

动态光谱检测中的相移波形误差分析

王焱^{1,2}, 李刚^{1*}, 林凌¹, 刘玉良¹

1. 天津大学精密仪器及光电子工程学院, 天津 300072

2. 辽宁工程技术大学, 辽宁 阜新 123000

摘要 动态光谱提取自光电容积脉搏波,是与动脉血液信息高度相关的近红外光谱,可应用于动脉血液成分的无创检测,具有很好的临床应用价值。文章依据动态光谱检测理论,对检测过程中的相移波形误差进行了分析。人体正常生理活动可导致光电容积脉搏波的周期、幅值和基线的不稳定。同时在动态光谱时域检测过程中,不同波长下检测到的脉搏波间存在一定的相位延迟。以上两个因素将导致不同波长对应的脉搏波之间存在一定的波形差异,从而使其频谱发生改变,在动态光谱中引入相移波形误差。文章对该相移波形误差进行了量化分析。结果表明,该误差与截取脉搏周期的矩形窗位置相关。通过精选矩形窗位置,可以将相移波形误差降低一个数量级。

关键词 动态光谱;光电容积脉搏波;FFT;误差分析

中图分类号: O657.3 **文献标识码**: A **文章编号**: 1000-0593(2007)08-1506-04

引言

血液成分检测是常规临床检测项目之一,近红外无创血液成分检测技术可实现无创、连续、实时监测,具有很好的临床应用价值,成为国际上的研究热点之一^[1-6]。但是,诸多关键性的问题限制了该方法的实际应用。主要问题之一是无法确认所检测的信号响应的是哪些组织的成分,该信号是否表达血液成分的浓度^[7]。动态光谱检测方法^[8-12]是从光电容积脉搏波中提取光谱信号,所获取的光谱信息与动脉血液成分浓度高度相关,有望实现动脉血液成分的近红外无创检测。

在动态光谱检测过程中,光电容积脉搏波各脉搏的振幅和周期的不稳定,成为动态光谱信息提取过程中的主要误差源之一。本文针对动态光谱检测信号预处理中的相移波形误差进行了讨论,并给出了削减该误差的方法。

1 动态光谱检测理论

根据动态光谱检测理论,采用动态光谱提取血液成分,可遵循以下步骤:(1)采用光电容积脉搏波描记法获得各波长下的光电容积脉搏波;(2)根据动态光谱定义,各个单波

长对应的单个光电容积脉搏波周期上吸光度的最大值与最小值的差值 ΔOD 构成的光谱就是动态光谱;(3)基于修正的朗伯-比尔定律,采用化学分析方法提取血液成分浓度信息^[13]。其检测原理见公式(1)^[8]

$$\Delta OD_i = \lg\left(\frac{I_{0i}}{I_{imin}}\right) - \lg\left(\frac{I_{0i}}{I_{imax}}\right) = \lg\left(\frac{I_{imax}}{I_{imin}}\right) = 0.434[\ln(I_{imax}) - \ln(I_{imin})] \quad (1)$$

式中, ΔOD_i , I_{0i} , I_{imax} , I_{imin} 分别为波长*i*对应的脉动脉血液吸光度、入射光强、最大出射光强(光电容积脉搏波峰值)、最小出射光强(光电容积脉搏波谷点值)。由于脉搏波的基线和周期很不稳定,直接从光电容积脉搏波的时域信号中提取 I_{imax} 和 I_{imin} 将带来较大的误差,因此采用频域信号进行信息提取^[14]。式(1)表明,光电容积脉搏波*I*取对数后 $\lg(I)$ 的峰峰值即为组成动态光谱的吸光度幅值。由于傅里叶变换具有线性特性,且不同波长下脉搏波是几何相似的,可以用脉搏波的基波分量替代峰峰值。

动态光谱检测方法可分为时域分光 and 空域分光两类,其中,时域分光法可通过 AOTF 或电控单色光源组(发光二极管或激光管)将单色光分时循环入射到组织中;空域分光法可通过光栅等分光器件,对从组织透射或反射的出射光进行分光。时域分光方法,尤其是采用电控单色光源组时,由于

