

Classificação do Espectro Raman Compactado de Tecidos Arteriais Utilizando Redes Neurais

Alderico R. de Paula Jr e Sokki Sathaiiah
Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento - IP&D - UNIVAP
Av. Shishima Hifumi 2911, 12244-000 - São José dos Campos, SP
E-mails: alderico@univap.br, sokki@univap.br

Abstract

Raman spectroscopy is a powerful non-destructive technique that has a high potential application for in vivo diagnosis of atherosclerotic plaques in human arteries. In some real time applications, a rapid collection and analysis of the Raman spectrum is needed. In such applications the noise generated by the detector may have the same level as the tissue Raman signal what makes the analysis difficult. This article presents the results of a study to process the Raman spectrum acquired from artery tissues when irradiated by a low power infrared laser. After being preprocessed, the Raman spectrum is compressed with the utilization of discrete wavelet transforms or principal component analyzes. Then, the tissue is classified into a non-pathological tissue, atherosclerotic lesion or calcified tissue utilizing neural networks. It was verified that the Raman spectrum, after being compressed from 592 up to 10 variables, presented correct classification rate greater than 95% when neural networks were used for detector exposition time as low as 20 ms.

1. Introdução

Os tecidos biológicos ao serem excitados por radiação laser de baixa potência espalham elástica e inelasticamente a radiação incidente bem como geram fluorescência. A componente inelástica da radiação incidente, denominada de radiação Raman, provê informações sobre as substâncias que compõem o tecido alvo. A espectroscopia Raman utilizando laser no infravermelho para excitação pode ser utilizada, de uma forma não evasiva, para detecção de ateromas em artérias humanas [1, 2]. A camada interna das artérias, denominada de íntima, consiste principalmente de proteínas estruturais. A arteriosclerose é caracterizada pelo acúmulo de colesterol na íntima, diminuindo o calibre da artéria. Com o passar do tempo inicia-se uma deposição de cálcio sobre a lesão aterosclerótica diminuindo a sua elasticidade. Tanto a deposição de colesterol, como a de cálcio podem ser detectadas através da espectroscopia Raman. Após detectada, a placa aterosclerótica pode ser eliminada por pulsos de laser de alta potência.

Nos últimos anos vem sendo desenvolvido um equipamento para remoção de ateromas [3] cujo diagrama de blocos é apresentado na Figura 1.

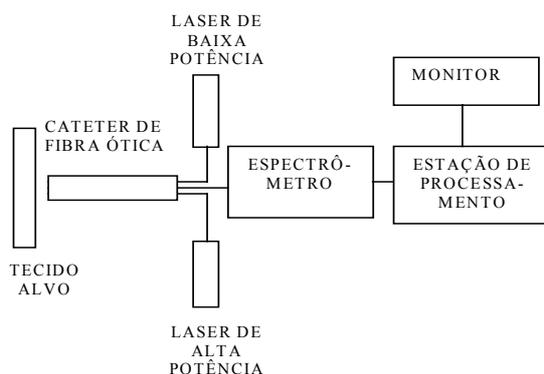


Figura 1: Equipamento em desenvolvimento

A radiação no infravermelho próximo, gerada pelo laser de baixa potência, é conduzida até o tecido alvo por uma fibra ótica. A radiação retroespalhada, bem como a fluorescência induzida, são captadas por um conjunto de fibras óticas e conduzidas até o espectrômetro onde são decompostas em faixas espectrais sobre uma matriz de 256 por 1024 detectores do tipo CCD (Charge Coupled Device). Após a exposição, as cargas dos detectores de cada linha são adicionadas e convertidas para um número binário de 16 bits que é transmitido para a estação de processamento. Um vetor de 1024 elementos é formado ao término da varredura de todas as linhas dos detectores. O vetor adquirido é processado e classificado na estação de processamento. Quando uma placa aterosclerótica é detectada a estação de processamento habilita o laser de alta potência para gerar pulsos de radiação que são conduzidos até o tecido alvo por uma fibra ótica. O tecido alvo atingido pelo pulso de alta potência é então removido por ablação. Para evitar que um tecido sadio seja atingido, o tecido alvo deve ser analisado antes do disparo de cada pulso de laser.

