

## 近红外光谱预处理中几种小波消噪方法的分析

郝勇, 陈斌\*, 朱锐

江苏大学生物与环境工程学院, 江苏 镇江 212013

**摘要** 以菜籽油的一阶导数近红外光谱为研究对象, 探讨小波变换在近红外光谱信号消噪方面的应用, 分别采用九点平滑法、小波分解与重构法、非线性小波软阈值法和小波变换模极大值法对导数光谱进行消噪处理并对消噪效果进行比较分析。结果表明, 小波变换模极大值光谱消噪法得到了较高的信噪比, 小波软阈值法次之, 其余两种方法消噪效果较差。小波变换模极大值法有效的保留了光谱的有用信息, 为近红外光谱的分析精度和模型的稳健性奠定了良好的基础。

**主题词** 近红外光谱; 小波变换; 消噪

**中图分类号**: TN911.7

**文献标识码**: A

**文章编号**: 1000-0593(2006)10-1838-04

### 引言

光谱预处理在近红外光谱分析技术中是相当重要的, 预处理方法的选取对所建立光谱模型的预测精度和稳定性具有很重要的意义。近红外光谱的噪声主要是由于环境温度、化学成分和含量的波动以及电阻的热噪声等因素产生, 而这些噪声大都属于白噪声。光谱的一阶微分可以去除部分线性或接近线性的背景和噪声光谱对目标光谱的影响。但是, 经微分后, 光谱的随机误差会被放大, 所以更需要有效的消噪处理。小波变换时-频域的局部化性质可以很好地获得信号的局部化特性, 对突变信号和非平稳信号的检测非常有效。研究表明, 利用小波分析能有效地消除光谱中的噪声<sup>[1]</sup>。本文主要针对一阶导数光谱进行小波消噪研究。

### 1 小波变换的基本算法

#### 1.1 小波分解与重构法

基于 Mallat 算法的小波变换, 是将信号通过低通和高通两组滤波器, 近似分量主要反映信号的低频部分, 细节分量主要反映信号的高频部分。因此可以根据光谱信号和噪声信号的频谱分布有选择地去掉某几个尺度下的细节分量, 用保留下来的小波系数重构信号, 达到消噪的目的。小波分解与重构法本质上相当于一个具有多通道的带通滤波器, 主要用于信号与噪声的频带相互分离的确定性噪声的情况。

#### 1.2 非线性小波软阈值法<sup>[2]</sup>

由于小波基都是紧支集的, 因此小波变换具有“集中”的能力, 可以使信号能量在小波变换域集中在少数小波系数上, 而噪声信号的能量在小波系数域内分散于大量的小波系数上, 因为信号的小波系数值大于低幅度噪声的小波系数值, 这就意味着对小波系数进行阈值处理, 可在小波域中去除低幅度噪声。

对光谱信号采用小波软阈值法消噪的过程可分为 3 个步骤。

(1) 对光谱信号进行小波分解

选择一个小波基并确定一个小波分解的层次  $N$ , 然后对光谱信号  $S$  进行  $N$  层分解;

(2) 小波分解高频系数的阈值量化

对第 1 到第  $N$  层的每一层高频系数, 选择一个阈值进行阈值化处理;

(3) 光谱信号的重构

根据小波分解第  $N$  层低频系数和经过量化处理后的第 1 层到第  $N$  层的高频系数, 进行光谱信号重构。

在这三个步骤中, 最关键的环节就是如何选取阈值和如何进行阈值的量化, 它直接关系到光谱的消噪质量。利用非线性小波软阈值法消噪时, 阈值的选取方法定义如下

$$\hat{\alpha} = T_h(Y, t) = \begin{cases} \operatorname{sgn}(Y) (|Y| - t) & |Y| > t \\ 0 & |Y| < t \end{cases}$$

这里  $\operatorname{sgn}$  表示符号函数,  $\operatorname{sgn}(Y)$  表示该式的符号与  $Y$  的符号相同。其中  $t$  是阈值,  $Y$  是小波变换后的小波系数,  $\hat{\alpha}$  是阈值选取后的小波系数。然后根据阈值选取后的系数进行光谱信号重构, 得到消噪后的光谱信号。

