

REDUCCIÓN DE RUIDO EN ESPECTROS RAMAN UTILIZANDO DIVERSAS TÉCNICAS

González, Murueta Johan Walter^{1,2}; Villa, Manríquez José Fabián¹; Villanueva, Luna Adrián Eugenio¹; Pérez, Armendáriz Beatriz²; Castro, Ramos Jorge¹

¹Departamento de Óptica, Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica, Tonantzintla Puebla, México

²Centro Interdisciplinario de Postgrado, Universidad Popular Autónoma del Estado de Puebla, Puebla Puebla, México

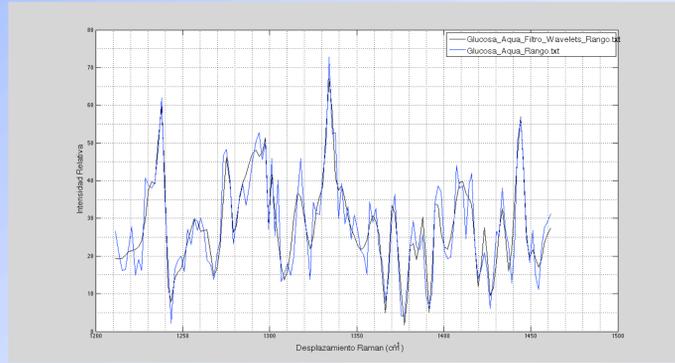


Fig 1. Parte del espectro de solución acuosa glucosada al 0.2%. Original y filtrado con un filtro wavelets.

Resumen La espectroscopía Raman proporciona información de la estructura química de la muestra analizada, presenta potencial para generar mediciones in-vivo de forma no invasiva. Uno de sus problemas es la gran cantidad de ruido en la señal en mediciones rápidas o de concentraciones muy pequeñas. Se presentan espectros Raman filtrados digitalmente con dos propósitos clínicos distintos: diagnóstico de cáncer en piel, y diseño de un glucómetro no invasivo. Para ambos casos se utilizan filtros Wavelets, Savitzky-Golay y Butterworth, mostrando los resultados de cada uno de ellos.

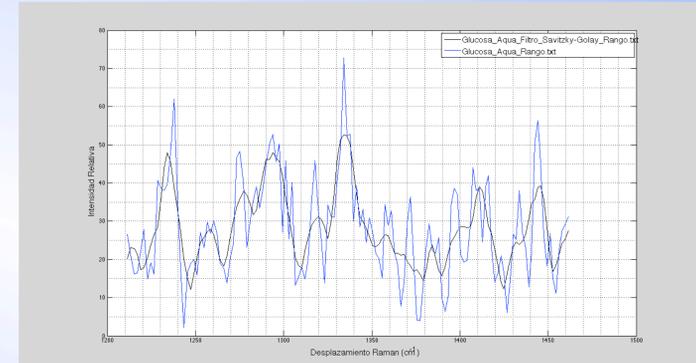


Fig 2. Parte del espectro de solución acuosa glucosada al 0.2%. Original y filtrado con un filtro Savitzky-Golay.

OBJETIVO

Hacer evidente el espectro Raman, dentro de la señal obtenida directamente del espectrómetro, cuando existe una relación señal a ruido muy pequeña, eliminando variaciones rápidas y a veces de gran amplitud (ruido) las cuales impiden extraer la información química de la muestra.

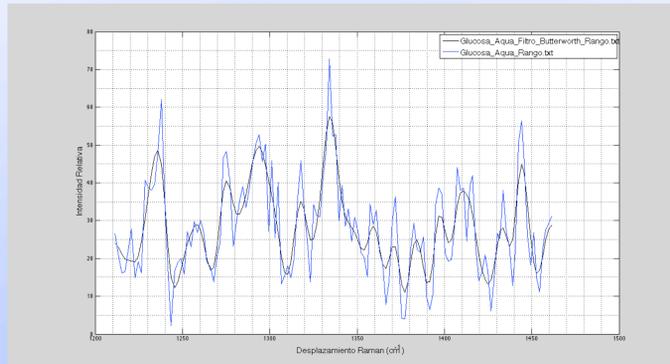


Fig 3. Parte del espectro de solución acuosa glucosada al 0.2%. Original y filtrado con un filtro Butterworth.

