

浑浊散射介质中被测成分线性吸光度提取与模型转换研究

曹海青, 韩同帅, 刘雪玉, 刘 瑾*

天津大学精密测试技术及仪器国家重点实验室, 天津 300072

摘 要 近红外漫反射光谱法可用于物质成分定性、定量分析, 具有快速、无损检测等优点, 在食品、制药、环境监测、生命科学等领域有广泛应用。采用近红外漫反射光谱对浑浊散射介质进行成分定量分析时, 由于光散射作用, 介质吸光度随测量距离不再呈线性变化, 不同测量距离下测量模型也很难转换。从扩散方程出发, 提出了从漫射光谱中提取线性吸光度的方法, 获得了与测量距离无关的介质光学参数——有效衰减系数的光谱, 该光谱可反映介质吸收变化, 并用于物质成分测量。具体采用了双位置差分法, 可在线性吸光度的范围内任意选取两个光源-探测器距离测量, 通过差分获得与测量位置无关的有效衰减系数光谱, 其中测量距离可依据波段灵活地进行选择。另外, 经理论推导可知, 差分运算的同时还大大削减了光子扩散对测量的影响, 有利于不同散射特性的介质间光谱模型的相互借鉴。经理论计算、蒙特卡洛模拟和实验验证, 在 1 000~1 360 nm 波段, 该方法适用于强散射的浑浊水溶液。对散射系数处于较大范围(28.53~87.47 cm⁻¹) 的 intralipid 水溶液进行了测试, 获得了线性吸光度的光源-探测器距离范围。进一步以葡萄糖为被测成分为例, 获得了葡萄糖在 intralipid 水溶液中的有效衰减系数光谱。采用测量距离连续可调的漫反射光谱测量系统进行了实验, 测量范围位于 0~0.3 cm, 测试了 3 种典型的介质(3%, 5%, 10% Intralipid 水溶液)。结果可知, 3 种介质中葡萄糖光谱呈现一致性, 它们之间的测量模型可以方便地进行线性转换。研究对象 intralipid 水溶液常作为生物组织的仿体, 其光学参数也覆盖了常见的牛奶、果汁等被测浑浊溶液, 因此测量结果具有广泛的适应性。综上, 该研究实现了对浑浊水溶液中物质成分线性吸光度的提取, 该方法不仅使得测量位置的选择更加灵活方便, 还有利于实现不同散射介质间模型的线性转换, 特别适用于介质成分复杂多变的场合下的测量应用, 如对人体组织、牛奶或食品中的成分测量等。

关键词 近红外光谱法; 散射介质; 扩散方程; 蒙特卡洛模拟; 线性吸光度; 有效衰减系数

中图分类号: O433.1 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2019)12-3711-07

引 言

近红外漫反射光谱法可用于物质成分的定性、定量分析, 具有快速、无损等优点, 在食品、制药、环境监测、生命科学等领域有广泛应用^[1]。实际测量中被测物一般是浑浊的散射介质, 如牛奶、水果、污染大气、生物组织等。由于光散射存在, 从介质中出射的漫射光(漫反射光或漫透射光)的吸光度随测量距离不再呈线性变化^[2]。测量距离是指光源-探测器之间的径向距离(source-detector separation, SDS)。这种非线性导致光谱测量总是依赖于当前测量距离的选择, 这影响了光谱测量的灵活性。在多波长测量时, 常需要采用不同 SDS 以适应吸收强弱不同的波长^[3], 而多 SDS 下的光谱

数据组合更增加了数据对 SDS 的依赖性。

纯吸收介质的情况比较简单, 介质的吸光度随光程(此时光程与测量距离一致)呈线性变化, 提取吸光度的变化斜率则可以得到与光程无关的吸收系数^[4]。而散射介质的情况复杂, 介质中存在光子扩散, 以及扩散路径上光的吸收两种效应, 并且在不同 SDS 下, 两种效应的强度不同, 它们随 SDS 的变化规律也不同。因此难以从中获得与 SDS 无关的光学参数。漫射光吸光度的非线性主要是因为光散射作用造成的。多元散射校正是常用的散射校正方法, 它对散射的效应进行了平均化处理, 可在一定程度上降低散射不同产生的影响。这种方法的原理本身存在缺陷, 数学计算后将改变数据中的原有信息, 引入了新的误差。这种校正限于散射变化幅度较小时, 不适用于介质出现较大散射差异的场合。

收稿日期: 2018-09-19, 修订日期: 2019-01-26

基金项目: 国家自然科学基金项目(81471698, 81401454)资助

作者简介: 曹海青, 女, 1993 年生, 天津大学精密测试技术及仪器国家重点实验室硕士研究生 e-mail: caohaiqing2014@126.com

* 通讯联系人 e-mail: liu_jin@tju.edu.cn

近几年,借助于扩散方程^[5]、蒙特卡洛模拟^[6]等理论研究手段,研究近红外漫射光谱受测量距离的影响问题日渐增多。本课题组曾研究了漫反射光谱中散射、吸收信息的分离方法,并被授权了美国发明专利^[7]。我们发现漫射光的吸光度对散射、吸收变化的灵敏度随 SDS 是近似线性变化的,称其为“散射作用线”和“吸收作用线”,提取作用线的斜率即可得到与 SDS 无关的量。此外,我们还研究了散射作用线、吸收作用线沿 SDS 的变化规律。以葡萄糖测量为例,有研究表明,对于强散射介质,在靠近光源处的测量距离,检测到的主要是葡萄糖散射信息的变化,可用于葡萄糖测量^[8-10];而若想利用葡萄糖的吸收信息测量,则需要适当远离光源的径向位置处,因为若距离太近则光程太短,可能导致不满足光程要求^[11]。徐可欣等还发现了存在一个不随葡萄糖浓度变化的特殊距离^[12-13],该距离下葡萄糖浓度变化引起的散射信号和吸收信息可完全抵消,小于该距离时散射信号占优,而大于该距离后吸收信号占优。