收稿日期: 2006-04-02, 修订日期: 2006-06-28

基金项目: 国家自然科学基金项目(60174032)资助

作者简介: 王焱, 1970年生, 天津大学精密仪器及光电子工程学院生物医学工程系副教授 e-mail: fortunate_w@163.com

* 通讯联系人 e-mail: ligang59@tju.edu.cn

是单色光入射，每个波长的入射光强可以比空域分光方法中的单波长光强强很多，从而增强了检测信号强度，这对于信号十分微弱的近红外无创检测系统具有十分重要的意义。但是，时域分光系统中采用一组单色光分时入射，不同波长下检测到的脉搏波间具有相位延迟。

由于人体脉搏波的基线、幅值和周期总是在一定范围内变化的，不同的脉搏周期内波形不可能完全一致，脉搏波间的相移会导致不同波长脉搏波的波形发生变化，从而使频谱发生改变，在傅里叶变换过程中引入附加误差，称为相移波形误差。

采用多个脉搏周期的长时间采样序列进行 FFT 计算，误差较大(关于这一点，将另外行文进行讨论)，本文采用单个脉搏周期内的采样序列进行分析，即截取窗长度为一个脉搏周期，以减少基线漂移等低频干扰、各脉搏间波形差异等带来的误差。为了简化说明，下文提及的脉搏波均为对脉搏波取对数后所得波形。

2 动态光谱检测中的相移波形误差

2.1 相移波形误差

设 I_j 为一组采用时域扫描方法获得的光电容积脉搏波，波长个数为 M ，采样频率为 f ，为了简化讨论，设各波长脉搏波幅值相同，时域脉搏形状相同。令 $\hat{I}_j = \ln(I_j)$ ，则其傅里叶变换为

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} \hat{I}(t) dt \quad (2)$$

对应于第 j 个波长脉搏波采样点序列 $\{\hat{I}_{j,n}\}$ 的离散傅里叶变换为

$$X_j(k) = F(\hat{I}_{j,n}) \sum_{n=0}^{N-1} \hat{I}_{j,n} e^{-i\frac{2\pi k n}{N}}, \quad k = 0, 1, \dots, N-1; j = 1, 2, \dots, M \quad (3)$$

式中， $\hat{I}_{j,n}$ 为第 j 个脉搏波中第 n 个采样点的对数值； N 为一次计算所使用的采样点个数，即从连续脉搏波中截取脉搏的矩形窗长度； M 为不同波长脉搏波个数。其基波分量为

$$X_j(1) = \sum_{n=0}^{N-1} \hat{I}_{j,n} e^{-i\frac{2\pi n}{N}}$$

不同波长脉搏波间最大相移为第一和第 M 个脉搏波间的相移，其值为

$$\Delta\varphi_{\max} = \frac{1}{f} \times \frac{M-1}{M} \quad (4)$$

当 $M \gg 1$ 时， $\Delta\varphi_{\max} \approx \frac{1}{f} = T$ ，脉搏波间的相移达到最大，其引起的波形误差也达到最大值。此时最后一个脉搏波的窗口为第一个脉搏窗口向后顺延一个采样周期，即 $\hat{I}_{M,n} = \hat{I}_{1,n+1}$ ，则有

$$X_M(1) = \sum_{n=0}^{N-1} \hat{I}_{M,n} e^{-i\frac{2\pi n}{N}} = \sum_{n=0}^{N-1} \hat{I}_{1,n+1} e^{-i\frac{2\pi n}{N}} \quad (5)$$

对于第 M 个脉搏波，窗内最后一个采样点 $\hat{I}_{M,N-1} = \hat{I}_{1,N}$ ($\hat{I}_{1,N}$ 为下一个脉搏周期的第一个采样点)。

定义：由不同波长脉搏波之间的相移导致的波形变化引起的误差为相移波形误差，且 $X_M(1)$ 与 $X_1(1)$ 之差的绝对值为在采样率 f 下，该窗口位置所对应的最大相移波形误差，

