

牙齿龋齿损伤可见-近红外光谱偏振检测研究

梁天全¹, 段晓洁², 汤庆新¹, 于泉洲¹, 张保华¹

1. 聊城大学环境与规划学院, 山东 聊城 252059

2. 聊城市人民医院口腔科, 山东 聊城 252000

摘要 针对不同龋齿损伤程度有效表征问题, 探究一种光谱偏振无损低耗的检测方法, 作为对常规检测方法如化学分析法、表面轮廓测定法、显微放射照相术的有益补充。牙齿龋齿损伤由脱矿溶解牙釉质与牙本质的钙与磷酸盐造成, 牙齿组织表面微观结构发生了不同程度的变化, 结构的变化导致其对光波散射特性与相位改变呈现不同程度的差异。基于偏振光谱对观测样本表面微观结构敏感的特征, 不同龋齿损伤样本其表面微观结构变化与偏振信息强烈关联, 提出一种光谱偏振有效表征牙齿龋齿损伤度的方法。分别选取450, 550, 670和860 nm四个不同观测光谱研究波段, 选择六个不同龋坏程度的实验样本, 选取偏振度参量描述不同牙齿样本的光谱偏振特性。实验结果表明, 同一观测光谱波段随着牙齿龋坏程度的加深其偏振度表征参量呈现增加趋势, 同时, 对于同一观测样本450 nm光谱波段的偏振特性强于其他波段, 呈现观测光谱波段与其偏振特性负相关关系。为进一步定量刻画偏振光谱与牙齿龋坏损伤等级的表征关系, 构建光谱偏振特征参量与不同损伤等级牙齿样本的指数关联数学模型, 通过数学模型解译其内在耦合关联。为有效验证构建模型的稳健性, 对模型仿真预测结果与实测数据进行定量化验证, 选取和方差(SSE)、模型确定系数(R-square)、均方根(RMSE)等评价因子对构建的模型进行定量评判。结果表明, 四个不同光谱波段的模型确定系数均接近于1, 和方差与均方根数值均较小, 且450nm观测光谱波段接近于0, 定量评价结果验证了构建模型的稳健性与有效性, 构建模型可有效解译不同龋齿样本与光谱偏振特征的耦合关联。该研究内容有效扩展了牙齿龋齿检测方式, 揭示了光谱偏振可有效表征龋齿损伤, 发展了一种无损低耗的新型偏振光谱检测技术手段。

关键词 光谱偏振; 龋齿; 模型; 定量评判

中图分类号: TP79 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2021)01-0145-05

引言

牙齿疾病最常见为牙齿腐蚀与龋坏。牙釉质属于高度矿化的组织, 由96%无机成分、3%有机成分(釉质蛋白、釉质素、脂类)与1%水构成, 具有较高硬度。牙齿腐蚀与龋坏的过程伴随着脱矿情形, 造成的原因诸如牙齿经常性浸泡于酸性环境和细菌侵入, 脱矿过程的发生使钙与磷酸盐从牙釉质和牙本质析出, 一定程度溶解了牙齿硬组织。通常牙齿损伤检测方法有化学分析方法离子选择电极分析钙、表面轮廓测定法与显微放射照相术等, 传统的检测方法费用较高并且附带一定损伤, 因此有必要探究一种新型无损牙齿损伤检测方式^[1-3]。

光谱检测是一种非接触式无损检测方式, 应用领域广

泛, 诸如蔬菜产品^[4]、生物组织^[5]、土壤物理^[6]、气体组分^[7]、水体特性^[8]等领域。光谱检测的应用得益于不同观测样品对光谱响应的差异, 通过探测光谱特定峰值变化推演测试样品的固有属性。近来借助人工智能与机器学习方法提高了光谱法有效表征测试样品特性的效率。

偏振属于光波的固有属性, 通常采用振幅、波长、相位与偏振表征光波的基本特性, 偏振信息与探测样品表面微观结构敏感关联, 通过偏振信息元可有效表征探测样品结构变化^[9-12]。由于脱矿溶解硬组织形成不同损伤程度的龋齿, 其牙齿组织表面微观结构发生不同程度的变化, 结构的变化导致对光波散射特性发生改变, 光波相位改变呈现出不同程度差异, 不同损伤龋齿其表面微观结构变化与偏振信息强烈关联, 借助偏振属性的获得可区分不同损伤程度的牙齿。因此, 借助偏振光谱检测可为不同龋齿损伤程度的牙齿本征特