上述研究将吸光度变化量中散射、吸收作用进行了分离。事实上,漫射光的传输是由扩散、吸收两个物理过程共同主导,而非散射、吸收。其中扩散部分与普通的粒子扩散过程相似,常采用扩散系数进行描述,它是吸收系数、散射系数构成的综合参数;另一个有效吸收部分与介质的有效衰减系数相关,是描述光在介质中吸收情况的综合参数。因此,我们拟对原始漫射光吸光度中包含的扩散、吸收两个过程进行分离,进一步,将利用从吸光度中提取的线性部分,获得与 SDS 无关的光学参数量。并且,本文将利用“有效吸收”部分进行物质成分测量,它可以消除扩散部分的差异对测量的影响。

本文首先采用扩散方程进行推导,将漫反射光吸光度进行分解,以提取到有效吸收光谱部分,并获得与测量距离无关的光学参量。然后以葡萄糖在散射介质中的测量为例,采用蒙特卡洛模拟、实验对该方法进行了验证。

1 实验部分

1.1 漫反射光的线性吸光度提取

采用扩散方程描述光在散射介质中的传输过程,它是辐射传输方程的一阶球谐展开近似解。在外推边界条件下,在距光源径向距离为 ρ 点处的漫反射光强可表示为^[4-5]

$$I(\rho) = I_0 \frac{1}{4\pi} \left[z_0 \left(\mu_{\text{eff}} + \frac{1}{r_1} \right) \frac{e^{-\mu_{\text{eff}} r_1}}{r_1^2} + (z_0 + 2z_b) \left(\mu_{\text{eff}} + \frac{1}{r_2} \right) \frac{e^{-\mu_{\text{eff}} r_2}}{r_2^2} \right] \quad (1)$$

其中, I_0 是入射光强度, $I(\rho)$ 为漫反射光强。 μ_{eff} 为有效衰减系数且 $\mu_{\text{eff}} = [3\mu_s(\mu_a + \mu'_s)]^{1/2}$ 。 μ_a 为吸收系数, μ_s 为散射系数,而约化散射系数为 $\mu'_s = (1-g)\mu_s$, g 为各向异性因子。其余参数为: $r_1 = \sqrt{\rho^2 + z_0^2}$, $r_2 = \sqrt{\rho^2 + (z_0 + 2z_b)^2}$, $z_0 = 1/\mu'_s$, $z_b = 2D$ 。

当测量位置满足 $\rho \gg (z_0 + 2z_b)$ 且 $\rho \gg 1/\mu_{\text{eff}}$ 时,即远离

光源后,可对式(1)进行简化,此时 $r_1 \approx r_2$, 令 $r_1 \approx r_2 \approx \sqrt{\rho^2 + (z_0 + 2z_b)^2} \approx \rho$, 则式(1)可写成式(2)

$$I(\rho) = I_0 \frac{(2z_0 + 2z_b)(\mu_{\text{eff}})}{4\pi\rho^2} \exp(-\mu_{\text{eff}}\rho) \quad (2)$$

采用自然对数定义漫反射光的吸光度为 A_p , 即

$$A_p = -\ln \frac{I(\rho)}{I_0} = \ln K + 2\ln\rho + \mu_{\text{eff}}\rho \quad (3)$$

其中 $K = \frac{4\pi}{(2z_0 + 2z_b)(\mu_{\text{eff}})}$ 。将吸光度 A_p 进行分解,其中 $A_{p,D}$ 为扩散部分的吸光度, $A_{p,A}$ 为有效吸收部分吸光度。

$$A_p = A_{p,D} + A_{p,A}$$

$$A_{p,D} = \ln K + 2\ln\rho \quad (4)$$

$$A_{p,A} = \mu_{\text{eff}}\rho$$

由式(4)可知,扩散部分的吸光度 $A_{p,D}$ 随 ρ 的变化是非线性的,其中 $2\ln\rho$ 为非线性项;而有效吸收部分 $A_{p,A}$ 随 ρ 呈现线性变化。可见, A_p 的非线性是由扩散作用造成的。当介质光学参数变化时,非线性项 $2\ln\rho$ 并不变化,因此,当物质成分浓度发生变化时,该项的微分为 0。此时漫反射光的吸光度微分为

$$\Delta A_p = \frac{\Delta K}{K} + \Delta\mu_{\text{eff}}\rho \quad (5)$$

由式(5)可知, ΔA_p 随测量距离呈线性变化,其变化的斜率即为有效衰减系数的变化量 $\Delta\mu_{\text{eff}}$, 可任选两个测量距离 ρ_1 和 ρ_2 , 由式(6)求得。 $\Delta\hat{\mu}_{\text{eff}}$ 即是与 SDS 无关的光学参数,可看作 $\Delta\mu_{\text{eff}}$ 的估计值。

$$\Delta\hat{\mu}_{\text{eff}} = \frac{\Delta A_{p1} - \Delta A_{p2}}{\rho_1 - \rho_2} \quad (6)$$

