

基于最小二乘法的动态光谱补偿拟合提取

林 凌, 武若楠, 李永城, 周 梅, 李 刚*

天津大学精密测量技术及仪器国家重点实验室, 天津 300072

摘 要 高信噪比的动态光谱(dynamic spectrum, DS)提取是实现高精度动态光谱血液成分无创检测的一个关键。为了进一步提高提取的精度和速度,从原理上分析了各单波长光电容积脉搏波(photoelectric plethysmography, PPG)的线性相似性,并基于此性质提出了补偿拟合法:首先按照 PPG 单周期采样点数进行滑动平均得到漂移基线进行补偿,除去基线漂移;其次用各波长对数 PPG 与全波长叠加平均模板 PPG 进行最小二乘拟合,提取一次项系数构成 DS。利用拟合提取法对近红外和可见光波段各 25 组 PPG 数据样本进行 DS 提取实验验证,并将结果与单沿提取法进行平滑性指标的对比,结果表明:近红外和可见光波段补偿拟合法获取 DS 的平均方差分别为单沿提取法的 77.9% 和 59.5%,稳定提高了 DS 的平滑性;近红外和可见光波段补偿拟合法处理时间分别可以达到单沿提取法的 10% 和 20%,处理速度得到显著改善。补偿拟合法在单沿提取法的基础上稳定提高了 DS 的信噪比,改善了 DS 提取质量,缩减了提取时间,并简化了处理步骤,有望推动 DS 无创血液成分检测的发展。

关键词 动态光谱(DS); 血液成分无创检测; 补偿拟合提取; 光电容积脉搏波(PPG); 最小二乘法

中图分类号: TH744.1 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2014)07-1973-05

引 言

由于传统的有创血液成分检测手段存在痛感和感染风险、成本高且效率低等缺点,无创检测成为近年来生物医学领域的研究热点,其中基于近红外光谱的无创血液成分检测技术由于其快速、高精度、低成本并可实现实时测量多种成分等优势倍受青睐,是目前最有应用前景的检测手段^[1-4]之一。

经过国内外各研究小组数十年的发展,近红外光谱法用于离体血液标本的实验已经获得了较高的检测精度,而在体测量因个体差异、建模复杂、信号微弱等因素的影响,测量结果精度受到了极大影响。针对这一问题,日本学者 Yamakoshi 等借鉴脉搏血氧仪原理搭建了脉搏血糖仪来提取脉动血液的近红外光谱,并利用多种化学计量学方法取得不错的建模效果^[5]。丁海泉、陈星旦等提出了光谱相减法,并验证这种方法能够抑制甚至消除组织背景的干扰,有望提高无创生化检测的精度^[6]。徐可欣等基于近红外漫反射光谱的特性提出了浮动基准理论,利用漫反射光下不随葡萄糖浓度变化的空间特定基准位置或特定基准波长来消除组织背景干扰,

并通过理论分析和实验验证了该方法的有效性^[7]。

作者所在的课题组提出了动态光谱血液成分无创检测方法,利用动脉血液充盈、收缩的脉动现象在体无创获取脉动动脉血液吸收光谱,进而分析血液成分,理论上可以消除个体差异,降低对系统的要求和建模难度,提高血液成分的检测精度。课题组提出的一系列提取方法主要分为两大类:频域提取法和时域提取法^[8];其中,频域方法需要较长的采样时间且易受运动伪差的影响,时域方法比频域方法具有更好的适应性,对系统要求更低,但处理过程复杂,耗时较长,仍需要进一步改善。为此,本文基于脉搏波的相似特性提出了基于最小二乘法的动态光谱补偿拟合提取方法。

1 原理和方法

1.1 动态光谱基本原理

近红外和可见光经过指端衰减后,透射光经光谱仪分光可以获得含有脉动动脉血液和其他组织背景信息的 PPG 信号,从 PPG 中顺序提取各单波长对应脉动动脉血液的吸光度或其等价量组成的光谱即为动态光谱。光线传播过程中,可以将由皮肤、皮下组织、静脉血液和非脉动动脉血液衰减