记为

$$MPSE = |X_M(1) - X_1(1)| \quad (6)$$

2.2 平稳周期信号的相移波形误差

将一个满足 Nyquist 采样定律的脉搏信号进行周期延拓(如图 1 所示)，所产生的脉搏波为严格的平稳周期信号，且为整周期采样。

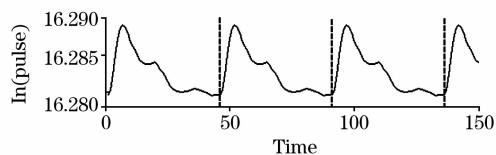


Fig. 1 The period extension of photo-electric pulse wave

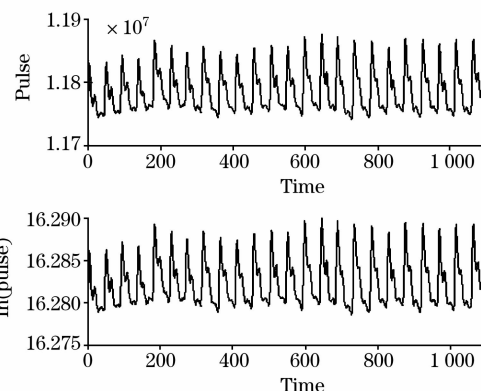


Fig. 2 Sample of photo-electric pulse wave

将窗口位置向后平移一个采样周期，此时 $\hat{I}_{1,N} = \hat{I}_{1,0}$ 。根据傅里叶变换的相移特性， $\hat{I}_{n+1} \leftrightarrow e^{-i\omega T} F(\hat{I}_n)$ ，其频域能量分布不随窗口位置变化，不存在由于相移导致的波形误差。

2.3 非平稳脉搏波相移波形误差

人体正常脉搏波中，振幅、周期、基线的干扰总是存在的，不可能获得平稳周期信号。图 2 所示脉搏波为平静状态下平卧健康青年男性的指端光电容积脉搏波，其采样频率为

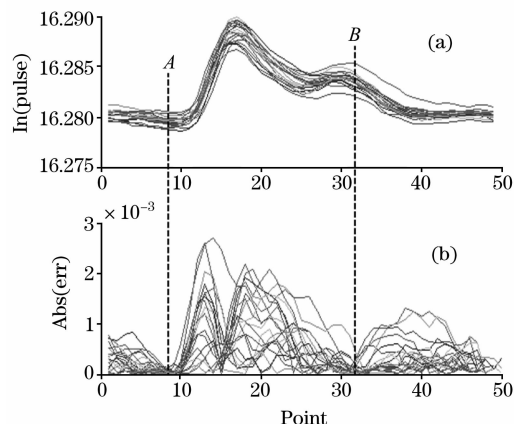


Fig. 3 The phase shift error according to different start point of the window

(a): Photo-electric pulse waves of different pulse periods;
(b): Phase shift error

f , 含有 23 个完整脉搏周期。以该脉搏波为实验的样本数据, 对相移波形误差进行量化分析。在相移误差最大情况下 ($\tilde{I}_{M,n} = \tilde{I}_{1,n+1}$), 逐点移动矩形窗位置, 计算最大相移波形误差。

(1) 寻找每个脉搏主波上升支起始点 $p_i (i = 1, 2, \dots, P + 1)$, P 为脉搏波个数; (2) 选取第 $p_i - 10 (i = 2, 3, \dots, P)$ 点为每个矩形窗起始点, 以 $[p_i, p_{i+1}]$ 闭区间采样点数为矩形窗长度, 如图 3(a) 所示。其中最大矩形窗长度为 N_m ; (3) 对所截取的每个脉搏做 FFT 变换, 提取其基波分量组成列向量 \mathbf{a}_i ; (4) 将每个矩形窗起始点向后移动一个采样点, 重复第 3 步, 获得 N_m 个列向量 \mathbf{a}_n ; (5) 计算每个矩形窗位置对应的最大相移波形误差 $MPSE = \{\mathbf{a}_{n_{p+1}} - \mathbf{a}_{n_p}\}_{(P-1) \times (N_m-1)}$ 。图 3(b) 描述 MPSE 行向量, 横坐标为所选取矩形窗的起始点位置。

3 讨 论

由图 3(b) 可知, 当采用图 2 所示脉搏波样本数据时, 截取脉搏周期的窗口位置不同, 相移波形误差的差异很大, 且随窗口位置不同有明显的变化。其中最大相移波形误差为 2.80×10^{-3} , 平均相移波形误差为 4.31×10^{-4} 。当脉搏起始点选取在图 3(b) 中虚线 A 所示位置时, 相移波形误差达到最小, 其最大值为 1.57×10^{-4} , 平均值为 6.96×10^{-5} , 均比随机选取起始点情况小一个数量级。

究其原因, 由于移动窗口位置后, 窗口最后一点 $\tilde{I}_{1,N}$ 已经移至下一个脉搏周期内, 其波形与所考察的脉搏周期的波

形不同, 使得 $\tilde{I}_{1,N} \neq \tilde{I}_{1,0}$, 导致 $X_1(1) \neq X_M(1)$ 。考察光电容积脉搏波的波形, 不同脉搏周期在虚线 A 所指示位置采样值差异最小, 即每个周期的 $\tilde{I}_{1,N}$ 与 $\tilde{I}_{1,0}$ 间偏差最小, 致使 $X_1(1)$ 与 $X_M(1)$ 最为接近, 使相移波形误差达到最小。