由于采用的扩散方程是一阶近似解,忽略了一些高阶项,因此采用上述方法得到的估计值 $\Delta\hat{\mu}_{\text{eff}}$ 与真值 $\Delta\mu_{\text{eff}}$ 存在原理误差。

可以看出上述方法是选取两个 SDS 距离进行差分获得 $\Delta\mu_{\text{eff}}$ 的估计值。该差分测量类似于光谱法中的光程差分,它可以消除光源漂移,还可以抑制两个 SDS 下的共性背景干扰信号,是提高测量准确性的常用方法。基于光电脉搏波法的血氧饱和度测量是差分测量的典型实例,它将血管舒张期和收缩期的信号进行差分,获取了血液容积差信号,抑制了组织背景对测量的影响^[14]。Amir 等利用血流阻塞前后的差分光谱进行血糖测量^[15], 目的也是为了消除组织背景的干扰。本文采用的差分测量可以将两 SDS 处的共性扩散部分消除。

1.2 蒙特卡洛模拟

蒙特卡洛(Monte-Carlo, MC)模拟是广泛用于物理领域处理粒子输运问题的随机统计方法,可作为模拟光子输运实际物理过程的最直接、有效的方法^[6]。

采用 MC 模拟方法模拟了在 1 000~1 360 nm 波段光经过三种散射介质后的漫反射光强,分别是 3%, 5%, 10% 的 intralipid 溶液,它们的散射系数范围为 28.53~87.47 cm^{-1} , 吸收以水的吸收为主,范围为 0.83~3.36 cm^{-1} , 具体的光学参数(g , n , μ_a , μ_s)参照文献[12-13, 16-17]。每种溶液中葡萄糖浓度为 0~900 $\text{mg} \cdot \text{dL}^{-1}$ (0~50 $\text{mmol} \cdot \text{L}^{-1}$), 以 180 $\text{mg} \cdot \text{dL}^{-1}$ (10 $\text{mmol} \cdot \text{L}^{-1}$) 为浓度梯度进行模拟,葡萄糖引起的光学参数变化参照文献[12-13]。图 1 画出了三种

溶液以及葡萄糖的吸收、散射系数。

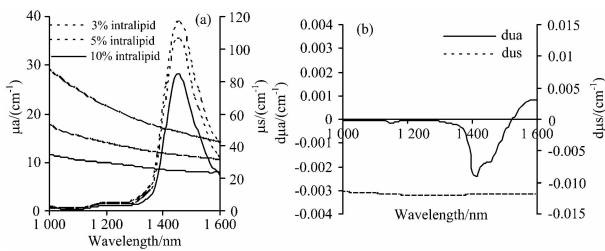


图 1 MC 模拟采用的光学参数

(a): 3 种 intralipid 水溶液的吸收、散射系数; (b): $1 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ ($18 \text{ mg} \cdot \text{dL}^{-1}$) 葡萄糖引起的吸收、散射系数变化

Fig. 1 The optical parameters used in MC simulation

(a): The absorption coefficient and the scattering coefficient of the three kinds of intralipid solutions; (b): The changes of absorption coefficient and scattering coefficient caused by $1 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ ($18 \text{ mg} \cdot \text{dL}^{-1}$)

1.3 仪器与试剂

采用径向距离可调的漫反射光谱检测系统进行实验, 如图 2 所示。入射部分由光源、AOTF、两个格兰激光棱镜和光纤耦合器构成, 光源为超连续谱白光激光器(SC-OEM, 武汉安扬激光公司)。检测器为钢镓砷近红外探测器(G5851-21, HAMAMATSU 公司)。测量波长范围为 $1 \text{ 100} \sim 1 \text{ 300} \text{ nm}$ 。采用步进电机精密地调整入射光纤与接收光纤的距离, 范围 $0 \sim 0.3 \text{ cm}$, 步长 0.01 cm 。使用的试剂为 3% intralipid, 5% intralipid, 10% intralipid 水溶液, 在上述溶液中分别加入不同质量的葡萄糖, 配制葡萄糖浓度为 $1 \text{ 000}, 2 \text{ 000}, 3 \text{ 000}, 4 \text{ 000}, 5 \text{ 000}$ 和 $6 \text{ 000} \text{ mg} \cdot \text{dL}^{-1}$ 的溶液, 加上不含葡萄糖的 intralipid 溶液, 实验共有 21 个样本。

2 结果与讨论

2.1 扩散方程公式计算结果

以 3% intralipid 水溶液的葡萄糖测量为例, 葡萄糖浓度

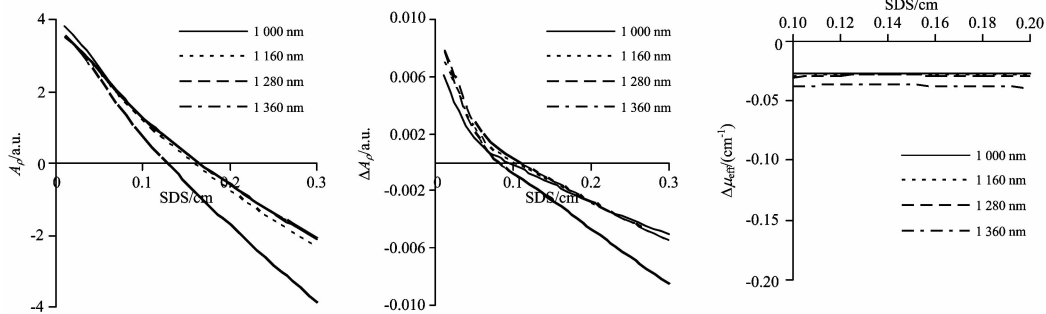


图 3 半无限介质扩散方程计算结果(3% intralipid 水溶液)