收稿日期: 2013-09-16, 修订日期: 2014-01-20

基金项目: 国家自然科学基金项目(30973964),天津市应用基础及其前沿技术研究计划项目(11JCZDJC17100)资助

作者简介: 林 凌,女,1961年生,天津大学精密仪器与光电子工程学院教授 e-mail: linling@tju.edu.cn

* 通讯联系人 e-mail: ligang59@tju.edu.cn

后的光看作是脉动动脉血液的入射光, 光强为 I_{I1} ; 经脉动动脉血液衰减后得到光强周期变化的出射光, 光强为 I_{I2} , 如图 1 所示。

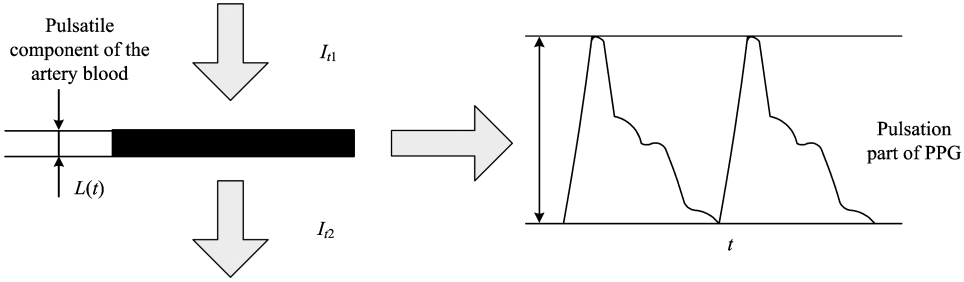


Fig. 1 Optical absorption of pulsating arterial blood

PPG 信号中透射光光强的周期变化由脉动动脉血液层厚度的周期变化而产生, 根据修正的朗伯比尔定律, 可以得到脉动动脉血液吸光度, 如式(1)所示。

$$A(t) = \lg(I_{I1}/I_{I2}) = \lg(I_{I1}) - \lg(I_{I2})$$

$$= 0.434 \left(\sum_{i=1}^n \epsilon_i c_i \right) L(t) \quad (1)$$

式中, ϵ 为脉动动脉血液中第 i 种成分的消光系数, c_i 为第 i 种成分的浓度, $L(t)$ 为脉动动脉血液层中光子的平均行程, 随时间 t 变化。动态光谱理论上仅含脉动动脉血液信息, 消除了个体差异产生的影响, 降低了建模难度, 提高了模型质量和预测精度, 最终改善了无创血液成分检测的测量精度。

1.2 动态光谱提取方法

动态光谱数据处理的目的是从采集的 PPG 原始数据中提取高信噪比 DS。频谱提取法利用各单波长 PPG 信号的基波幅值代替峰峰值反映不同波长下的脉动动脉血液吸光度关系, 提取过程可以看作窄带滤波, 能有效抑制随机噪声。时域方法基于统计与误差理论, 通过叠加平均原理和粗大误差的剔除抑制随机噪声, 减小运动伪差的影响。两类方法都能够在原始信号的基础上提高信噪比, 但频域提取法的离散傅里叶变换要求较长的采样时间, 且易受运动伪差的影响; 而时域方法虽然对采样时间要求不高, 但处理过程复杂。目前, 对于平稳高信噪比的脉搏波, 时域方法和频域方法都能得到高质量 DS, 且对随机噪声的抑制效果也较好, 但运动伪差的存在则会导致 DS 质量的明显下降。为降低各 DS 提取方法对脉搏波信噪比的依赖性, 两类方法都需要进一步完善。

1.3 补偿拟合法提取原理

各单波长的 PPG 信号具有相似性, 根据修正的朗伯比尔定律可以证明任意两个单波长的 PPG 之间存在线性变换。对同一样本任取两个波长 λ_1 和 λ_2 下的 PPG, 根据修正的朗伯比尔定律可得相应透射光吸光度, 如式(2)和式(3)所示。

$$\lg(I_{I1}^{\lambda_1}) = \lg(I_{I0}^{\lambda_1}) - \left[0.434 \left(\sum_{i=1}^n \epsilon_i^{\lambda_1} c_i^{\lambda_1} \right) L(t) + K^{\lambda_1} \right] \quad (2)$$

$$\lg(I_{I1}^{\lambda_2}) = \lg(I_{I0}^{\lambda_2}) - \left[0.434 \left(\sum_{i=1}^n \epsilon_i^{\lambda_2} c_i^{\lambda_2} \right) L(t) + K^{\lambda_2} \right] \quad (3)$$