收稿日期: 2019-12-08, 修订日期: 2020-04-06

基金项目: 国家自然科学基金项目(31800367), 山东省自然科学基金项目(ZR2018BD008)资助

作者简介: 梁天全, 1987年生, 聊城大学环境与规划学院教师 e-mail: liangpolaris@126.com

性表征提供一种行之有效的解决手段。

1 实验部分

1.1 样品

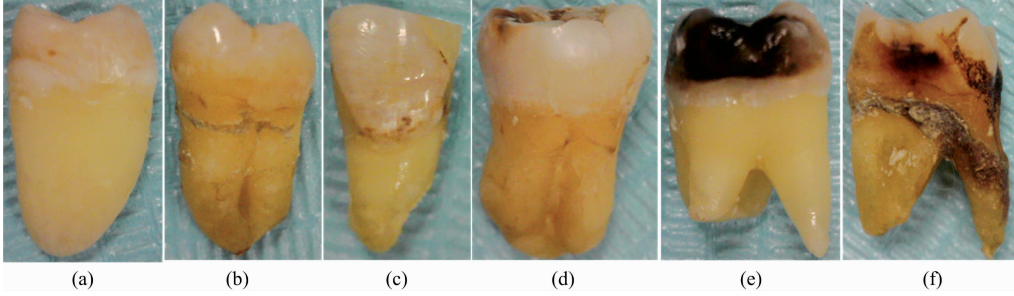


图 1 (a)–(f) 表示不同龋坏程度牙齿样本

Fig. 1 (a)–(f) represent the different decayed teeth

1.2 装置

实验装置系统由光源、不同龋齿损伤程度牙齿样本、偏振光谱仪构成，实验装置示意图如图 2 所示。

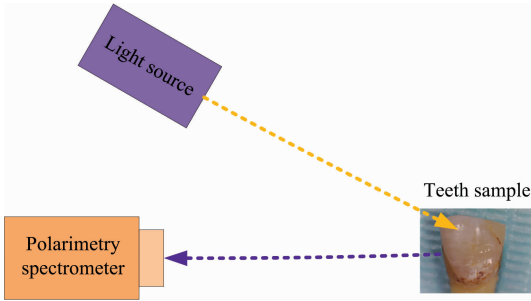


图 2 实验装置示意图

Fig. 2 The schematic of experimental device

其中，光源系统采用光谱稳定性较好的石英卤钨灯，THORLABS, QTH10/M；偏振光谱仪由光谱仪前置偏振片构成，基本工作过程为偏振片通过机械器件固定并可 360° 空间自由旋转，旋转最小角度间隔精度为 1°，光谱仪为 ASD 公司所产 FieldSpec HandHeld 2，有效波长范围为 350~1 050

$$P_{\theta} = T_{\theta} P T_{-\theta} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} P_1^2 + P_2^2 & (P_1^2 - P_2^2) \cos 2\theta & (P_1^2 - P_2^2) \sin 2\theta & 0 \\ (P_1^2 - P_2^2) \cos 2\theta & (P_1^2 + P_2^2) \cos^2 2\theta + 2P_1 P_2 \sin^2 2\theta & (P_1^2 - P_2^2) \sin 2\theta \cos 2\theta & 0 \\ (P_1^2 - P_2^2) \sin 2\theta & (P_1 - P_2)^2 \sin 2\theta \cos 2\theta & (P_1^2 + P_2^2) \sin^2 2\theta + 2P_1 P_2 \cos^2 2\theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2P_1 P_2 \end{pmatrix} \quad (2)$$

式(2)中当 $P_1 = 1$, $P_2 = 0$ 时，表示偏振片为理想完全偏振器，可得到偏振片透光轴相对参考轴旋转 θ 角度的矩阵表示形式如式(3)。

$$P_{\theta} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \cos 2\theta & \sin 2\theta & 0 \\ \cos 2\theta & \cos^2 2\theta & \sin 2\theta \cos 2\theta & 0 \\ \sin 2\theta & \sin 2\theta \cos 2\theta & \sin^2 2\theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