(a): A_p ; (b): $10 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ ($180 \text{ mg} \cdot \text{dL}^{-1}$) 葡萄糖引起的 ΔA_p ; (c): $10 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ 葡萄糖引起的 $\Delta \hat{\mu}_{\text{eff}}$

Fig. 3 Results using diffusion equation for semi-infinite media (3% intralipid solution)

(a): Attenuance, A_p ; (b): The change of attenuance, ΔA_p , caused by glucose of $10 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ ($180 \text{ mg} \cdot \text{dL}^{-1}$); (c): The change of estimated effective attenuation coefficient, $\Delta \hat{\mu}_{\text{eff}}$, caused by glucose of $10 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ ($180 \text{ mg} \cdot \text{dL}^{-1}$)

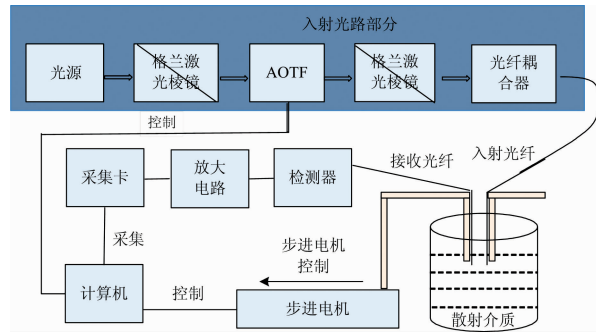


图 2 径向距离可调的漫反射光谱检测系统示意图

Fig. 2 Schematic diagram of radial distance adjustable system for diffuse reflectance measurement

设定为 $10 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ ($180 \text{ mg} \cdot \text{dL}^{-1}$), $20 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ ($360 \text{ mg} \cdot \text{dL}^{-1}$), $30 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ ($540 \text{ mg} \cdot \text{dL}^{-1}$), $40 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ ($720 \text{ mg} \cdot \text{dL}^{-1}$), $50 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ ($900 \text{ mg} \cdot \text{dL}^{-1}$)。波长为 $1 \text{ 000} \sim 1 \text{ 360} \text{ nm}$, 间隔 20 nm 。光源-检测器距离为 $0 \sim 0.3 \text{ cm}$, 间隔 0.01 cm 。采用式(1)计算溶液的漫反射光强, 代入式(3)一式(6)得到吸光度 A_p 、葡萄糖引起的吸光度变化量 ΔA_p 以及有效衰减系数变化量 $\Delta \hat{\mu}_{\text{eff}}$ 。它们随 SDS 的变化曲线分别如图 3(a), (b), (c) 所示。由图 3(b) 可以看出, 当测量距离远离光源一段距离后, 约在 $\rho > 0.06 \text{ cm}$ 后, ΔA_p 呈线性变化趋势, 此时线性变化的斜率即为有效衰减系数变化量 $\Delta \hat{\mu}_{\text{eff}}$, 如图 3(c)。对 $10 \sim 50 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ 的每个葡萄糖浓度、每个波长采用式(6)计算得到 $\Delta \hat{\mu}_{\text{eff}}$, SDS 选在 0.14 和 0.16 cm , 得到整条 $\Delta \hat{\mu}_{\text{eff}}$ 光谱, 如图 4(c)。将其与图 4(b) 中 $\Delta \hat{\mu}_{\text{eff}}$ 真值比较, 可以看出两者形状相似, 但存在原理性误差。

2.2 蒙特卡洛模拟结果

采用蒙特卡洛模拟得到三种 intralipid 溶液的漫反射光强, 并根据式(5)计算吸光度变化量 ΔA_p , 如图 5 所示。表 1 给出了 3 种溶液的 ΔA_p 随 SDS 变化的线性区间, 可以看出, 随着溶液散射系数增大, ΔA_p 随 SDS 变化的线性区间离光源越近, 随着 SDS 增加后线性变差。

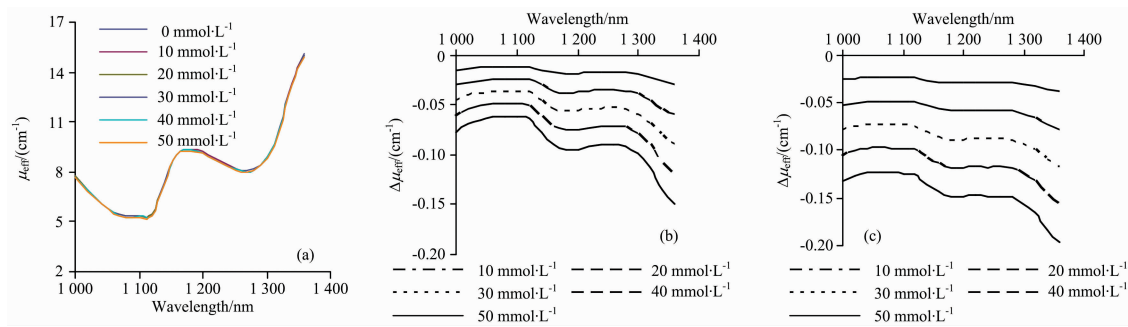


图 4 5 种葡萄糖浓度的 3% intralipid 溶液有效衰减系数 μ_{eff} 和有效衰减系数的变化量 $\Delta\mu_{\text{eff}}$ 光谱图