INTRODUCCIÓN

Dado que la reducción de ruido no es exclusiva de la espectroscopía Raman, ya existen métodos reportados para varios tipos de señales y ruido^{1,2}, hay métodos que existen desde hace 50 años y que aún se utilizan, inclusive en éste trabajo³. Existen reportes de eliminación de ruido en espectros Raman utilizando wavelets^{4,5} y comparaciones entre varios métodos, incluyendo los presentados aquí^{2,6}.

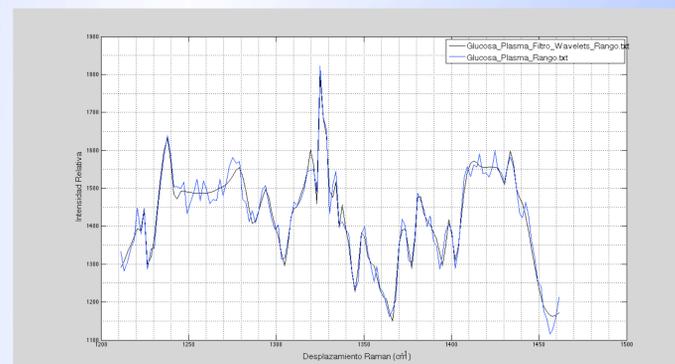


Fig 4. Parte del espectro de plasma sanguíneo glucosado al 0.2%. Original y filtrado con un filtro wavelets.

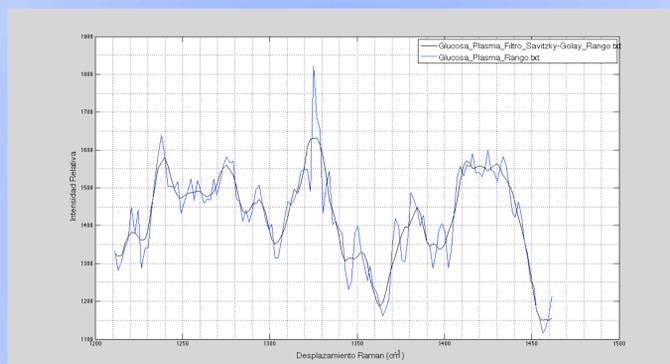


Fig 5. Parte del espectro de plasma sanguíneo glucosado al 0.2%. Original y filtrado con un filtro Savitzky-Golay.

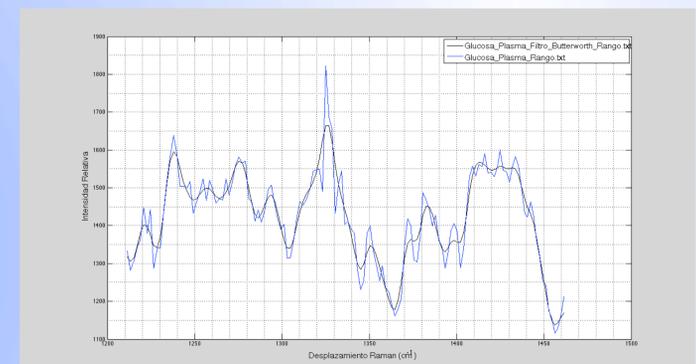


Fig 6. Parte del espectro de plasma sanguíneo glucosado al 0.2%. Original y filtrado con un filtro Butterworth.

METODOLOGÍA

Los espectros a filtrar fueron obtenidos utilizando un espectrómetro Ocean Optics 65000 con una fuente láser de 785nm y software "Spectra Suite". Se obtuvieron espectros Raman de piel en el dorso de la mano, de soluciones acuosas de glucosa al 0.2% y de plasma sanguíneo con glucosa igualmente al 0.2%. En las Figura 10 y 11 pueden observarse un ejemplo.