不同龋坏损伤程度的牙齿如图 1 所示。样品 a 为前磨牙颊侧，样品 b 为下磨牙舌侧，样品 c 为唇侧，样品 d 为磨牙，样品 e 牙冠发暗，样品 f 损伤严重并且牙冠中间颜色发暗，这六个不同龋坏程度样品基本涵盖了不同损伤等级的牙齿，从样品 a 至样品 f，牙齿损伤程度依次增大。

nm；偏振片为 Meadowlark 公司所产 GPM-100-UNC，消光系数响应有效波长范围为 300~2 700 nm；牙齿样品为不同龋齿损伤程度的牙齿样本组成。

实验系统设置在暗室内，避免杂散光的影响，卤钨灯光源照射到不同的牙齿样品上，偏振光谱仪探测牙齿样品的反射光谱信息。为有效探测牙齿样品牙冠的样品区域，偏振光谱仪前置了 1.2° 的孔径光阑，约束牙冠反射光谱探测区域，避免了非相关信息的干扰。实验过程中，固定光源与偏振光谱仪的相对位置，通过旋转不同偏振片透光轴角度，采集不同腐蚀损伤程度的牙齿样品的偏振光谱。

1.3 数据处理

偏振光属性可通过斯托克斯参数 $[S_0, S_1, S_2, S_3]^T$ 表征， S_3 表示圆偏振分量信息，量级微弱，在求解过程中暂不考虑其作用。斯托克斯参数可通过测量偏振片在三个不同角度取向的透射光求解。

牙齿样品反射光透过偏振片后，偏振光谱仪探测的光波斯托克斯矢量的偏振态传递链路可表示如式(1)所示。

$$S_{\text{out}} = M S_{\text{in}} \quad (1)$$

当偏振片透光轴方向与参考轴方向呈 θ 的旋转角度时，其穆勒矩阵 M 可表示如式(2)。

推理可得偏振光谱仪探测的牙齿样品反射光的光强如式(4)所得。

$$I_{\text{out}}(\theta) = \frac{1}{2} (I + Q \cos 2\theta + U \sin 2\theta) \quad (4)$$

由式(4)可知，输入三个不同偏振片旋转角度测得的光谱信息，可解得牙齿样品的斯托克斯参数 I , Q 和 U 。故设置旋转角度分别为 0°, 60° 与 120°。可得到如表达式(5)。

$$\begin{cases} I_{in} = \frac{2}{3} [I_{out}(0^\circ) + I_{out}(60^\circ) + I_{out}(120^\circ)] \\ Q_{in} = \frac{2}{3} [2I_{out}(0^\circ) - I_{out}(60^\circ) - I_{out}(120^\circ)] \\ U_{in} = \frac{2\sqrt{3}}{3} [I_{out}(60^\circ) - I_{out}(120^\circ)] \end{cases} \quad (5)$$

通过求解出不同牙齿样品的斯托克斯参数,可有效表征不同牙齿样品偏振度参量,其数学表示形式如式(6)。

$$DoLP = \frac{\sqrt{Q^2 + U^2}}{I} \quad (6)$$

2 结果与讨论

2.1 不同龋齿偏振光谱表征与分析

偏振光谱仪有效波长范围 350~1 050 nm,选择 450 nm(蓝光)、550 nm(绿光)、670 nm(红光)与 860 nm(近红外)四个波段对不同牙齿样品进行定量分析,以偏振度参量作为不同样品偏振光谱特征对比分析的指标。针对四个不同定量分

析波段,六个不同牙齿样本偏振度参量数据如图 3 所示,横坐标表示不同牙齿样本编号 1—6 分别对应图 1 中编号 a—f。

通过观察图 3 中不同龋坏程度牙齿样本不同波段偏振曲线的变化,可知偏振度对不同样本具有一定的辨识性。四个波段的实验结果表明,对同一观测波段随着牙齿龋坏程度的加深其偏振度表征参量呈现增加趋势。同时,对于同一观测样本 450 nm 波段的偏振特性强于其他波段,呈现出观测波段越短偏振特性越强的特性,说明借助偏振光谱可对不同龋坏损伤程度的牙齿样本进行有效的表征与区分。