收稿日期: 2005-06-22, 修订日期: 2005-11-08

基金项目: 国家自然科学基金项目(33371050)和江苏省 2004 年博士后项目资助

作者简介: 郝勇, 1978 年生, 江苏大学生物与环境工程学院硕士研究生 \*通讯联系人

### 1.3 小波变换模极大值法<sup>[3]</sup>

信号的奇异点指信号中的突变点, Lipschitz 指数是表征信号局部奇异点特征的一种量度, 其定义如下。

设有正整数  $n, n + 1$ , 如果存在正整数  $A > 0$  及  $n$  次多项式  $p_n(x)$ , 使得

$$|f(x) - p_n(x - x_0)| \leq A|x - x_0|^n$$

对于  $x \in (x_0 - \delta, x_0 + \delta)$  成立, 则称  $f(x)$  在  $x_0$  点是 Lipschitz

的。函数在某一点的 Lipschitz 指数表征了该点的奇异性大小。越大, 该点的光滑度越高; 越小, 该点的奇异性越大。函数在某一点可导, 它的 Lipschitz 指数为 1; 函数在某点不连续, 但其值有限, 则 Lipschitz 指数为 0。白噪声的 Lipschitz 指数为  $-1/2$ ,  $\alpha > 0$ 。在尺度  $j$  下, 若  $\forall x \in (x_0 - \delta, x_0 + \delta)$ , 有

$$|Wf(s, x)| \leq |Wf(s, x_0)|$$

则称  $x_0$  为小波变换在尺度  $j$  下的局部模极大值点。信号  $f(x)$  的 Lipschitz 指数与小波变换模极大值满足

$$\log_2 |W_2 f(t)| \approx \log_2 k + j$$

对于一般信号, 由于  $\alpha > 0$ , 小波变换的模极大值将随着  $j$  的增大而增大; 而对于白噪声, 由于  $\alpha < 0$ , 其模极大值随着  $j$  的增大而减小。因此, 观察不同尺度间小波变换模极大值变化的规律, 去除幅度随尺度的增加而减小的点(对应噪声的极值点), 保留幅度随尺度增加而增大的点(对应有用信号的极值点), 然后再由保留的模极大值点进行信号重建, 即可达到消噪的目的。

## 2 实验过程及结果分析

### 2.1 仪器与实验材料

实验仪器为北京第二光学仪器厂生产的 WQF-400N 型傅里叶变换近红外光谱分析仪, 探测器选用硫化铅(PbS)探测器; 采用 10 mm 石英比色皿; 实验选用的波数范围为  $9\,500 \sim 3\,600 \text{ cm}^{-1}$ ; 光谱的扫描分辨率为  $4 \text{ cm}^{-1}$ ; 扫描采用 64 次平均; 光源选用 6V 卤钨灯; 实验材料: 芥酸含量不同的 5 个菜籽油样品。

### 2.2 实验过程及结果分析

图 1 所示为 1 号菜籽油样品近红外透射光谱图。从图上可知, 光谱在小于  $4\,100 \text{ cm}^{-1}$  以后, 探测器达到了边缘状态, 产生了很大的噪声, 经求导虽然可以消除仪器的平移误差<sup>[4]</sup>, 但随机误差也被放大。对该样品光谱进行建模的时候, 在波长优选环节, 不把小于  $4\,100 \text{ cm}^{-1}$  这个波数区域内的光谱选入模型。为了对小波消噪效果进行比较, 在本研究中对全光谱进行消噪实验。传统的预处理方法是取多点平滑。平滑对去除高频噪声十分有效, 但平滑对光谱的谱形产生影响, 随着选取平滑点数的增多, 谱带的半宽度增加, 导致光谱分辨率下降。采用小波变换方法对光谱信号进行消噪处理, 最大的特点就是可以区分高频信号成分和噪声成分, 在去除大部分噪声的同时对光谱的峰形没有太大影响。本研究中涉及的几种小波消噪法统一选用 db3 小波对光谱信号进行 6 尺度分解。采用小波分解与重构法时, 首先对求导后的光谱进行多尺度分解, 然后对近似部分  $d_6$  和细节部分  $d_5$  和  $d_4$  分别进行重构相加得到消噪后的光谱信号; 小波软阈值法消噪时,

对多尺度分解后的导数光谱的细节部分  $d_6, d_5, d_4, d_3, d_2$  和  $d_1$  分别给以阈值为 0.002, 0.002, 0.002, 0.005, 0.008 和 0.014 对小波系数进行修正, 最后进行小波逆变换得到消噪后的光谱; 小波模极大值法消噪时迭代次数为六次。

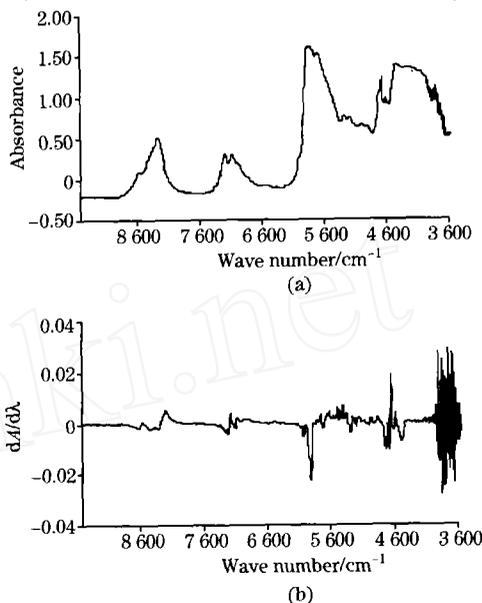


Fig 1 Near infrared spectrum of No. 1 rapeseed oil  
(a): Original; (b): first derivative spectrum