式中: $I_{I1}^{\lambda_1}$ 和 $I_{I1}^{\lambda_2}$ 分别为波长为 λ_1 和 λ_2 的透射光光强; $I_{I0}^{\lambda_1}$ 和 $I_{I0}^{\lambda_2}$ 分别为波长为 λ_1 和 λ_2 的入射光光强; K^{λ_1} 和 K^{λ_2} 为组织背景对两种波长入射光的衰减作用, 表现为脉搏波中的背景成分,

一定时间内可以看作常数; $0.434 \left(\sum_{i=1}^n \epsilon_i^{\lambda_1} c_i^{\lambda_1} \right) L(t)$ 和 $0.434 \left(\sum_{i=1}^n \epsilon_i^{\lambda_2} c_i^{\lambda_2} \right) L(t)$ 为脉动动脉血液的衰减作用, 表现为脉搏中的交流成分, 由于脉动动脉血液层很薄, 散射作用可以忽略不计; $L(t)$ 为随时间 t 变化的脉动动脉血液层的平均光程长。由此可知交流成分的波形存在线性相似性。当两个波长的入射光光强恒定时, 联立可得线性关系如式(4)和式(5)所示。

$$\lg(I_{I1}^{\lambda_2}) = a \lg(I_{I1}^{\lambda_1}) + b \quad (4)$$

$$a = \left(\sum_{i=1}^n \epsilon_i^{\lambda_2} c_i^{\lambda_2} \right) / \left(\sum_{i=1}^n \epsilon_i^{\lambda_1} c_i^{\lambda_1} \right) \quad (5)$$

因此时域中任意波长的脉搏波理论上都可以通过线性变换得到任意另一波长下的脉搏波, 并且该线性变换的一次项系数 a 仅含有血液成分信息。对于所有波长下 PPG 叠加平均得到的模板 PPG, 如式(6)所示。

$$\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \lg(I_{I1}^{\lambda_j}) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \lg(I_{I0}^{\lambda_j}) - \left\{ 0.434 \left[\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \left(\sum_{i=1}^n \epsilon_i^{\lambda_j} c_i^{\lambda_j} \right) \right] L(t) + \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m K^{\lambda_j} \right\} \quad (6)$$

式中: m 为波长总数。基于叠加平均原理, 信噪比更高的全波长 PPG 可以作为 PPG 模板。同样可得任一波长 λ_j 下的 PPG 信号与模板 PPG 之间的线性关系, 如式(7)和式(8)所示。

$$\lg(I_{I1}^{\lambda_j}) = a_j \left[\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \lg(I_{I1}^{\lambda_j}) \right] + b \quad (7)$$

$$a = \left(\sum_{i=1}^n \epsilon_i^{\lambda_j} c_i^{\lambda_j} \right) \left[\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \left(\sum_{i=1}^n \epsilon_i^{\lambda_j} c_i^{\lambda_j} \right) \right] \quad (8)$$

以模板对数 PPG 值为横坐标, 以任一单波长对数 PPG 作为纵坐标作散点图可以验证这一线性关系, 如图 2 所示。

因此, 单波长 PPG 信号与模板 PPG 之间最小二乘拟合的一次项系数能够反映脉动动脉血液之间的吸光度比例关系, 提取相应的一次项系数可以组成动态光谱。

线性相关系数, 或称皮氏积矩相关系数, 是衡量两个随机变量之间线性相关程度的指标, 当两个向量对应元素之间完全满足同一个线性关系时, 他们的线性相关系数为 1(完全正相关)或 -1(完全负相关)。理论上, 交流信号只含有血液信息、且忽略脉动动脉血液散射作用的各单波长 PPG 与模