探究不同龋坏程度牙齿样本呈现出偏振光谱差异原因。牙齿的牙釉质属于高度矿化的组织,具有较高的强度与硬度,不良饮食习惯或细菌侵入引起牙釉质软化脱矿,溶解硬组织构成了不同程度龋齿。由脱矿溶解形成不同龋齿的过程,牙齿组织的表面微观形态及牙釉质与牙本质对光波相位的改变均呈现差异。因此,通过探测牙齿样本偏振光谱特征可有效表征其不同龋坏程度。

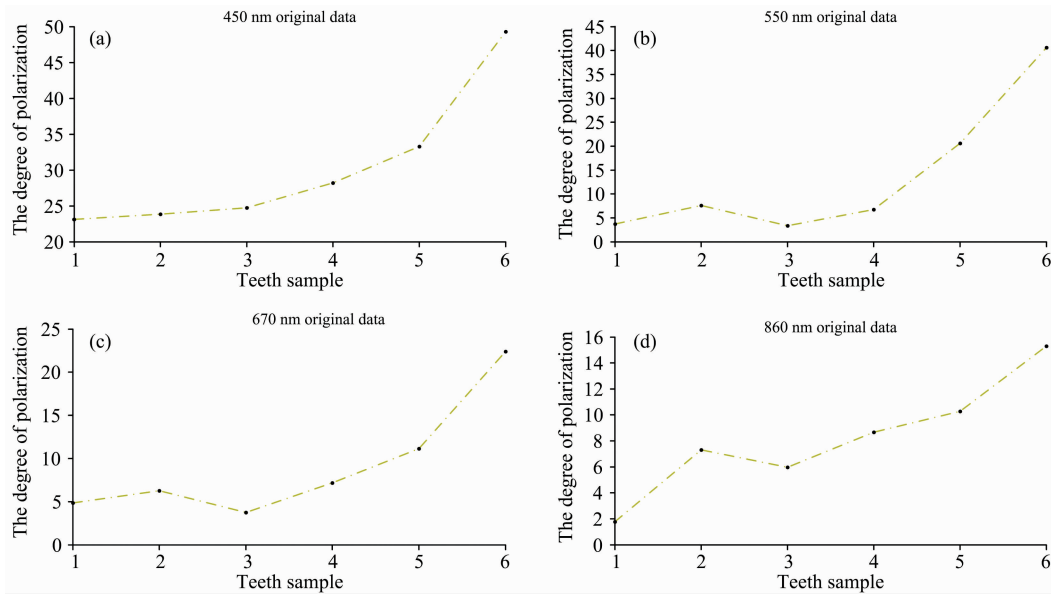


图 3 不同牙齿损伤样本偏振度参量表征

(a)—(d)分别对应 450, 550, 670 和 860 nm 波段

Fig. 3 The degree of polarization parameter characterization of different decay teeth sample

(a)—(d) data at the wavelength of 450, 550, 670, 860 nm, respectively

2.2 模型分析与定量评价

为更加定量刻画偏振光谱与牙齿龋坏损伤等级的表征关系,寻求构建数学模型去解译两者的内在耦合关联。针对选择的四个不同观测研究波段,构建偏振光谱特征参量与不同损伤等级牙齿样本的指数关联数学模型。

$$P = A \exp(BT) + C \exp(DT) \quad (7)$$

构建的数学模型中 P 表示偏振度参量,也即为式(6)中的 DoLP; T 表示不同龋齿损伤程度的牙齿样本, A , B , C 和 D 分别表示模型的参数。依据选择研究的不同波段的原始获取计算数据,对不同波段进行指数模型的构建与分析,模型的参数设置与关联分析见表 1,构建的指数模型仿真曲线与

实测曲线对比如图 4 所示。

通过对不同波段的模型参数 A , B , C 和 D 数值的设置,模型仿真与实测数据结果定量验证采用经典统计学方法,选取和方差(SSE)、模型确定系数(R-square)、均方根(RMSE)定量评价因子进行评判,模型参数与定量评判因子的具体数值如表 1 所示。

$$SSE = \sum_{i=1}^n \omega_i (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (8)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \omega_i (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (9)$$

$$R\text{-square} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n \omega_i (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n \omega_i (y_i - \bar{y})^2} \quad (10)$$

和方差越小,表明模型设置较好,预测数据更加准确;