(a): μ_{eff} 真值; (b): $\Delta\mu_{\text{eff}}$ 真值; (c): 估计值 $\hat{\Delta\mu}_{\text{eff}}$

Fig. 4 The spectra of effective attenuation coefficient μ_{eff} of 3% intralipid solutions and its variation $\Delta\mu_{\text{eff}}$ caused by 5 glucose concentration changes in the solutions

(a): True values of μ_{eff} ; (b): True values of $\Delta\mu_{\text{eff}}$; (c): The estimated values, $\hat{\Delta\mu}_{\text{eff}}$

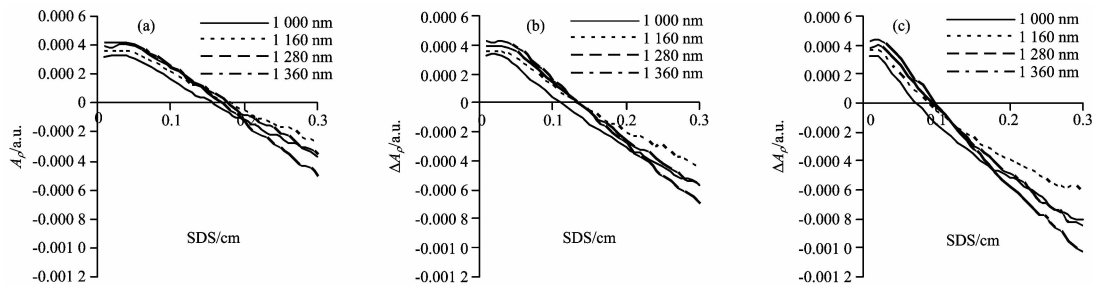


图 5 3 种 intralipid 溶液中葡萄糖浓度变化 $1 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ ($18 \text{ mg} \cdot \text{dL}^{-1}$) 吸光度变化量随 SDS 变化曲线

(a): 3% intralipid; (b): 5% intralipid; (c): 10% intralipid

Fig. 5 The attenuance variation ΔA_p curves with SDS caused by $1 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ glucose concentration change in three kinds of intralipid solutions

(a): 3% intralipid; (b): 5% intralipid; (c): 10% intralipid

表 1 1 000~1 360 nm 三种 Intralipid 溶液的吸光度线性范围总结 (根据 MC 模拟, 限 0.3 cm 以内)

Table 1 The attenuance linear range of SDSs for three Intralipid solutions at 1 000~1 360 nm (according to MC simulation results, the SDS was limited less than 0.3 cm)

波段/nm	线性范围/cm		
	Intralipid 3%	Intralipid 5%	Intralipid 10%
1 000~1 200	0.05~0.20	0.04~0.18	0.03~0.10
1 200~1 300	0.06~0.30	0.05~0.20	0.03~0.12
1 300~1 360	0.07~0.30	0.06~0.30	0.04~0.30

采用 0.08 和 0.10 cm 两个 SDS, 差分处理得到 $\hat{\Delta\mu}_{\text{eff}}$, 将其与扩散公式得到的 $\hat{\Delta\mu}_{\text{eff}}$ 、及真值进行了比较, 如图 6。可以看出, 公式估计值与 MC 估计值有较好的吻合, 但均与真值存在误差。图 7 给出了 3%, 5%, 10% intralipid 溶液中葡萄糖 $\hat{\Delta\mu}_{\text{eff}}$ 光谱。采用图 7 中的 $\hat{\Delta\mu}_{\text{eff}}$ 结果进行葡萄糖浓度预测, 结果如图 8。其中采用一种 intralipid 溶液的数据建立模型, 预测其他溶液的葡萄糖浓度。由结果可以看出, 采用同种 intralipid 溶液的数据建立模型, 葡萄糖预测结果较好, 3%, 5%, 10% intralipid 溶液中模型的 RMSECV (交叉验证

的均方根误差) 分别为 0.106 7, 0.150 3 和 0.153 3 $\text{mmol} \cdot \text{L}^{-1}$; 而不同 intralipid 溶液之间相互预测时, 产生了较大的系统误差, 但预测值与真值之间的线性度较好, 可以通过线性校正修正偏差。

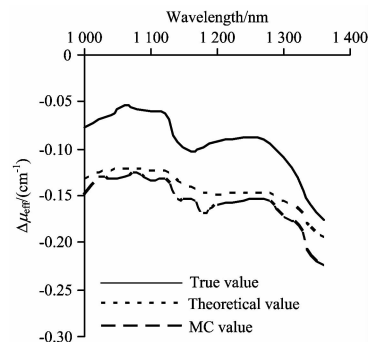


图 6 $\Delta\mu_{\text{eff}}$ 的两个估计值与真值的比较 (以 3% intralipid 溶液, $50 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ 葡萄糖浓度为为例)

Fig. 6 Comparison of two estimation values of $\Delta\mu_{\text{eff}}$ with true values (3% intralipid solution, $50 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ glucose concentration)