Para reducir el ruido en los espectros, una vez obtenidos y guardados en la computadora, se aplicaron tres técnicas distintas realizadas por medio de la computadora:

- 1.- Filtro Wavelets
- 2.- Filtro Savitzky-Golay
- 3.- Filtro butterword.

RESULTADOS

Las figuras 1, 2 y 3 muestran una parte del espectro de solución acuosa glucosada al 0.2%, se compara el espectro original y los filtrados con Wavelets, Savitzky-Golay y Butterword respectivamente. Puede apreciarse como el espectro original se ve claramente "suavizado" y como en los espectros filtrados se aprecian mucho mejor los picos el espectro Raman.

Las figuras 4, 5 y 6 van en el mismo tono que las primeras 3 con la diferencia de que son para plasma sanguíneo glucosado al 0.2%. Las Figs. 7, 8 y 9 corresponden la piel.

A manera de ejemplo se muestra el espectro completo de solución acuosa glucosada

al 0.2% (Fig. 10) y su espectro filtrado con Savitzky-Golay (Fig. 11).

CONCLUSIÓN

Los filtros cumplen con el objetivo de eliminar variaciones rápidas en el espectro y resaltar los picos de información química. Cada filtro muestra diferentes características en el proceso, para seleccionar el mas apropiado se tendrán que identificar dichas características y discernir cual es el mejor para cada espectro a filtrar.

REFERENCIAS

- [1] F. Ehrentreich, L. Summchen, "Spike Removal and Denoising of Raman Spectra by Wavelets Transform Methods". Anal. Chem. 2001. 73(17). 4364-4373.
- [2] B. K. Alsberga, A. M. Woodwarda, M. K. Winsona, J. Rowlandb, D. B. Kell. "Wavelets Denoising of Infrared Spectra". Analyst. 1997. 122. 645-652.
- [3] A. Savitzky, M.J.E. Golay. "Smoothing and Diferentiatiön of Data by Supplified Least Squares Procedures". Analytical Chemistry. 1964. 36(8). 1627-1639
- [4] E. G. Swee, S.Elangovan. "Applications of Symlets for Denoising and Load Forecasting". IEEE Xplore
- [5] A. E. Villanueva, J. Castro, S. Vazquez, A. FloresGil, J. A. Delgado, E. E. OrozcoGuillen. "Fluorescence and Noise Subtraction from Raman Spectra by Using Wavelets". Opt. Mem. and Neural Networks (Inf. Optics). 2010, 19(4), 310-317
- [6] L. Quintero, C. Matthäusb, S. Hunta, M. Diem. "Denoising of Single Scan Raman Spectroscopy Signals". Proc. SPIE. 7568. 756817-1 – 756817-12.

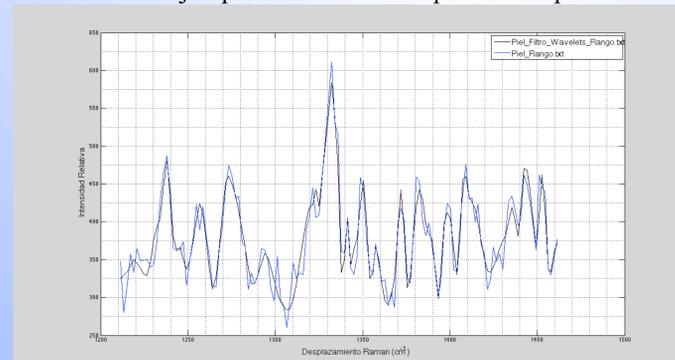


Fig 7. Parte del espectro de piel. Original y filtrado con un filtro wavelets.