O laser de potência selecionado pode gerar até 10 pulsos por segundo. Portanto, para se utilizar de forma eficiente o laser de potência e evitar o deslocamento do cateter, o diagnóstico do tecido alvo deve ser realizado em menos de 100 ms. Assumindo-se que o tempo para transmitir e processar os dados do espectrômetro é da ordem de 20 ms o tempo de exposição do CCD deve ser menor que 80 ms.

Embora o detector CCD utilizado no presente experimento seja atualmente um dos mais avançados (deep depleted) e refrigerado a nitrogênio líquido, o nível do ruído por ele gerado é da ordem do sinal Raman quando o tempo de exposição do CCD é da ordem de 20 ms. Portanto, o objetivo deste estudo é analisar técnicas de compressão dos espectros Raman e de sua classificação por redes neurais quando estes são adquiridos com tempo de exposição do CCD menor que 80 ms (baixa relação sinal ruído).

Neste artigo os vetores serão representados por letras minúsculas em negrito e as matrizes por letras maiúsculas em negrito. O transposto de um vetor ou matriz é indicado pela letra T sobrescrita após o nome do vetor ou matriz.

2. Pré-Processamento do Espectro Raman

Os dados relativos a uma varredura espectral recebidos do espectrômetro são formatados em um vetor de 1024 elementos representado por $\mathbf{x} \in \mathcal{R}^{1 \times 1024}$. Cada elemento do vetor \mathbf{x} indica a intensidade da radiação de cada banda espectral captada do tecido alvo. A primeira fase do processamento [3] consiste na calibração espectral e seleção da região espectral de interesse. Este processamento gera um novo vetor de 592 elementos denominado $\mathbf{x} \in \mathcal{R}^{1 \times 592}$. Em seguida o vetor \mathbf{x} é submetido a um filtro digital passa-altas para eliminar o componente do sinal referente à fluorescência e, em seguida, os elementos do vetor são normalizados entre zero e um gerando o vetor $\mathbf{x} \in \mathcal{R}^{1 \times 592}$. A Figura 2 apresenta três espectros Raman típicos pré-processados e adquiridos: (a) de um tecido arterial não patológico, (b) de um ateroma e (c) de um tecido calcificado para o tempo de exposição do CCD da ordem de 500 ms (baixo nível de ruído).

3. Processamento do Espectro Raman

Diferentes técnicas para processamento do espectro Raman adquirido de amostras de artérias foram investigadas em Paula, 2001 [4]. Os métodos que apresentaram os melhores resultados foram os que combinaram transformadas wavelets ou componentes principais para compactação do espectro Raman com a utilização de redes neurais para a classificação. No presente artigo são analisadas as melhores taxas de compressão do espectro Raman que permitem redes neurais de baixa complexidade classificarem, com alta taxa de acerto, os espectros comprimidos adquiridos de amostras com tempo exposição do CCD menor que 80 ms (baixa relação sinal ruído).

As redes neurais artificiais (RNA) são algoritmos computacionais apropriados para problemas de classificação e reconhecimento de padrões. De forma similar à mente humana, as RNAs são implementadas por um conjunto de elementos de processamentos denominados de neurônios que podem ser interligados formando complexas redes de processamento.

