи с необходимостью развития методов контроля качества лекарств [14] и идентификации веществ, включая наркотики, взрывчатые и отравляющие вещества [10-12,15,16]. Существенно для практики, что терагерцовое излучение может проникать через одежду и многие обычные упаковочные материалы, и в отличие от рентгеновского излучения оно не является ионизирующими.

В настоящее время в основе идентификации веществ с помощью Т-лучей, как правило, лежат два метода. Один из них (наиболее распространенный на практике) состоит в анализе спектра ТГц излучения, либо прошедшего среду, либо отраженного от образца. Однако этот метод имеет существенный недостаток из-за схожести терагерцовых спектров многих нейтральных веществ (например, лекарственных препаратов), а также спектры взрывчатых веществ оказываются схожими со спектрами нейтральных веществ, таких, например, как мыло или шоколад [10]. Помимо этого, в литературе появились сообщения о веществах симулянтах, которые имеют терагерцовые спектры, совпадающие в широком диапазоне частот со спектрами взрывчатых веществ.

Другой метод – метод динамического анализа спектрального отклика вещества в терагерцовом диапазоне частот (SDA-метод), предложенный и развиваемый в работах [18-26], свободен от этих недостатков и позволяет по одной серии измерений отклика среды (или его интегральных характеристик) получить информацию о динамике всего спектра.

Следует подчеркнуть, что реализовать в терагерцовом диапазоне частот методику определения динамики спектральных линий, развитую для оптического диапазона, достаточно сложно и очень дорого без

¹ Работа выполнена при поддержке РФФИ (код проекта 08-07-12007-офи)

использования информационных систем. Важно также подчеркнуть, что к началу 21 века для построения временной динамики спектральных линий практически повсеместно использовался метод Вигнера, который часто приводил к абсурдным результатам [17]. Поэтому упомянутыми выше авторами были предложены два возможных алгоритма анализа мгновенных спектральных интенсивностей среды под действием малопериодного импульса.

Для практического приложения Т-лучей в задачах обнаружения веществ необходимо развивать методы визуализации обрабатываемых результатов. Стандартные графические пакеты не всегда для этих целей пригодны как из-за их производительности, так и из-за отсутствия ряда свойств, ориентированных на быстрый диалоговый интерфейс для просмотра динамики линий, принадлежащих различным частотным диапазонам. Разработанная программа лишена этих недостатков и ориентирована на визуализацию результатов обработки терагерцового сигнала, заданного в общепринятом в этой области формате. Она реализована на языке Delphi с использованием библиотеки OpenGL и предоставляет пользователю дружелюбный интерфейс.

2. Описание структуры программы и её запуска

Запуск программы THz_Visial, осуществляющей визуализацию спектральной динамики ТГц сигнала, может быть выполнен из любой директории, в которой должны содержаться следующие поддиректории (Рис.1).

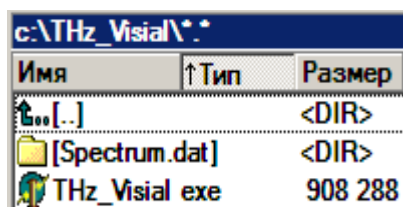


Рис. 1. Директория, содержащая программу THz_Visial.exe и необходимые для её работы поддиректории.

Поддиректория Spectrum.dat содержит файл (Рис.2), например, с именем Ws7_41.dat, который используется для построения различных зависимостей динамики спектральных линий и распределения спектра в заданный момент времени и трёхмерных распределений интенсивности сигнала в частотно-временном пространстве. Имя файла может быть произвольным. В этом случае необходимо выбрать этот файл из всплывающего меню.



Рис. 2. Содержимое директории Spectrum.dat

Программа состоит из перечисленных ниже программных модулей.

Main_Form.pas – Отображает главное меню программы. Используется для выбора типа графика, который надо построить.

Unit7.pas – Позволяет выбрать сечение, в котором строятся распределения по времени или пространственной координате.

Unit8.pas – Используется для построение распределений как спектральных интенсивностей в выбранный момент времени, так и динамики спектральной линии. Данные берутся из файла, находящегося в поддиректории 'Spectrum.dat' (Рис.2). Этот модуль осуществляет также сохранение графиков в директорию, которая создаётся автоматически в основной директории программы. Для определенности её название 2D Pic. Графики сохраняются в bmp-формате.

Существенно, что данная программа позволяет выполнять построение графиков, используя файлы, находящиеся в любых других директориях на жёстком диске и записывать в них результаты построения. Она также используется для более детального просмотра графиков путём выбора нужного отрезка изменения функции и координат.

Unit12.pas – Используется для вывода трёхмерного графика на экран. Позволяет осуществить масштабирование графика и его поворот вокруг осей.