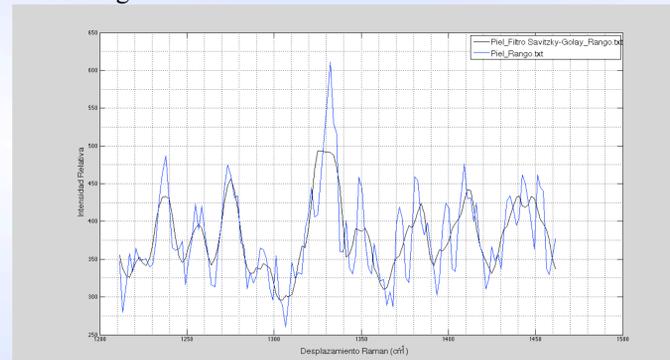


Fig 8. Parte del espectro de piel. Original y filtrado con un filtro Savitzky-Golay.

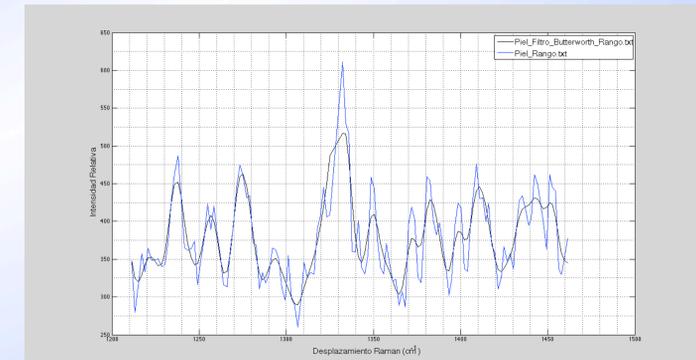


Fig 9. Parte del espectro de piel. Original y filtrado con un filtro Butterworth.

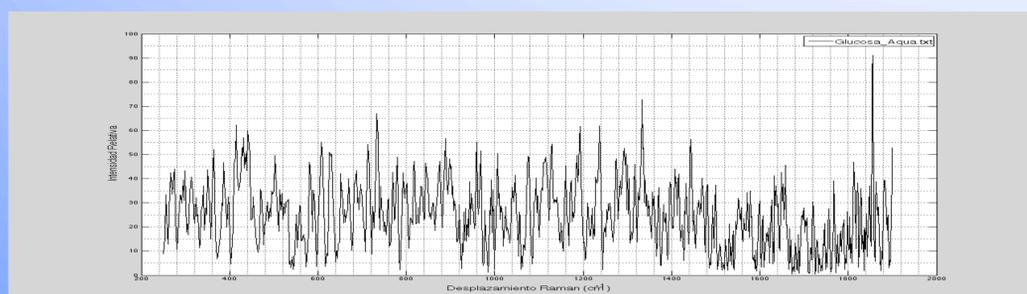


Fig 10. Espectro Raman de solución acuosa glucosada al 0.2%

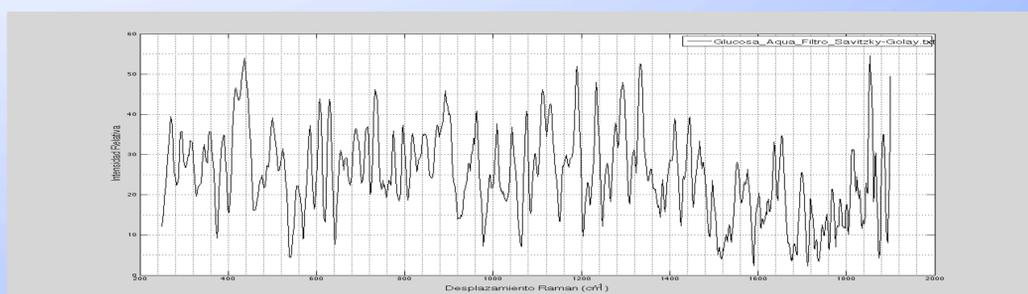


Fig 11. Espectro Raman de solución acuosa glucosada al 0.2%, filtrado con Savitzky-Golay