图 2 所示为 1 号菜籽油样品导数光谱消噪效果的局部放大图(波数范围为  $7\,600 \sim 4\,680 \text{ cm}^{-1}$ )。从导数光谱的消噪光谱可以看出, 几种消噪方法各有优劣。多点平滑法对峰高的扭曲较峰面积更为严重, 而且去噪的信噪比较低。采用多点平滑滤波, 点数的选择是该法的关键, 它取决于谱带或谱峰的最大半宽度, 在本文中选用九点平滑。

小波分解与重构法消噪, 适合于信号和噪声谱分离的情况, 对近红外光谱信号, 经将高频系数强制置零消噪后, 重构信号会使原信号失去一些细节, 使谱图信号失真, 而且消噪后的信噪比和多点平滑效果差不多。

非线性小波软阈值法消噪主要适用于信号中混有白噪声的情况, 用阈值法消噪的优点是噪声几乎完全得到抑制, 且反映原始信号的特征尖峰点得到很好的保留, 有关文献<sup>[5]</sup>证明了用软阈值的方法消噪能使估计信号实现最大均方误差最小化, 即消噪后的估计信号是原始信号的近似最优估计; 且估计信号至少和原始信号同样光滑而不会产生附加振荡。该方法还具有广泛的适应性, 因而是众多小波消噪方法中应用最为广泛的一种。但是剔除白噪声以后, 信号出现一定程度的失真, 能量有所损失而且波形出现了畸变。

用模极大值法剔除噪声以后, 有效地保留信号的奇异点信息, 光谱信号的信噪比较高, 一些很微弱的细节信息都能够检测出来。利用该方法消噪时, 小尺度下小波系数受噪声影响非常大, 产生许多极值点; 大尺度会使信号丢失某些重要的局部奇异性<sup>[6]</sup>, 因此, 消噪的关键之一就是选择合适的分解尺度。

对于去噪效果的评定, 一般采用信噪比作为标准。将一

阶导数光谱信号定义为  $x(n)$ , 消噪后的光谱定义为  $\hat{x}$ , 则小波消噪后估计信号的信噪比(SNR)计算公式定义为

$$\text{SNR} = 20 \times \log_{10} (\text{norm}(x(n)) / \text{norm}(x(n) - \hat{x}(n)))$$

这里  $\text{norm}(x(n))$  是指向量  $x(n)$  的欧几里德长度, 信噪比单位是分贝。原始信号与消噪信号之间的均方根误差(RMSE)定义为

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{n=1}^n [x(n) - \hat{x}(n)]^2}$$

光谱信号去噪的目标是: 既能够较多地去除噪声, 同时

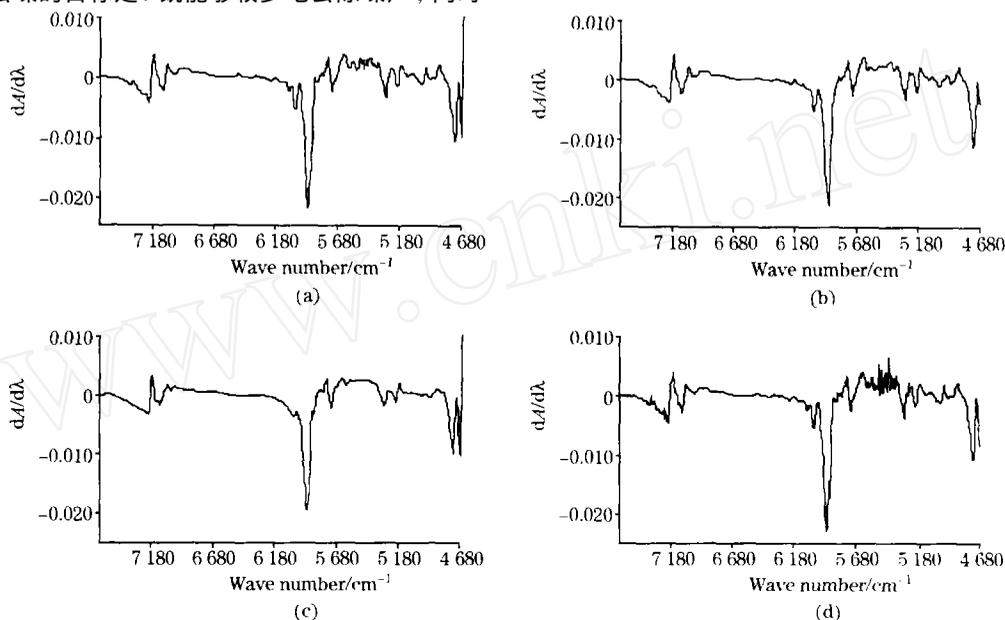


Fig 2 Comparison of several denoising methods for No. 1 rapeseed oil

(a) : Nine point smoothing spectrum; (b) : The wavelet decomposition and reconstruction denoising spectrum;  
(c) : The nonlinear wavelet soft-threshold denoising spectrum; (d) : The modulus maxima denoising spectrum