Программа Path.pas выполняется; если происходит ошибка считывания данных из файла, т.е. исполняемый модуль не находит имя файла, заданного в программе по умолчанию, то с помощью этой части программы на экран выводится окно, в котором необходимо указать путь к файлу.

3. Описание главного меню программы

При запуске программы на экране появится главное меню программы (Рис. 3), которое позволяет обратиться к программе графической обработки результатов.

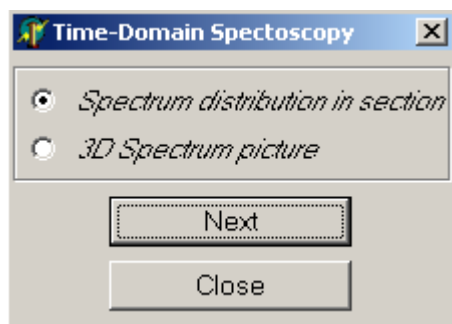

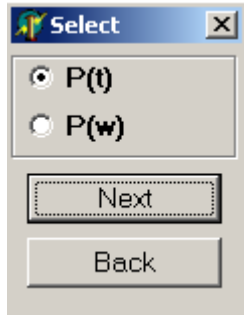
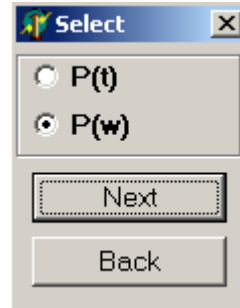


Рис. 3. Главное меню программы.

После выбора пункта *Spectrum distribution in section* курсором мыши и нажатия кнопки  выводится на экран форма, представленная на Рис 4.



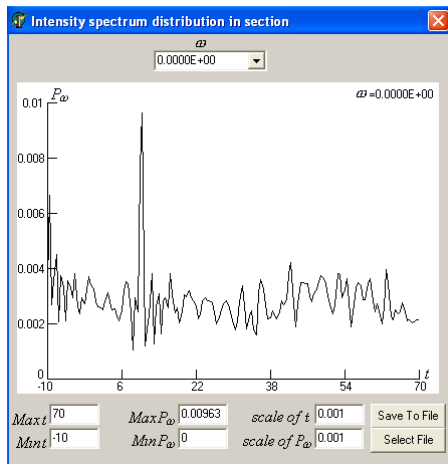
(a)



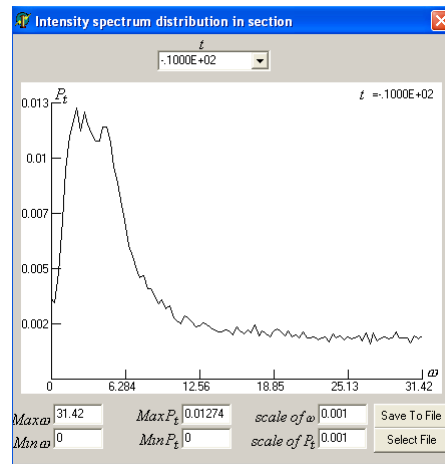
(б)

Рис. 4. Одна из форм, которая появляется после выбора пункта *Spectrum distribution in section*.

После выбора желаемых значений появится одна из картинок Рис. 5а или Рис. 5б.



(a)



(б)

Рис. 5. Распределение интенсивности (форма *Intensity spectrum distribution in section*)

Для построения графика в новом сечении по частоте или времени необходимо выбрать их новые значения в соответствующих полях. После ввода новой координаты построение графика будет непосредственно выполняться.

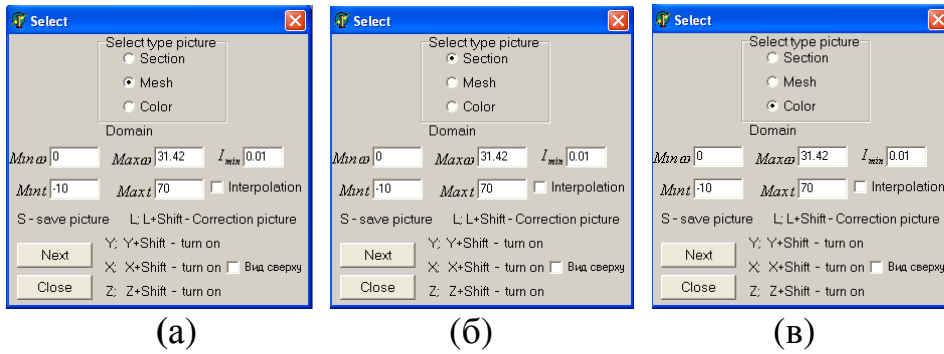


Рис. 6. Общая структура графической части меню для пространства (w,t) , выполняющая построение графиков вида $P(w,t)$.