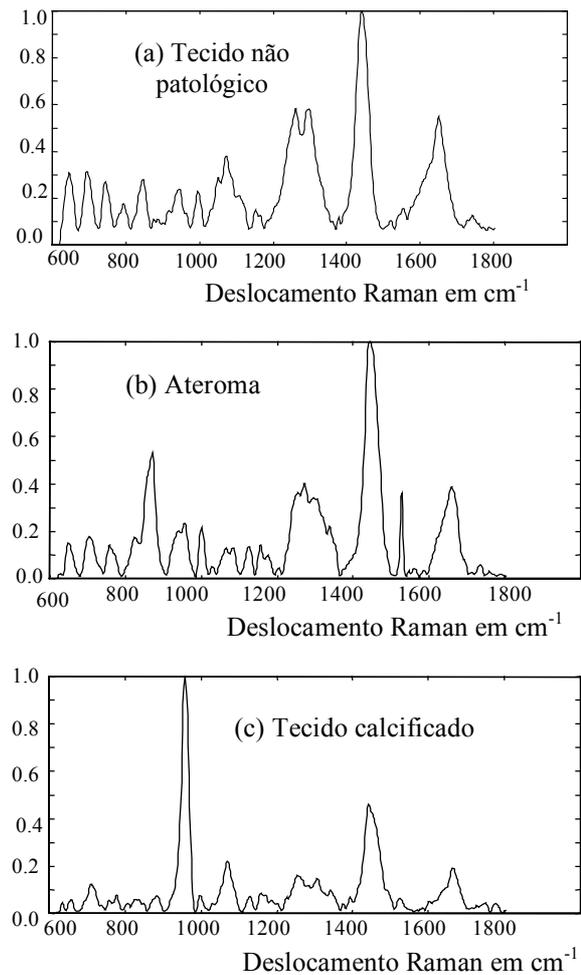


Figure 2: Espectros Raman de tecidos arteriais

Estas redes podem ser treinadas para executarem tarefas específicas. Diferentes tipos de redes neurais são descritos na literatura [5].

Para aplicações em reconhecimento de padrões são geralmente utilizadas as redes do tipo multicamadas com propagação direta (MLP – Multilayer Perceptron). Estas redes são formadas pela camada de entrada que recebe os dados de entrada, pela camada de saída que apresenta os resultados e por um conjunto de camadas intermediárias denominadas de camadas escondidas. O número de camadas escondidas e o número de neurônios por camada dependem da complexidade do problema a ser resolvido. A Figura 3 apresenta uma rede do tipo MLP com 10 entradas, uma camada escondida com quatro neurônios e uma camada de saída com dois neurônios.

Muitas RNAs apresentam melhores resultados na classificação quando o vetor de entrada é pré-processado [6]. As técnicas de processamento geralmente filtram o ruído, maximizam algumas características que facilitam a classificação e reduzem o número de variáveis e, conseqüentemente, a complexidade da rede neural.

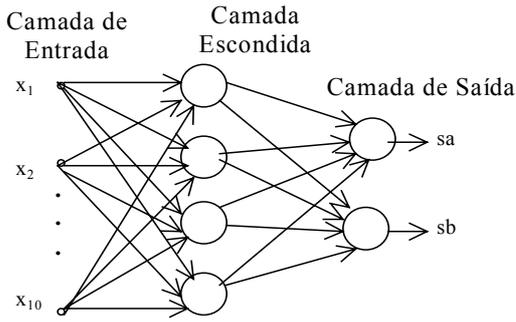


Fig. 3 Rede neural multicamada sem realimentação

As duas técnicas de pré-processamento selecionadas para o presente estudo foram a Transformada Discreta Wavelet (DWT – Discret Wavelet Transform) e a Análise de Componentes Principais (PCA – Principal Component Analysis).

A DWT [7] é uma transformação linear que permite separar os componentes de baixa frequência de um vetor daqueles de alta frequência e geralmente é representada pela matriz $\mathbf{H}_N \in \mathcal{R}^{N \times N}$, para N par, que transforma o vetor de entrada $\mathbf{x} \in \mathcal{R}^{1 \times N}$ em um vetor de saída $\mathbf{y} \in \mathcal{R}^{1 \times N}$ de mesmo comprimento de \mathbf{x} , calculado pela Equação 1.

$$\mathbf{y}^T = \mathbf{H}_N \mathbf{x}^T \quad (1)$$

O vetor \mathbf{y} pode ser separado no vetor $\mathbf{y}_l \in \mathcal{R}^{1 \times N/2}$ que contém os componentes de baixa frequência ou médias e no vetor $\mathbf{y}_h \in \mathcal{R}^{1 \times N/2}$ que contém os componentes de alta frequência ou detalhes. A matriz \mathbf{H}_N pode ser decomposta na matriz $\mathbf{H}_{L_N} \in \mathcal{R}^{N/2 \times N}$ que gera diretamente o vetor \mathbf{y}_l e na matriz $\mathbf{H}_{H_N} \in \mathcal{R}^{N/2 \times N}$ que gera diretamente o vetor \mathbf{y}_h . O processo de compressão consiste em manter o vetor \mathbf{y}_l e descartar o vetor \mathbf{y}_h . Quando se deseja uma maior taxa de compressão a DWT pode ser aplicada sucessivamente: inicialmente sobre o vetor de entrada de comprimento N , depois sobre o vetor resultante de baixa frequência de comprimento $N/2$, até o nível desejado. O vetor comprimido até a taxa $N:N/n$, $n = \{2, 4, 8, 16, \dots\}$, pode ser gerado diretamente pelo vetor H_n^N que, por sua vez, pode ser gerado pela multiplicação das matrizes de baixa frequência de cada nível. Por exemplo, para se ter a taxa de $N:N/16$ H_{16}^N pode ser calculado pela Equação 2.