板 PPG 之间的线性相关系数反映了各波长脉动血液的等效吸光度。实际 PPG 采集时导致相关性下降主要来自散射作用、噪声及基线漂移的影响,其中伪差造成的影响最为明显,因此在进行最小二乘拟合之前应进行基线补偿,减小运动伪差的影响。

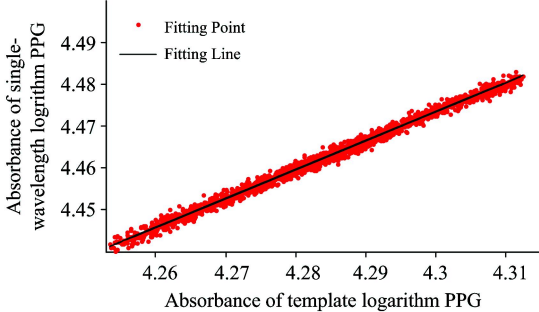


Fig. 2 The linearity between full-wavelength and mono-wavelength PPG

1.4 采样平均基线补偿

利用三次样条差值进行脉搏波基线漂移是一种有效的途径^[9],考虑到采样点数众多,每个周期内都含有数十个采样点,使用样条插值的方式获得补偿值的处理方法较繁琐,本文提出一种新的补偿方法——采样平均补偿。为了对基线漂移进行补偿,首先要得到脉搏波的基线。对于理想情况下只含有脉动动脉血液信息的脉搏波交流信号,波形上任意一点为中心、一个周期范围内的所有点的均值应当为零。因此,如图 3 所示,以任一点为中心进行宽度为一个周期的采样平均所得的结果就是该点的补偿值,所有点的补偿值构成对数 PPG 的基线,原对数 PPG 减去基线即获得对数 PPG 中包含动脉血液成分信息的交流信号。

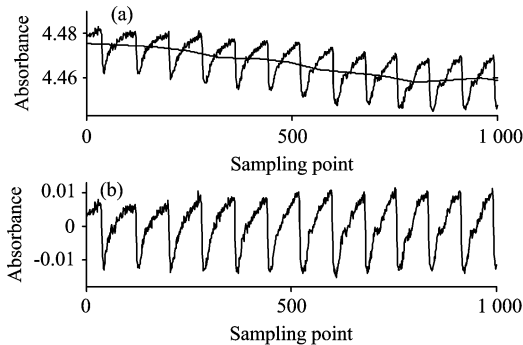


Fig. 3 The process of removing baseline
(a): the logarithm PPG before removing baseline ;
(b): the logarithm PPG after removing baseline

1.5 动态光谱拟合提取

经过基线补偿可以得到各单波长的交流对数 PPG 信号,进行叠加平均得到高信噪比的模板对数 PPG 作为模板。以模板对数 PPG 为自变量,各单波长交流对数 PPG 信号为因变量进行最小二乘拟合获取一次项系数。提取各单波长交流对数 PPG 信号对应的一次项系数顺次排列组成拟合提取 DS。

2 结果与讨论

为实际验证动态光谱拟合提取法的性能,以某医院重症监护室的 25 名病人作为被测对象,在知情和自愿的情况下利用动态光谱数据采集系统获取 25 组原始数据,其中每组包含可见光和近红外两个波段的原始数据,并以手指前端作为被测部位。动态光谱数据采集系统主要由光源、光谱仪、计算机三个主要部分构成。光源采用飞利浦 50 W 的普通卤素灯;以两台光谱仪作为数据采集的核心单元,分别是 Avantes 公司的 AvaSpec-NIR256-1.7TEC 近红外光谱仪(探测范围 900~1 750 nm,信噪比 2 000 : 1,积分时间 30 ms,连续采集 30 s)和 AvaSpec-HS1024x58TEC-USB2 光谱仪(内置制冷型背照式 CCD 探测器,探测范围 200~1 160 nm,信噪比 1 000 : 1,积分时间 10 ms,连续采集 20 s);测试前将仪器打开预热 15 min,数据采集过程中测试者将被测对象手指尖端置于光纤入口处并尽量保持接触压力恒定;数据采集完成后经 USB 传至计算机保存。