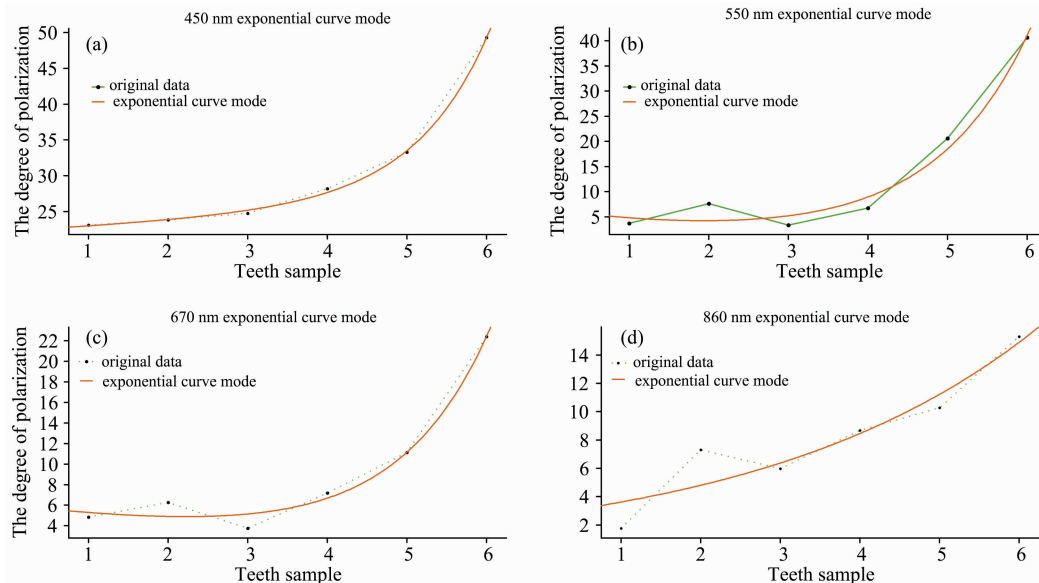


图 4 模型仿真结果与实测数据对比图

(a)–(d) 分别对应 450, 550, 670 和 860 nm 波段

Fig. 4 The contrast figure of the model simulated results and measured data

(a)–(d) corresponding the wavelength of 450, 550, 670, 860 nm

表 1 模型参数与定量评判因子

Table 1 the model parameters and the quantitative evaluation factors

波段/nm	模型参数				定量评判因子		
	A	B	C	D	SSE	R-square	RMSE
450	22.22	0.029 48	0.035 94	1.075	0.561 2	0.998 9	0.529 7
550	0.281 8	0.828 1	6.305	-0.412 3	25.34	0.976 2	3.56
670	5.913	-0.163 8	0.115 5	0.860 8	4.241	0.982 3	1.456
860	2.724	0.283 2	0	0	10.94	0.892 9	1.654

通过表 1 中定量评判因子数据可知,针对观测研究的四个不同波段构建的模型,均有效解译不同龋齿损伤程度牙齿样本的耦合关联,四个不同观测研究波段其模型确定系数均接近于 1,和方差与均方根数值均较小,且 450 nm 观测波段接近于 0,上述定量统计评判因子说明了构建模型的稳健性与有效性,说明了借助偏振光谱观测可有效表征牙齿龋齿损伤程度。

3 结 论

通过偏振光谱仪对不同龋齿损伤程度牙齿进行光谱偏振特性观测研究,选择了 450, 550, 670 和 860 nm 四个不同波

均方根为模型预测数据和原始数据误差的平方和均值的平方根,其数值越小,表明模型越合理;模型确定系数,通过数据的变化表征拟合的程度,该系数越接近于 1,表明模型的解译能力越强。

段进行定量分析。实验数据结果表明,对不同的龋齿程度样本通过偏振特性参量可有效进行区分与表征,并呈现同一观测光谱波段偏振度参量随着龋齿程度加深而增大趋势,同一测试样本波长与偏振特性呈负相关关系。同时,构建了有效数学模型解译光谱偏振特性与龋齿损伤程度的耦合关联,为有效验证模型的稳健性与有效性,通过定量评判因子进行分析。实验结果表明,构建的模型可有效解译不同龋齿损伤样本与其偏振特性的耦合关系。下一步的工作,将结合更多的牙齿样本进行更加细致的统计与模型分析。本文探索性的研究内容,揭示了偏振光谱应用到口腔牙齿龋齿损伤程度检测的有效性,在传统检测方法的基础上为牙齿龋齿损伤开辟光谱偏振检测的技术手段。