$$H_{16}^N = \mathbf{H}_{L_{N/8}} \mathbf{H}_{L_{N/4}} \mathbf{H}_{L_{N/2}} \mathbf{H}_{L_N} \quad (2)$$

A Figura 4 apresenta em (a) o espectro Raman de uma amostra de ateroma adquirido com o tempo de exposição do CCD de 20 ms e em (b) o espectro comprimido com a Wavelet Daubechies com seis coeficientes até a taxa de 592:37.

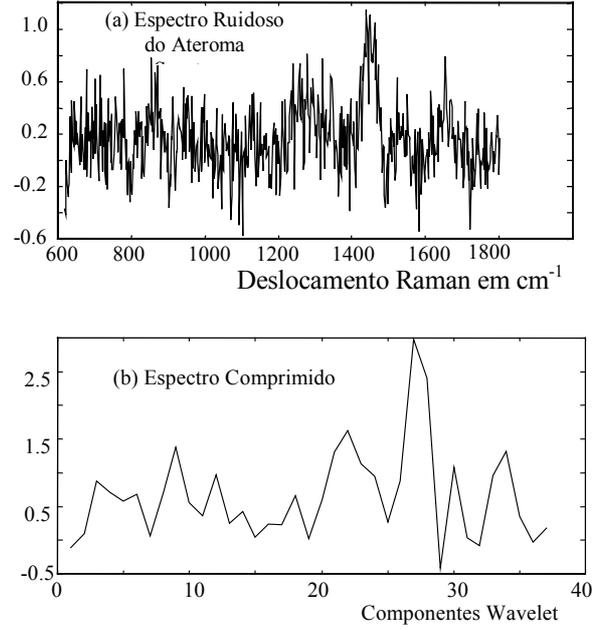


Fig. 4 Espectro do Ateroma: a) ruidoso; b) comprimido

De forma semelhante à DWT, o PCA [8] é também uma transformação linear representada pela matriz $\mathbf{V}\mathbf{K} \in \mathcal{R}^{K \times N}$ que converte o vetor de entrada $\mathbf{x} \in \mathcal{R}^{1 \times N}$ em um vetor comprimido $\mathbf{y} \in \mathcal{R}^{1 \times K}$, onde $K \leq N$. As novas variáveis são denominadas de componentes principais. A primeira explica o máximo da variação dos dados. Cada variável sucessiva explica o máximo possível da variação restante. Para calcular a matriz $\mathbf{V}\mathbf{K}$ é necessário dispor de um conjunto de espectros típicos de amostras a serem analisadas. Deste conjunto são selecionados M espectros que caracterizam bem os diversos tipos de amostras. Estes espectros devem ser organizados em uma matriz de treinamento $\mathbf{X} \in \mathcal{R}^{M \times N}$ onde as colunas indicam a intensidade de cada banda espectral e as linhas os espectros das amostras.

Uma das técnicas utilizadas para calcular $\mathbf{V}\mathbf{K}$ consiste em decompor a matriz de treinamento \mathbf{X} em valores singulares formando três novas matrizes $\mathbf{U} \in \mathcal{R}^{M \times M}$, $\mathbf{S} \in \mathcal{R}^{M \times N}$ e $\mathbf{V} \in \mathcal{R}^{N \times N}$, tal que $\mathbf{X} = \mathbf{U} \mathbf{S} \mathbf{V}^T$. As matrizes \mathbf{U} e \mathbf{V} são matrizes ortogonais. A matriz \mathbf{S} é diagonal e os elementos da diagonal principal contém informações sobre as variâncias dos componentes principais. A matriz $\mathbf{V}\mathbf{K}$ é formada mantendo-se as K primeiras colunas da matriz \mathbf{V} . Cada vetor comprimido \mathbf{y}_k pode ser calculado através da Equação 3.

$$\mathbf{y}_k^T = \mathbf{V}\mathbf{K} \mathbf{x}^T \quad (3)$$

O número de variáveis K a ser mantido depende da aplicação e da variância dos espectros originais e será analisado neste trabalho.