После выбора пункта 3D Spectrum picture на Рис. 3 курсором мыши и нажатия кнопки выводится на экран одна из форм, представленных на Рис. 6. Эта часть графического меню относится к пространству (w,t) и позволяет выполнить построение графики вида $P(w,t)$. Для этого надо выбрать один из способов построения графиков. В программе предусмотрены три возможности, которым соответствуют поля Section , Mesh , Color .

При выборе поля Section построение графика будет выполнено с помощью линий, параллельных друг другу. При выборе поля Mesh построение графика происходит с помощью взаимно перпендикулярных линий. В случае выбора поля Color график функции изображается в цветном варианте. Иллюстрацией этих режимов служит Рис.7.

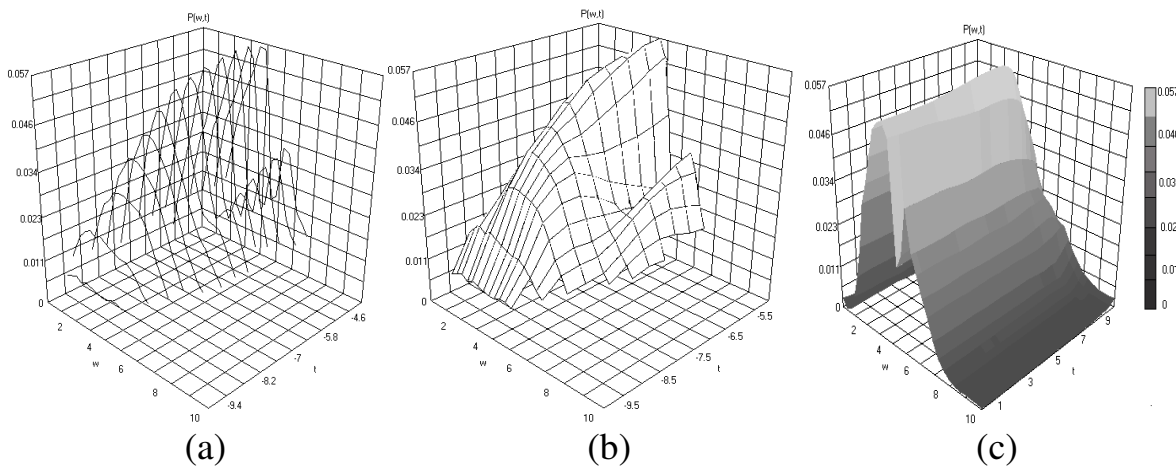


Рис. 7. Построение спектральной интенсивности в пространстве частота-время.

При выборе поля Вид сверху будет изображён вид сверху функции в цветном варианте. На Рис. 8 (как и на рис.7с) он представлен в черно-белом варианте.

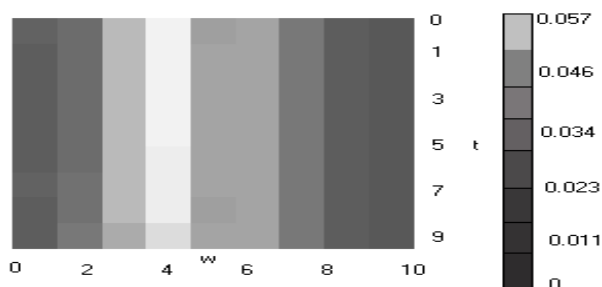


Рис. 8. Вид сверху.

После выполнения построения графика имеется возможность управления точкой, с которой происходит обзор поверхности. Для этого предусмотрен поворот изображения вокруг каждой из трёх осей. При однократном нажатии соответствующих клавиш происходит поворот на 5 градусов. Следует только подчеркнуть, что при построении повторной поверхности (без перезагрузки программы) будет реализован последний угол, имевший место для предыдущего построения. После нового запуска программы реализуется угол обзора, выбранный в программе по умолчанию.

4. Заключение

Применение разработанной и описанной выше программы для визуализации результатов обработки терагерцового сигнала с целью идентификации веществ продемонстрировало ее высокую эффективность. Программа предлагает широкий спектр возможностей для просмотра пространства, в котором задана функция. Среди них очень актуальной является интерактивное изменение диапазона частот или временного отрезка. Построение этих зависимостей выполняется менее чем за 1 секунду.

Литература

1. Smye S.W., Chamberlain J.M., Fitzgerald A.J. et al. The interaction between terahertz radiation and biological tissue. // *Phys. Med. Biol.* 2001. Vol.46. N 9. P. R101-R112.
2. Yen T.J., Padilla W.J., Fang N. et al. Terahertz magnetic response from artificial materials. // *Science*. 2004. Vol. 303. P. 1494-1496.
3. Pickwell E., Wallace V.P. Biomedical applications of terahertz technology. // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2006. Vol. 39. N. 17. P. R301-R310.
4. Nagel M., Först M., Kurz H. THz biosensing devices: fundamentals and technology. // *J. Phys. Condens. Matter*. 2006. Vol. 16. S601 – S618.
5. Kemp M.C., Taday P.F., Cole B.E. et al. Security applications of terahertz technology. // *Proc. SPIE*. 2003. Vol. 5070. P. 44-52.