References

- [1] Sheiham A, James W P T. *Journal of Dental Research*, 2015, 94(10): 1341.
- [2] Christelle A N, Fabrice P, Hadi L, et al. *Journal of Biomedical Optics*, 2016, 21(7): 071103-1.
- [3] Frencken J E, Sharma P, Stenhouse L, et al. *Journal of Clinical Periodontology*, 2017, 44(S18): S94.
- [4] Pu Yuanyuan, Feng Yaoze, Sun Dawen. *Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety*, 2015, 14(2): 176.
- [5] WANG Shuang, Zeng Hai-shan(王 爽, Zeng Haishan). *Chinese Journal of Lasers(中国激光)*, 2018, 45(2): 0207002-1.
- [6] Orgiazzi A, Ballabio C, Panagos P, et al. *European Journal of Soil Science*, 2018, 69: 140.
- [7] LI Su-wen, MOU Fu-sheng, HU Li-sha, et al(李素文, 牟福生, 胡丽莎, 等). *Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析)*, 2019, 39(11): 3403.
- [8] Song Kaishan, Li Sijia, Wen Zhidan, et al. *Journal of Hydrology*, 2019, 579: 1.
- [9] Xie Qiaolin, Zeng Nan, Huang Yu, et al. *Biomedical Optical Express*, 2019, 10(7): 3269.
- [10] Liang Tianquan, Sun Xiaobing, Wang Han, et al. *Journal of Sensors*, 2016, 3569272: 1.
- [11] He C, Chang J T, Hu Q, et al. *Nat. Commun.*, 2019, 10(1): 4264. doi: 10.1038/s41467-019-12286-3.
- [12] Rubin N A, Aversa G D, Chevalier P, et al. *Science*, 2019, 365(6448): 1.

Research of Dental Caries Lesion Based on the Visible-Near Infrared Spectrum Polarization Detection

LIANG Tian-quan¹, DUAN Xiao-jie², TANG Qing-xin¹, YU Quan-zhou¹, ZHANG Bao-hua¹

1. School of Environment and Planning, Liaocheng University, Liaocheng 252059, China

2. Department of Stomatology, Liaocheng People's Hospital, Liaocheng 252000, China

Abstract In view of the problem to effectively characterize the damage of dental caries, we explore a kind of polarization spectrum detection method which have nondestructive and low consumption characteristics, it's a beneficial to supplement for the conventional detected methods such as chemical analysis, surface profilometry and microradiography. Based on the characteristic which polarization spectral sensitive to the observation sample surface microstructure, dental caries lesion due to the demineralization process, as result calcium and phosphate are dissolved from the enamel and dentin. The tooth surface microstructure has taken place different change; the structure present different degree of difference in light scattering properties and phase change. Considering different dental caries samples its surface microstructure changes strongly associated with the polarization information, we put forward a kind of method which can effectively characterize different teeth from caries by using polarization spectrum. Selected the 450, 550, 670 and 860 nm as four different observation research wavelengths, as well as selected six different dental caries samples, the degree of polarization as the parameter to describe different samples polarization characteristics. The experimental results show that the consistent observation waveband for different tooth samples is positively related to the degree of polarization parameters, as well as the same observation samples showed observation waveband is negatively related to the polarization characteristics. For further quantitative characterization, the relationship between polarization spectrum and tooth decay damage levels, the index correlation mathematical model which can interpret internal coupling was built. To effectively validate model robustness, it needed quantitative validation the model simulation results and measured data. We selected the quantitative evaluation factor such as the sum of squares due to error (SSE), root means squared error (RMSE), coefficient of determination (R-square). The results show that models R-square close to 1, as well as the SSE and RMSE values are small. The model characteristic of robustness and effectiveness was verified, which can effectively interpret different caries damage teeth samples from polarization coupling relation. This research is effectively extending the teeth caries detection method, as well as revealed polarization spectrum can be effective characterization and distinction to different dental caries samples. It is also developing a new kind of nondestructive and low-cost polarization spectrum detection technology.

Keywords Polarization spectrum; Dental caries; Model; Quantitative evaluation