Ambos os métodos de compressão, DWT e PCA, anteriormente discutidos, podem ser implementados como a primeira camada de uma rede neural tendo os neurônios dessa camada a função de transferência linear

e sendo os pesos sinópticos os elementos da matriz de transformação como mostrado na Figura 5.

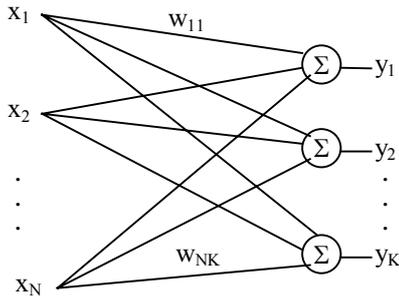


Figura 5 Fase de compressão do espectro Raman

4. Organização das Amostras

Visando comparar as técnicas de compressão e classificação discutidas e determinar o tempo mínimo de exposição do CCD, 60 espectros de amostras de artérias com o exame histológico realizado foram adquiridos, com o tempo de exposição do CCD maior que 500 ms (baixo nível de ruído). Os espectros adquiridos foram pré-processados e organizados em dois grupos. O primeiro grupo constituiu a matriz de treinamento $\mathbf{X} \in \mathcal{R}^{40 \times 592}$ formada por 20 espectros de tecido ateromatoso, 10 de tecido calcificado e 10 de tecido não patológico. O segundo grupo formou a matriz $\mathbf{Y} \in \mathcal{R}^{20 \times 592}$ denominada de matriz de validação, constituída de 10 espectros de tecido ateromatoso, cinco de tecido calcificado e cinco de tecido não patológico. Em seguida, foi calculado o desvio padrão médio (σ) dos espectros das matrizes \mathbf{X} e \mathbf{Y} , resultando em um valor de aproximadamente 0,2.

A relação sinal ruído do espectro Raman adquirido diminui com o tempo de exposição do CCD. Quando o tempo de exposição do CCD é maior do que 500 ms, o ruído gerado não afeta significativamente o processo de classificação. Entretanto, quando o tempo de exposição do CCD é da ordem de 20 ms o nível de ruído é da ordem do nível do sinal Raman.

Para simular o ruído do CCD para diversos tempos de exposição, vetores de ruído branco $\mathbf{n}_j \in \mathcal{R}^{1 \times 592}$ foram gerados com média zero e com desvio padrão especificado na Tabela 1. Para cada tempo de exposição, cinco diferentes vetores de ruído foram adicionados a cada espectro das matrizes \mathbf{X} e \mathbf{Y} gerando as matrizes $\mathbf{X05}$, $\mathbf{X1}$, $\mathbf{X2}$ e $\mathbf{X4} \in \mathcal{R}^{200 \times 592}$ e as matrizes $\mathbf{Y05}$, $\mathbf{Y1}$, $\mathbf{Y2}$ e $\mathbf{Y4} \in \mathcal{R}^{100 \times 592}$, respectivamente. Na tabela, TE indica tempo de exposição, MT, matriz de teste e MV matriz de validação.

Tabela 1 Matrizes com vetores de ruído

MT	MV	TE	σ_n	σ_s/σ_n
X05	Y05	80	0,05	4
X1	Y1	40	0,1	2
X2	Y2	20	0,2	1
X4	Y4	10	0,4	0,5

5. Compressão do Espectro Raman

Em uma fase preliminar do estudo foi constatado que quando os espectros Raman eram adquiridos com o tempo de exposição maior que 500 ms era possível comprimi-los até uma taxa de 512:19 e ainda ter uma taxa aceitável de classificação. Em Peris, 2000 [9], diferentes famílias de wavelets foram analisadas. Uma DWT que se mostrou adequada para a aplicação em pauta foi a Daubechies com seis coeficientes. O presente trabalho analisa a maior taxa de compressão utilizando a transformada wavelet selecionada para classificar os espectros Raman quando estes foram adquiridos com tempo de exposição do CCD menor que 100 ms. As taxas de compressão analisadas foram:

- W5 – Taxa 592:19 – Aplicação da DWT 5 vezes;
- W6 – Taxa: 592:10 - Aplicação da DWT 6 vezes;
- W7 – Taxa: 592: 5 – Aplicação da DWT 7 vezes;

Todos os espectros definidos na Seção 4 foram comprimidos para as taxas W5, W6 e W7.