6. Chen Y., Liu H., Deng Y. et al. Spectroscopic characterization of explosives in the far infrared region. // Proc. SPIE. 2004. Vol. 5411. P. 1-8.
7. Yamamoto K., Yamaguchi M., Miyamaru F. et al. Noninvasive inspection of C-4 explosive in mails by terahertz time-domain spectroscopy. // Jpn. J. Appl. Phys. 2004. Vol. 43. P. 414-417.
8. Huang F., Schulkin B., Altan H. et al. Terahertz study of 1,3,5-trinitro-s-triazine by time-domain and Fourier transform infrared spectroscopy.// Appl. Phys. Lett. 2004. Vol. 85. P. 5535-5537.
9. Tribe W.R., Newnham D.A., Taday P.F. et. al. Hidden object detection: security applications of terahertz technology. // Proc. SPIE. 2004. Vol. 5354. P. 168-176.
10. Shen Y.C., Lo T., Taday P.F. et al. Detection and identification of explosives using terahertz pulsed spectroscopic imaging. // Appl. Phys. Lett., 2005. Vol. 86. P. 241116.
11. Liu H.-B., Zhong H., Karpowicz N. et al. Terahertz spectroscopy and imaging for defense and security applications. // Proc. IEEE. 2007. Vol. 95. N. 8. P. 1514-1527.
12. Baker C., Lo T., Tribe W.R. et al. Detection of concealed explosives at a distance using terahertz technology. // Proc. IEEE. 2007. Vol. 95. N. 8. P. 1559-1565.
13. Fischer B.M., Helm H., Jepsen P.U. Chemical recognition with broadband THz spectroscopy. // Proc. IEEE. 2007. Vol. 95 N. 8. P. 1592-1604.
14. Интернет-сайт фирмы Tera-View. <http://www.teraview.com>
15. Интернет-сайт фирмы Zomega Terahertz Corporation. <http://www.zomega-terahertz.com>
16. Chen J., Chen Y., Zhao H., Bastiaans G. J., Zhang X.-C. Absorption coefficients of selected explosives and related compounds in the range of 0.1-2.8 THz. // Optics Express. 2007. V. 15. N 19. P. 12060-12067.
17. Cohen L. // Proceedings of IEEE. 1989. Vol. 77. N 7. P. 941-981.
18. Nazarov M. M., Mukina L. S., Shuvaev A. V., Sapozhnikov D. A., Shkurinov A. P. and Trofimov V. A. // Laser Phys. Lett. 2005. Vol. 2. N 10. P. 471-475.
19. Сафонов В.Н., Трофимов В.А., Шкуринов А.П. О точности измерения мгновенных спектральных интенсивностей фемтосекундных импульсов. // ЖТФ. 2006. Т.76. Вып.4. С.78-85.
20. Trofimov V.A., Varentsova S.A. New method for analysis of temporal dynamics of medium spectrum under the action of terahertz pulse. // Proc. SPIE. 2007. Vol. 6537. P. 6537-03.
21. Варенцова С.А., Трофимов В.А. Восстановление сигнала и его мгновенных спектральных характеристик методом скользящих окон. // ЖТФ. 2007. Т. 77. Вып. 5. С. 58-64.

22. Trofimov V.A., Troshchiev Y.V., Varentsova S.A. High effective method for temporal terahertz spectroscopy under the condition of random probe signals. // Proc. SPIE. 2007. Vol. 6727. P. 67271H.
23. Варенцова С.А., Трофимов В.А., Трошиев Ю.В. Восстановление сигнала и динамики его спектральных характеристик при нерегулярном наборе измерений. // ЖТФ. 2008. Том 78. Вып. 7. С. 57-68.
24. Trofimov V.A., Varentsova S.A. Effective reconstruction of dynamics of medium response spectrum. // Proc. SPIE. 2008. Vol. 7119. P. 7119-24.
25. Варенцова С.А., Трофимов В.А. Новый метод идентификации веществ на основе динамики их спектральных линий в терагерцовом диапазоне. // Интеграл. 2009. № 1(45). С. 14-16.
26. Trofimov V.A., Varentsova S.A. About efficiency of reconstruction of materials using spectrum dynamics of medium response under the action of THz radiation. // Proc. SPIE. 2009. Vol. 7311. P. 7311-30.