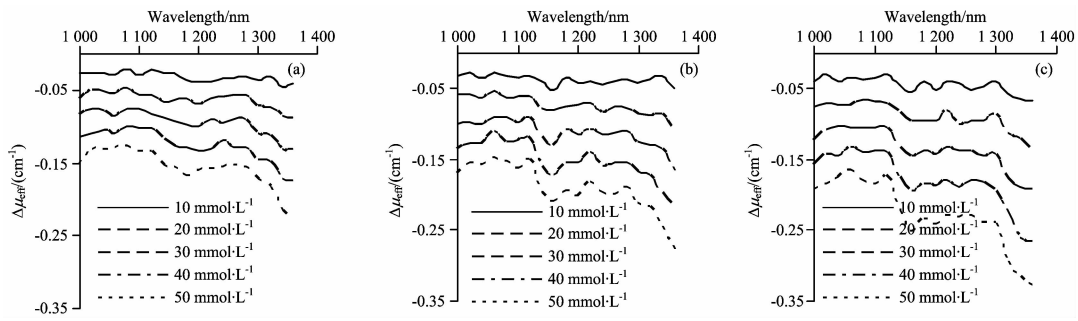


图 7 Intralipid 溶液中葡萄糖引起的有效衰减系数变化量 $\Delta\hat{\mu}_{\text{eff}}$ 光谱图

(a): 3% intralipid; (b): 5% intralipid; (c): 10% intralipid

Fig. 7 Effective attenuation coefficient variation $\Delta\hat{\mu}_{\text{eff}}$ caused by glucose in intralipid solutions

(a): 3% intralipid; (b): 5% intralipid; (c): 10% intralipid

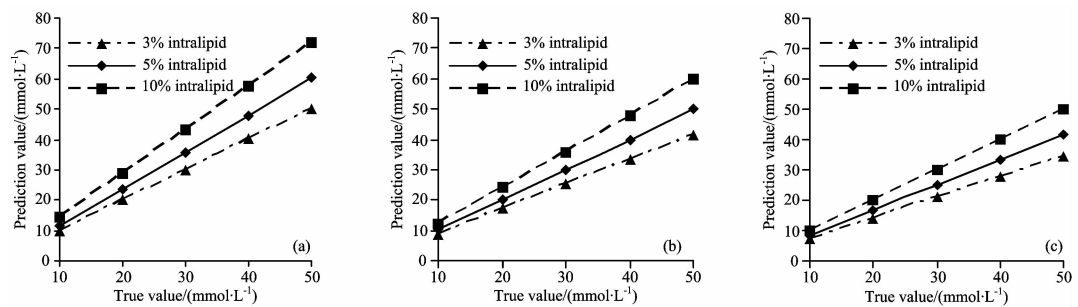


图 8 3 种 intralipid 溶液的有效衰减系数变化量建模并相互预测葡萄糖浓度的结果

(a): 采用 3% intralipid 数据建模; (b): 采用 5% intralipid 数据建模; (c): 采用 10% intralipid 数据建模

Fig. 8 The glucose prediction results when modeling using the effective attenuation coefficient variation $\Delta\hat{\mu}_{\text{eff}}$ for three Intralipid solutions

(a): Modeling with 3% intralipid; (b): Modeling with 5% intralipid; (c): Modeling with 10% intralipid

2.3 实验结果

实验测量了 3 种 Intralipid 溶液中葡萄糖浓度为 1 000~6 000 $\text{mg} \cdot \text{dL}^{-1}$ 的漫反射光强, 根据式(5)计算的葡萄糖吸光度变化量 ΔA_p , 如图 9 所示。图 10 给出了葡萄糖引起的有效衰减系数变化量 $\Delta\hat{\mu}_{\text{eff}}$ 。采用图 10 中的 $\Delta\hat{\mu}_{\text{eff}}$ 结果进行葡萄

糖浓度预测, 结果如图 11 所示。3%, 5%, 10% intralipid 溶液的模型 RMSECV 分别为 51.36, 49.87 和 53.69 $\text{mg} \cdot \text{dL}^{-1}$; 而不同溶液之间相互预测时, 也产生了较大误差, 但预测值与真值之间的线性度较好, 可以通过线性校正修正偏差。

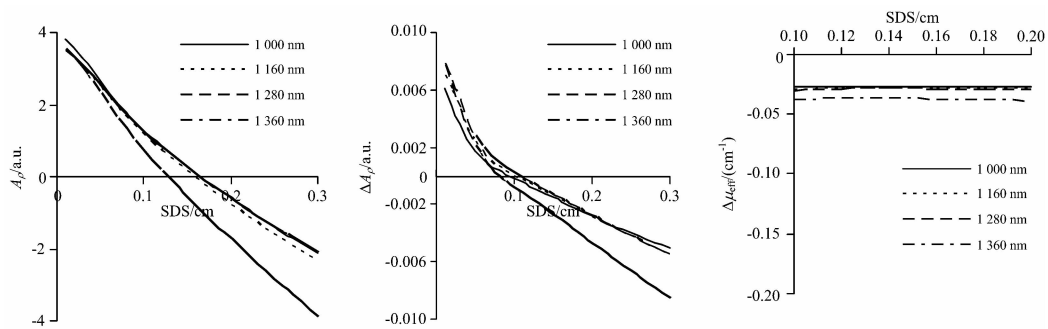


图 9 3 种 Intralipid 溶液中葡萄糖浓度变化 5 000 $\text{mg} \cdot \text{dL}^{-1}$ 引起的吸光度变化量

(a): 3% intralipid; (b): 5% intralipid; (c): 10% intralipid

Fig. 9 The attenuation variation ΔA_p with SDS caused by 5 000 $\text{mg} \cdot \text{dL}^{-1}$ glucose concentration change in three intralipid solutions