Para gerar os espectros comprimidos por PCA a matriz $\mathbf{X} \in \mathcal{R}^{40 \times 592}$ definida na Seção 4 foi decomposta em valores singulares gerando as matrizes $\mathbf{UX} \in \mathcal{R}^{40 \times 40}$, $\mathbf{SX} \in \mathcal{R}^{40 \times 592}$ e $\mathbf{VX} \in \mathcal{R}^{592 \times 592}$. Visando comparar os espectros comprimidos por DWT com os comprimidos por PCA, as matrizes \mathbf{VK} para as transformadas PCA foram definidas da seguinte forma:

V19 – Taxa 592:19 – K=19;

V15 – Taxa: 592:15 – K=15;

V10 – Taxa: 592:10 – K=10;

V5 – Taxa: 592:5 – K=5.

K indica o número de colunas mantida da matriz \mathbf{VX} .

De forma semelhante à DWT, todos os espectros Raman definidos na Seção 4 foram comprimidos pelas matrizes **V19**, **V15**, **V10** e **V5**.

6. Classificação utilizando Redes Neurais

Um dos objetivos deste trabalho é selecionar uma rede neural de baixa complexidade e boa capacidade de generalização. Sendo o número de grupos a serem classificados igual a três, a camada de saída das redes neurais foi definida como tendo dois neurônios. Três RNAs de diferente complexidade foram selecionadas. A primeira, com apenas dois neurônios na camada de saída foi denominada de RNA-2; a segunda, com uma camada escondida tendo quatro neurônios e com a camada de saída com dois neurônios foi denominada RNA-4-2; finalmente a última com duas camadas escondidas tendo a primeira oito neurônios e a segunda quatro neurônios e dois neurônios na camada de saída foi denominada de RNA-8-4-2. A função tangente hiperbólica foi selecionada como função de transferência dos neurônios das camadas escondidas e a função linear, para os neurônios da camada de saída.

Para se ter uma distância razoável entre os centróides dos grupos de saída, os valores desejados para as saídas, bem como as regras de classificação,

foram definidos de acordo com a Tabela 2. Nesta tabela Sa e Sb indicam as duas saídas da rede neural.

Tabela 2 Saídas desejadas para as RNA

Tecido	Sa	Sb	Regra de Classificação
Ateroma	-1	-1	$Sa < 0 \ \&\& \ Sb < 0$
Calcificado	1	0	$Sa \geq 0$
Sadio	-1	1	$Sa < 0 \ \&\& \ Sb \geq 0$

O algoritmo selecionado para treinar a rede neural foi o do gradiente descendente. Para evitar que a rede neural ficasse “overfitted” as redes foram treinadas até que o erro médio quadrático entre as saídas das redes e saída desejada atingisse o valor de 0.001 ou o número de épocas fosse 2000, no máximo.

O algoritmo de treinamento pode gerar diferentes redes neurais para o mesmo conjunto de amostras de treinamento dependendo do valor inicial alocado para os pesos sinópticos. Para cada conjunto de espectros comprimidos (W5, W6, W7, P19, P15, P10 e P5) sem adição de ruído, os algoritmos de treinamento foram executados 50 vezes para as redes neurais RNA-2, RNA-4-2 e RNA-8-4-2. Somente as redes neurais que classificaram corretamente todos os espectros da matriz de treinamento e de validação foram consideradas.

As redes neurais selecionadas foram utilizadas para classificar os espectros das matrizes de treinamento e validação para cada taxa de compressão. Para cada matriz foi calculada a distância Euclidiana média e a máxima entre os valores desejados e aqueles gerados pela rede neural. Para cada taxa de compressão foi selecionada a rede neural que tivesse a menor distância máxima para os espectros de validação. As Tabelas 3 e 4 apresentam as distâncias médias (dm) e máximas (dx) para as matrizes de treinamento e validação para os espectros comprimidos por DWT e PCA.