当取单个脉搏波时, 在脉搏波的重波部分(图 3 中 B 点位置), 相邻脉搏周期对应采样点间的幅值差异与 A 点相似, 其相移波形误差与 A 点几乎相等。但是由于不同脉搏周期内的重波形状差别较大, B 点在脉搏周期中的位置很不确定, 在同时处理多波长脉搏波时, 相移波形误差比较明显, 故不选取该区域为脉搏起始点。

4 结 论

本文对采用频域方法提取动态光谱过程中, 不同波长脉搏波间相位差导致的相位波形误差进行了讨论, 明确了在动态光谱检测过程中, 对多个波长脉搏波进行分时巡回检测时存在相移波形误差, 且与截取脉搏波的窗口位置相关。故在动态光谱数据预处理过程中加入窗口位置搜寻模块。

(1) 寻找每个脉搏主波上升支起始点, 确定各截取脉搏周期的矩形窗长度;

(2) 向前搜索各波长差异最小的采样点, 确定该点为矩形窗起始点, 从脉搏波中截取脉搏数据;

(3) 采用 FFT 方法提取该脉搏周期时间内各脉搏波的基波幅值, 为动态光谱幅值, 该算法若结合均值滤波等其他信号处理方法, 可进一步提高动态光谱的检测精度。

参 考 文 献

- [1] Malin S F, Ruciti T L, Blank T B, et al. *Clinical Chemistry*, 1999, 45(9): 1651.
- [2] Gabriely I, Wozniak R, Mevorach M, et al. *Diabetes Care*, 1999, 22(12): 2026.
- [3] Schrader Wolfgang, Meuer. Petra, Popp. Jurgen, et al. *Journal of Molecular Structure*, 2005, 735-736: 299.
- [4] Burmeister J J, Arnold M A, Samll G W. *Diabetes Technology & Therapeutics*, 2000, 2: 5.
- [5] Gerard Deleris, Cyril Petibois, *Vibrational Spectroscopy*, 2003, 32: 129.
- [6] I Valyi-Nagy, Kaffka K J, JaKo J M, et al. *Clinica Chimica Acta*, 1997, 264(1): 117.
- [7] Khalil Omar S. *Diabetes Technology and Therapeutics*, 2004, 6(5): 660.
- [8] WANG Yan, LI Gang, LIN Ling, et al. *J. Phys. : Conf. Ser.*, 2005, 13: 284.
- [9] WANG Yan, LI Gang, LIN Ling, et al. *Proceedings of the 2005 IEEE Engineering in Medicine and Biology, 27th Annual Conference Shanghai, China, September 1-4, 2005.*
- [10] LI Gang, WANG Yan, LIN Ling, et al. *Proceedings of the 2005 IEEE Engineering in Medicine and Biology, 27th Annual Conference Shanghai, China, September 1-4, 2005.*
- [11] WANG Yan, LI Gang, LIN Ling, et al(王 焱, 李 刚, 林 凌, 等). *Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析)*, 2007, 27(1): 91.
- [12] LI Gang, WANG Yan, LI Qiu-xia, et al(李 刚, 王 焱, 李秋霞, 等). *Journal of Infrared and Millimeter Waves*, 2006, 25(5): 345.
- [13] Delpy D T, Cope M, van der Zee, et al. *Phys. Med. Biol.*, 1988, 33: 1433.
- [14] LI Gang, LI Xiao-xia, LIN Ling, et al(李 刚, 李晓霞, 林 凌, 等). *Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析)*, 2006, 26(2): 263.

Study on the Phase Shift Error of the Dynamic Spectrum

WANG Yan^{1,2}, LI Gang^{1*}, LIN Ling¹, LIU Yu-liang¹

1. College of Precision Instruments and Opto-Electronics Engineering, Tianjin University, Tianjin 300072, China

2. Liaoning Technical University, Fuxin 123000, China

Abstract Dynamic spectrum (DS) is a kind of NI spectrum extracted from the photo-electric pulse wave and closely relative to the article blood. It can be used in a non-invasive blood component concentration examination decision. In the present paper, the phase shift error (PSE) in the DS detection is analyzed based on the measure theory of DS. Firstly, the physiological activity of human being results in the instability of the period, amplitude and the base line of pulse wave. Secondly, there is a phase shift between different pulse waves at different wavelengths during the detection in time domain. These two factors lead to the difference among different pulse waves, and introduce the PSE into DS. The PSE of DS among different pulse waves is also discussed quantitatively. The result showed that PSE is correlated with the position of the rectangle window that intercepts pulses from the wave, and can be minimized into about 10% by selecting the start points of the windows.