(a): 3% intralipid; (b): 5% intralipid; (c): 10% intralipid

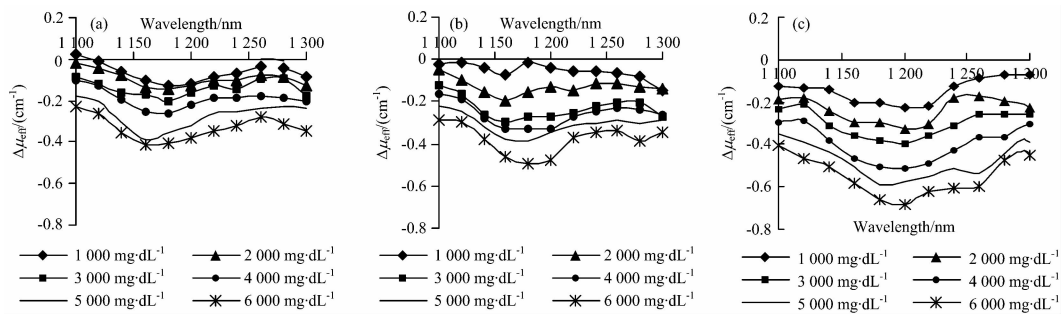


图 10 Intralipid 溶液中葡萄糖浓度变化 $1\,000\sim 6\,000\text{ mg}\cdot\text{dL}^{-1}$ 引起的 $\Delta\hat{\mu}_{\text{eff}}$ 光谱图

(a): 3% intralipid; (b): 5% intralipid; (c): 10% intralipid

Fig. 10 $\Delta\hat{\mu}_{\text{eff}}$ caused by glucose concentrations of $1\,000\sim 6\,000\text{ mg}\cdot\text{dL}^{-1}$ in intralipid solutions

(a): 3% intralipid; (b): 5% intralipid; (c): 10% intralipid

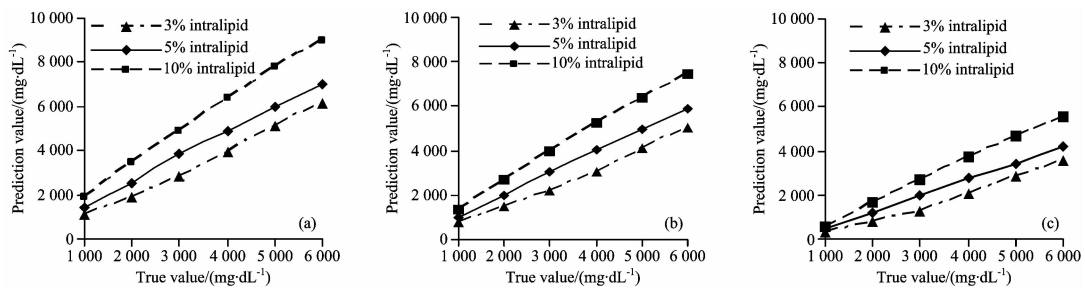


图 11 3 种 intralipid 溶液的有效衰减系数变化量建模并预测葡萄糖浓度的结果

(a): 采用 3% intralipid 数据建模; (b): 采用 5% intralipid 数据建模; (c): 采用 10% intralipid 数据建模

Fig. 11 The glucose prediction results when modeling using the effective attenuation coefficient variation $\Delta\hat{\mu}_{\text{eff}}$ for three Intralipid solutions

(a): Modeling with 3% intralipid; (b): Modeling with 5% intralipid; (c): Modeling with 10% intralipid

上述实验获得了 $1\,000\sim 1\,300\text{ nm}$ 的结果。随着波长的增加, 水的吸收加强, 漫反射光强急剧下降, 仅在近光源处能测到信号, 稍远处则降至噪声水平。intralipid 浓度较大时, 漫反射光强越强, 越容易测量。

3 结 论

以散射系数为 $28.53\sim 87.47\text{ cm}^{-1}$ 范围的 Intralipid 水溶液为研究对象, 研究 $1\,000\sim 1\,360\text{ nm}$ 的近红外漫反射光谱的线性吸光度提取方法。通过扩散方程的理论分析, 获得了 $\Delta A_p \propto \rho$ 的结论, 线性比例系数即为 $\Delta\mu_{\text{eff}}$ 。采用蒙特卡罗模拟、实验进行了验证, 均证明了线性吸光度的存在, 同时提取其随着 SDS 的变化斜率, 获得了 $\Delta\mu_{\text{eff}}$ 的估计值。比较了三种 intralipid 溶液的 $\Delta\mu_{\text{eff}}$ 估计值, 并与真值进行了对比, 发现

它们形状一致, 但存在原理误差。理论上, 在 $1\,000\sim 1\,800\text{ nm}$ 的近红外光波段, 本文的方法均是适用的。随着介质吸收、散射的增强, 线性吸光度位于的 SDS 范围将越来越接近光源, 导致测量无法实施。受限于实验条件, 我们仅对 $1\,000\sim 1\,300\text{ nm}$ 的漫反射光进行了测试, 该结果对其他波段的测量也有好的借鉴价值。