Tabela 3 Distância média e máxima para a TDW

Comp	RNA	Treinamento		Validação	
		m	dx	dm	dx
W7	2	-	-	-	-
	4-2	-	-	-	-
	8-4-2	-	-	-	-
W6	2	-	-	-	-
	4-2	0,13	0,92	0,18	0,64
	8-4-2	0,10	0,42	0,16	0,66
W5	2	0,26	0,82	0,35	0,88
	4-2	0,23	1,04	0,29	0,82
	8-4-2	0,12	0,38	0,14	0,35

Como apresentado nas Tabelas 3 e 4, não foi possível, utilizando a metodologia acima descrita, encontrar redes neurais para as taxas de compressão W7 e P5. Para W6 não foi encontrada uma rede do tipo RNA-2 e para P10, redes do tipo RNA-2 e RNA-4-2.

Tabela 4 Distância média e máxima para a PCA

Comp	RNA	Treinamento		Validação	
		dm	Dx	Dm	Dx
P5	2	-	-	-	-
	4-2	-	-	-	-
	8-4-2	-	-	-	-
P10	2	-	-	-	-
	4-2	-	-	-	-
	8-4-2	0,11	0,49	0,25	0,62
P15	2	0,22	0,86	0,34	0,92
	4-2	0,10	0,42	0,10	0,56
	8-4-2	0,11	0,35	0,15	0,55
P19	2	0,21	0,68	0,33	0,70
	4-2	0,10	0,44	0,13	0,47
	8-4-2	0,11	0,34	0,08	0,26

Visando operar as redes neurais com certa margem de segurança, foi selecionada para cada taxa de compressão a rede neural de menor complexidade que tivesse a distância euclidiana máxima para as matrizes de treinamento e validação menor que 0,75. As redes neurais selecionadas são apresentadas na Tabela 5.

Tabela 5 RNAs selecionadas

Comp	RNA	Treinamento		Validação	
		dm	Dx	dm	dx
W6	8-4-2	0,10	0,42	0,16	0,66
W5	8-4-2	0,12	0,38	0,14	0,35
P10	8-4-2	0,11	0,49	0,25	0,62
P15	4-2	0,10	0,42	0,10	0,56
P19	4-2	0,10	0,44	0,13	0,47

7. Tempo de exposição do CCD

Para determinar o menor tempo de exposição do CCD que permite classificar os espectros Raman de tecidos arteriais com um taxa de acerto superior a 95% utilizando as redes neurais definidas na Tabela 5, as matrizes de validação e verificação foram adicionadas com vetores de ruído de acordo com a descrição da Seção 4. Em seguida, as matrizes foram comprimidas pelas taxas descritas e aplicadas às redes neurais. As saídas das redes neurais foram analisadas e as taxas de acerto foram calculadas para as matrizes geradas a partir das matrizes de treinamento e validação.

Os resultados da classificação para as diversas redes neurais e para os diversos tempos de exposição são apresentados na Tabelas 6 para os espectros comprimidos por DWT e, na Tabela 7, para os espectros comprimidos por PCA. Nestas tabelas, CP/RNA indica a taxa de compressão e a rede neural utilizada, DP o desvio padrão do ruído, TAT a taxa de acerto para as matrizes geradas a partir da matriz de treinamento e TAV as taxas de acerto para as matrizes geradas a partir da matriz de validação.

Tabela 6 Taxa de acerto para a DWT

CP/RNA	DP	TAT	TAV
W6 8-4-2	0.10	100	100
	0.20	97,7	96
	0.40	91,2	89,5
W5 8-4-2	0.10	100	100
	0.20	99,7	99,5
	0.40	92,5	89

Tabela 7 Taxa de acerto para a PCA

CP/RNA	DP	CCPT	CCPV
P10 8-4-2	0.10	100	99,5
	0.20	100	99
	0.40	95,2	92,5
P15 4-2	0.10	100	100
	0.20	98,7	98
	0.40	93,2	92
P19 4-2	0.10	100	100
	0.20	99	97,5
	0.40	94	93,5