单沿提取法是时域提取法中最具有代表性的一种方法,因此将新提出的补偿拟合法与之进行对比,使用平滑性指标对 DS 质量进行评价。由于血液中的物质在紫外光、可见光和近红外波段都是宽吸收谱带,光谱中不存在突变,因此血液吸收光谱相邻波长之间变换缓慢,DS 在理论上是一条平滑的曲线。而干扰和噪声的大小和方向则是随机的,它们使光谱曲线变得粗糙,导致平滑性降低。由此,DS 的平滑性在一定程度上反映信噪比的高低。在进行 DS 平滑性的评价时,首先采用 Savitzky-Golay 平滑滤波器对曲线进行平滑^[10];将平滑的结果看作是理想的光谱真值,用它和原曲线对应点差值组成的误差列的方差表征原曲线的平滑性,方差越小说明平滑性越好。为了保证对比结果可靠,两种方法都进行了一致的预处理,即采样平均补偿。

对两个波段各 25 个样本分别使用单沿提取法和补偿拟合法进行动态光谱提取,计算平滑性指标进行对比分别如图 4 和图 5 所示。

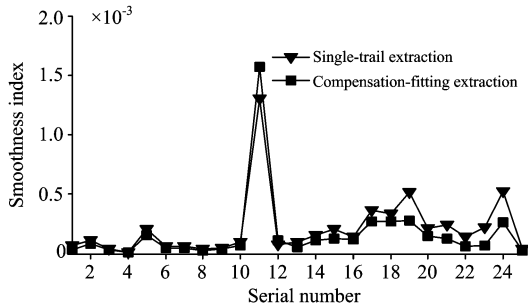


Fig. 4 Smoothness of DS estimated by single-trial and compensation-fitting method in NIR band

平滑性指标可以反映 DS 的信噪比和提取方法的去噪效果。图 4 和图 5 中方差曲线的对比显示补偿拟合提取法得到的动态光谱的平滑性整体优于单沿提取法。在近红外波段,单沿提取法得到的方差平均值为 0.000 213,补偿拟合提取

法得到的方差平均值为 0.000 166, 是单沿提取法的 77.9%; 在可见光波段, 单沿提取法得到的方差平均值为 0.000 007 40, 补偿拟合提取法得到的方差平均值为 0.000 004 40, 是单沿提取法的 59.5%。这表明补偿拟合提取法获取的 DS 的信噪比高于单沿提取法, 补偿拟合提取法比单沿提取法具有更强的去噪效果。

此外, 本文对两种方法的处理速度进行了比较; 对同一样本近红外波段的原始数据进行处理, 单沿提取法的平均处理时间为 3.69 s, 补偿拟合法为 0.383 s, 为单沿提取法的 10%; 对于可见光波段单沿提取法的平均处理时间为 18.98 s, 补偿拟合法为 4.33 s, 为前者的 20%。这说明补偿拟合法比单沿提取法显著缩短了处理时间, 具有更高的处理效率。

3 结 论

基于 PPG 信号相似性, 本文中提出了一种顺次提取各单波长 PPG 信号与模板 PPG 之间最小二乘拟合的一次项系数构成 DS 的补偿拟合法。该方法在拟合前进行基线补偿减小了基线漂移的影响, 并基于最小二乘法拟合的平均效应显著抑制了随机误差, 相比其他时域方法操作显著简化。对 25 组近红外和可见光波段数据样本分别采用单沿提取法和补偿拟合提取法进行 DS 提取并以 DS 平滑性为指标对比, 结果表明补偿拟合提取法可以快速提取高信噪比的动态光谱, 比单沿提取法表现出更明显的优势, 有望提高基于动态光谱的无创血液检测精度。

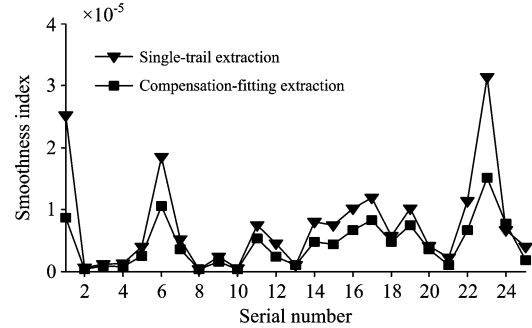


Fig. 5 Smoothness of DS estimated by single-trial and compensation-fitting method in VIS band

References

[1] Furukawa, Fukuda T. Biomedical Optics Express, 2012, 3(10): 2587.