综上, 本文提出了一种线性吸光度提取方法, 得到了与 SDS 无关的光学参数, 即 $\Delta\mu_{\text{eff}}$, 采用 $\Delta\mu_{\text{eff}}$ 将对散射介质的物质成分进行分析。该方法消除了光扩散部分对测量的影响, 这有利于实现介质成分复杂且多变的场合下的测量应用, 如对人体组织、牛奶或食品中的成分测量等。本文方法还有利于不同散射介质间模型的线性转换, 对实际测量应用有指导意义。

References

- [1] Prieto N, Pawluczyk O, Dugan MER, et al. Applied Spectroscopy, 2017, 71(7): 1403.
- [2] Billet C, Sablong R. Optics Letters, 2007, 32(22): 3251.
- [3] Zhang Ziyang, Cai Zijin, Han Guang, et al. Spectroscopy Letters, 2016, 49(9): 588.
- [4] XU Ke-xin, GAO Feng, ZHAO Hui-juan(徐可欣, 高峰, 赵会娟). Biomedical Photonics(生物医学光子学). 2nd ed(第2版). Beijing: Science Press(北京: 科学出版社), 2011.
- [5] Farrell T J, Patterson M S, Wilson B. Medical Physics, 1992, 19(4): 879.

- [6] Jacques S L. *Physics in Medicine & Biology*, 2013, 58(11): R37.
- [7] Xu Kexin, Liu Jin. U. S. Patent 9, 551, 656. 2017-1-24.
- [8] Heinemann L, Kramer U, Klotzer H M, et al. *Diabetes Technology & Therapeutics*, 2000, 2(2): 211.
- [9] LIU Bing-jie, HAN Tong-shuai, GUO Chao, et al(刘冰洁, 韩同帅, 郭超, 等). *Acta Optica Sinica(光学学报)*, 2017, 37(2): 0230005.
- [10] Maruo K, Yamada Y. *Journal of Biomedical Optics*, 2015, 20(4): 047003.
- [11] Liu Jin, Liu Rong, Xu Kexin. *Applied Spectroscopy*, 2015, 69(11): 1313.
- [12] Han Guang, Han Tongshuai, Xu Kexin, et al. *Journal of Biomedical Optics*, 2017, 22(7): 77001.
- [13] Min Xiaolin, Liu Rong, Fu Bo, et al. *Optics & Laser Technology*, 2017, 91: 7.
- [14] Mendelson Y. *Clinical Chemistry*, 1992, 38(9): 1601.
- [15] Amir O, Weinstein D, Zilberman S, et al. *Journal of Diabetes Science and Technology*, 2007, 1(4): 463.
- [16] Kohl M, Essenpreis M, Cope M. *Physics in Medicine & Biology*, 1995, 40(7): 1267.
- [17] Kohl M, Cope M, Essenpreis M, et al. *Optics Letters*, 1994, 19: 2170.

Extracting Linear Attenuance of Analyte in Turbid Scattering Media and Prediction Model Transfer Based Thereon

CAO Hai-qing, HAN Tong-shuai, LIU Xue-yu, LIU Jin*

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

Abstract In near-infrared spectroscopy (NIRS) is widely applied for the qualitative or quantitative component detection in foods, medicines, pollution and biological tissues as it can provide real-time, non-invasive and continuous measurement. In the quantitative analysis of components in scattering media based on NIRS, the attenuation of the media doesn't exhibit linearity with the source-detector separation (SDS) due to light scattering. Then measurement models at different SDSs are difficult to be applied to each other. In this paper, we propose a signal processing method based on Diffusion Equation (DE) to acquire the linear attenuation and get a SDS-independent optical parameter, i. e. effective attenuation coefficient (EAC). The EAC spectrum can be used to detect the component since the spectrum shows a comprehensive absorption of it. We apply a differential measurement on the spectra from two arbitrary SDSs to get the EAC spectrum, which will be independent to the used SDSs as long as the SDSs are in a limited linear range. The SDSs also can be flexibly selected according the different wavebands. More over, the differential can greatly reduce the influence from light diffusing in medium, and then benefit the measurement model transferring for different scattering media. We tested the method on the turbid water solutions with high scattering property by using theoretical calculation, Monte Carlo (MC) simulation and experiment. The tested solutions' scattering coefficients were in the range of $28.53 \sim 87.47 \text{ cm}^{-1}$ and the waveband was $1\ 000 \sim 1\ 360 \text{ nm}$. The linear range of SDS for the attenuation was acquired. Taking the glucose measurement as an example, the EAC spectra of glucose in these media were tested. Using the SDSs from the linear range, we measured glucose's EAC spectra. The experiment system was equipped with a SDS adjustable probe to get the diffuse light from different SDSs. The spectra of three typical media, which are 3%, 5%, 10% Intralipid solutions, were compared. These glucose spectra presented high similarity and could be linearly transferred to each other. Intralipid solutions are often used as biological tissue phantoms since their optical property covers most water rich materials. And the solutions can also be used to mimic water rich food like milk, juice etc. Therefore, our study would be widely beneficial to many cases. In summary, we proposed an effective method to extract linear attenuation for diffuse spectra in turbid scattering media. This method can well improve the real use of NIRS, since it not only helps flexibly select SDSs, but also presents a convenient and linear measurement model transferring for easy varying media, such as tissues, milk, and other foods.

Keywords Near infrared spectroscopy; Scattering medium; Diffusion equation; Monte Carlo simulation; Linear attenuation; Effective attenuation coefficient

(Received Sep. 19, 2018; accepted Jan. 26, 2019)

* Corresponding author