8. Conclusões

Com base nos resultados apresentados nas Tabelas 6 e 7 conclui-se que:

a) Quando o tempo de exposição do CDD for superior a 40 ms ($\sigma_n < 0,10$) as redes neurais selecionadas classificam corretamente 100% das amostras para os espectros Raman comprimidos através de DWT para as taxas de 592:10 (W6) e 592:19 (W5) e para os espectros comprimidos por PCA para as taxas de 592:19 (P19), 592:15 (P15) e 592:10 (P10).

b) Para o tempo de exposição do CCD de 20 ms ($\sigma_n = 0,20$) as redes neurais classificam os espectros gerados tanto a partir da matriz de treinamento quanto da matriz de validação com uma taxa de acerto maior que 95% para as taxas de compressão descritas no Item a.

c) Quando o tempo de exposição do CCD for menor que 10 ms ($\sigma_n > 0,40$) a taxa de acerto na classificação dos espectros é menor que 95% para as redes neurais e taxas de compressão dos espectros descritos no Item a.

d) Não foi verificada diferença substancial entre os métodos de compressão utilizados. Ambos os métodos podem ser utilizados para comprimir os espectros até a taxa de 592:10. Para taxas superiores a 59:10 não foi possível definir uma rede neural utilizando os critérios definidos na Seção 6 para classificar satisfatoriamente os espectros.

e) Quando a taxa de compressão de 592:10 for utilizada, faz-se necessária a utilização da rede neural com duas camadas escondidas (RNA-8-4-2), enquanto para a taxa de 592:19 a rede neural com apenas uma camada escondida (RNA-4-2) pode ser utilizada.

O requerimento de se utilizar de forma eficiente o equipamento proposto (tempo de aquisição e

processamento de espectro Raman menor que 100 ms) pode ser satisfeito utilizando-se a metodologia de processamento descrita neste trabalho.

Os algoritmos aqui apresentados podem ser implementados para uma estação de trabalho baseada em processadores digitais de sinais (DSP – Digital Signal Processing). O tempo estimado para o processamento de cada espectro no ADSP-21061 da Analog Device operando em 30 MHz foi menor que 5 ms. Assumindo-se que o tempo de transmissão de dados entre o espectrômetro e a estação de processamento é da ordem de 10 ms o tempo de exposição do CCD poderá ser de até 80 ms. Neste caso, o sistema poderá operar com uma boa margem de segurança.

Referências

- [1] Sathaiiah, S.; et al: "Diagnosis of Human Coronary Artery with Near Infrared Raman Spectroscopy"; *Proceedings of the International Conference on Raman Spectroscopy*, XV, 1120, 1996.
- [2] Hanlon, E. B.; et al: "Prospects for in Vivo Raman Spectroscopy"; *Phys. Med. Biol.*; 45 R1-R59, 2000.
- [3] Paula Jr., A. R.; Peris, C. M. F.; Sidaoui, H.; Sathaiiah, S.: "Digital Processing of Raman Spectra for Diagnosis of Atherosclerosis"; *Third International Caracas Conference on Device, Circuits and Systems*, pg S75-1 to S75-6, Cancun, Mexico, Março de 2000.
- [4] Paula Jr, A. et al: "Pré-Processamento do Espectro Raman para Detecção de Placas Ateromatosas através de Redes Neurais"; *Proceedings of the V Brazilian Conference on Neural Networks*, pg 259–264, Rio de Janeiro, Brasil, Abril de 2001.
- [5] Haykin, S.: "Neural Network: A Comprehensive Foundation"; *Prentice Hall*, Second Edition; New Jersey, USA, 1999.
- [6] Ham, F. M.; Kostanic, I.: "Principle of Neurocomputing for Science and Engineering" Mc GrawHill, New York, 2001.
- [7] Kaiser, G.: "A Friendly Guide to Wavelets"; Birkhäuser, Berlin, 1994.
- [8] Jolliffe, I. T.; "Principal Component Analysis". Springer-Verlag; New York, 1986.
- [9] Peris, C. M. F., Paula Jr, A. R.; "Análise Comparativa de Filtros Wavelets para Processamento de Sinais Raman"; *Workshop of Applied and Computational Mathematics*; São José dos Campos, 2000.