[2] Ciudin A, Hernandez C, Simo R. Curr. Diabetes. Rev., 2012, 8: 48.

[3] Olesberg J T, Arnold M A, Mermelstein C, et al. Applied Spectroscopy, 2005, 59(12): 1480.

[4] CHEN Xing-dan, GAO Jing, DING Hai-quan(陈星旦, 高 静, 丁海泉). Chinese Optics(中国光学), 2012, 5(4): 317.

[5] Yamakoshi Y, Ogawa M, Yamakoshi T, et al. IEEE Engineering in Medicine and Biology Society, 2009, 126.

[6] LUO Yun-han, CHEN Zhe, CHEN Xing-dan(罗云瀚, 陈 哲, 陈星旦). Optics and Precision Engineering(光学精密工程), 2008, 16(5): 78.

[7] JIANG Jing-ying, GONG Qi-liang, XU Ke-xin(蒋景英, 龚启亮, 徐可欣). Nanotechnology and Precision Engineering(纳米技术与精密工程), 2012, 10(2): 142.

[8] Zhou Mei, Li Gang, Lin Ling. Jornal of Biomedical Optics, 2013, 18(5).

[9] YANG Lin, ZHANG Song, YANG Yi-min, et al(杨 琳, 张 松, 杨益民, 等). Beijing Biomedical Engineering(北京生物医学工程), 2010, 29(2): 198.

[10] CAI Tian-jing, TANG Han(蔡天净, 唐 瀚). Digital Communication(数字通信), 2011, 1(17): 63.

Compensation-Fitting Extraction of Dynamic Spectrum Based on Least Squares Method

LIN Ling, WU Ruo-nan, LI Yong-cheng, ZHOU Mei, LI Gang*

State Key Laboratory of Precision Measurement Technology and Instruments, Tianjin University, Tianjin 300072, China

Abstract Extraction method for dynamic spectrum (DS) with a high signal to noise ratio is a key to achieving high-precision noninvasive detection of blood components. In order to further improve the accuracy and speed of DS extraction, linear similarity between photoelectric plethysmographys (PPG) at each two different wavelengths was analyzed in principle, and an experimental verification was conducted. Based on this property, the method of compensation-fitting extraction was proposed. Firstly, the baseline of PPG at each wavelength is estimated and compensated using single-period sampling average, which would remove the effect of baseline drift caused by motion artifact. Secondly, the slope of least squares fitting between each single-wavelength PPG and full-wavelength averaged PPG is acquired to construct DS, which would significantly suppress random noise. Contrast experiments were conducted on 25 samples in NIR wave band and Vis wave band respectively. Flatness and processing time of DS using compensation-fitting extraction were compared with that using single-trial estimation. In NIR band, the average variance using compensation-fitting estimation was 69.0% of that using single-trial estimation, and in Vis band it was 57.4%, which shows that the flatness of DS is steadily improved. In NIR band, the data processing time using compensation-fitting extraction could be reduced to 10% of that using single-trial estimation, and in Vis band it was 20%, which shows that the time for data processing is significantly reduced. Experimental results show that, compared with single-trial estimation method, dynamic spectrum compensation-fitting extraction could steadily improve the signal to noise ratio of DS, significantly improve estimation quality, reduce data processing time, and simplify procedure. Therefore, this new method is expected to promote the development of noninvasive blood components measurement.

Keywords Dynamic spectrum (DS); Noninvasive blood compositions measurement; Photoelectric plethysmography (PPG); Compensation-fitting extraction; Least squares method

(Received Sep. 16, 2013; accepted Jan. 20, 2014)

* Corresponding author