Keywords Dynamic spectrum; Photo-electric pulse wave; FFT; Error analysis

* Corresponding author

(Received Apr. 2, 2006; accepted Jun. 28, 2006)

深切怀念我的恩师吴征铠教授

邱德仁

复旦大学化学系, 上海 200433

吴征铠老师走了,他是影响我一生的老师,我怀念他,敬仰他。吴征铠老师是德高望重的科学家和教育家。1955年我考入复旦大学化学系,吴征铠老师时任化学系系主任。在我们学生眼里,他是一位名教授,光谱学家,对他怀有一种敬畏的心情。1958年春,我当时是化学系三年级学生,面临分专业,出于对吴老师的崇敬,志愿表上我填了:光谱,于是有机会同吴征铠老师第一次面对面地交谈。吴老师告诉我,他已停了拉曼光谱的研究,光谱实验室要承担更重要的工作,分析铀矿、铀同位素和燃料铀。这使我兴奋又担心。我说,我还没有学过仪器分析,没有学过光谱分析。吴老师说,美国搞原子弹,谁教他们分析?苏联搞原子弹,也没人教他们。我们只能靠中国人自己。吴老师向我介绍了 Ahrens 的《Spectrochemical Analysis》、鲁沙诺夫的《矿物和矿石的光谱分析》、普罗阔菲也夫的《金属与合金的光谱定量分析》等几本有关的专业书,“你必须边干边学,在实践中学”。当时,刚经过 1957 年“反右”,政治口号主宰一切,而吴老师的这番话激发了我作为中国人的志气,使我心悦诚服。吴老师还在复旦化学系建立了一个称为“第一大队”的编制,进行相关的核化学工作,包括氟化学的工作。由于高度机密,参加这些工作的师生都不可互相交流,甚至领用的最普通的化学药品都编了代号。所有这些核化学工作,都是在吴征铠老师的组织、指导下实施和完成的。在吴老师指导下,我们以自力更生的精神,完成了增量法测定铀矿中铀的工作,并和溶矿法比较,取得了一致的结果,还配制了几套人工模拟的铀矿标样。我们确定了铀光谱线的同位素分裂的高分辨率条件,测绘了²³⁵U/²³⁸U 的谱线分裂轮廓,为高分辨率光谱分析浓缩铀作好了技术准备。在燃料铀分析工作中,需要用高纯度的氧化镓、氯化银作光谱载体,但美国对我国封锁禁运,“老大哥”苏联也不肯提供给我们。我们用等温扩散制备的纯氨水和均相沉淀法制备了光谱纯氯化银;用管道式系统干法精馏氯化镓的方法和自制的纯氨水制备出光谱纯氧化镓,做成了分析燃料铀的关键试剂。当时,化学系兴起过一个搞光谱纯试剂的高潮,我们正是在这样的环境氛围里做出光谱纯氯化银和光谱纯氧化镓的。近年,看到中央电视台播放纪念“两弹一星”的庆祝会,会场悬挂“自力更生”、“解放思想”、“艰苦奋斗”、“勤俭建国”等大幅标语,使我想起在那火红的岁月里,我们有幸在吴征铠老师的带领和指导下自觉投身参与了那场伟大创举的实践。他带领我们日以继夜,埋头苦干,取得了一个又一个成果,实践了这些伟大的思想。吴征铠老师作为我国原子弹项目核化学领域的开拓者、组织者和实施者,建立了不可磨灭的功勋。

吴征铠老师是引领我进入光谱分析专业领域的恩师。他的指导使我改变了听课、做作业的简单学习方式,引导我学会做实验研究,学会查阅文献等基本方法,使我懂得了实践出真知、学习同社会实践结合的道理,真正学会了学习。光谱分析也成了我的终生专业,同我一起做这些工作的程晚霞后来成为我的妻子。吴征铠老师是最重要的师长。谨以此短文,作为我对恩师的怀念。