Table 1 Comparison of several wavelet denoising for SNR and RMSE

样品编号	九点平滑法消噪的 SNR(RMSE $\times 10^{-3}$ )	小波分解与重构法消噪的 SNR(RMSE $\times 10^{-3}$ )	非线性软阈值法消噪的 SNR(RMSE $\times 10^{-3}$ )	模极大值法消噪的 SNR(RMSE $\times 10^{-3}$ )
1	2.409 4(3.125 7)	2.241 4(3.186 7)	6.546 5(1.941 3)	16.726 7(0.601 3)
2	2.569 3(3.079 6)	2.381 4(3.146 9)	6.605 2(1.935 1)	16.758 6(0.601 2)
3	2.684 6(3.015 8)	2.465 3(3.093 2)	6.624 6(1.916 2)	16.907 9(0.586 5)
4	2.834 1(2.891 9)	2.595 1(2.972 6)	6.616 7(1.870 9)	17.500 1(0.534 4)
5	3.044 2(2.793 3)	2.764 2(2.884 8)	6.723 7(1.828 7)	17.667 5(0.518 7)
平均值	2.708 3(2.981 3)	2.489 5(3.056 8)	6.623 3(1.898 4)	17.112 2(0.568 4)
标准差	0.218 1(0.122 5)	0.179 1(0.112 2)	0.057 2(0.042 7)	0.393 5(0.035 0)

### 3 结束语

由上面的分析可以知道在光谱预处理部分引进小波变换去除光谱噪声得到了很好的处理效果。小波阈值法利用近红外光谱信号与噪声之间的频率差异, 通过在不同尺度设定阈值去除噪声, 而对光谱的峰形的损伤很小, 是一种理想的分频滤波手段。根据信号在小波变换多尺度上模极大值点可以

又希望原始光谱信息丢失得尽可能少。所以信号的信噪比越高, 原始信号与消噪信号的均方根误差越小, 则消噪信号就越接近于原始信号, 消噪效果越好<sup>[7]</sup>。表 1 列出了 5 个菜籽油样品四种消噪方法的 SNR 和 RMSE 值, 从表中可以看到模极大值法消噪性能最好。信噪比明显优于其他方法, 消噪后的 RMSE 介于  $(0.568 4 \pm 0.035 0) \times 10^{-3}$ 。说明对于同一批样品采用模极大值法消噪时, 无需反复选择小波分解尺度, 消噪过程比较理性。

定位信号的奇异点, 也就是光谱中的各个峰变点, 近红外光谱中携带信息的部分主要在波峰和波谷, 如果描述了峰和谷的变化, 就等于描述了光谱的信息。在利用小波分析消噪过程中, 小波母函数和分解尺度的选取是利用该法去除光谱噪声的一个难点。从信号分析的角度出发在近红外光谱预处理中引入小波变换得到了很好的消噪效果, 但是在利用近红外光谱进行定量分析时, 对于这一特殊信号, 去噪效果的优劣最终还要以所建模型的稳健性和精度进行进一步判定。

## 参 考 文 献

- [1] L Ü Rui-lan, WU Tie-jun, YU ling(吕瑞兰, 吴铁军, 于 玲). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2004, 24(7): 826.
- [2] HU Chang-hua, ZHANG Jun-bo, XIA Jun, et al(胡昌华, 张军波, 夏 军, 等). System Analysis and Design Based on MATLAB: Wavelet Transform(基于 MATLAB 的系统分析与设计: 小波分析). Xi'an: Xi'an Electronic Science and Technology University Press(西安: 西安电子科技大学出版社), 1999. 12.
- [3] Stephane Mallat. A Wavelet Tour of Signal Processing(信号处理的小波导引). Beijing: China Machine Press(北京: 机械工业出版社), 2002. 9.
- [4] ZHENG Yong-mei, ZHANG Tie-qiang, ZHANG Jun, et al(郑咏梅, 张铁强, 张 军, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2004, 24(12): 1546
- [5] Donoho D L. IEEE Transaction on Information Theory, 1995, 41(3): 613.
- [6] Stephane Mallat, Wen Liang. IEEE Transaction on Information Theory, 1992, 38(2): 617.
- [7] Kicey C J, Lennard C J. Fourier Analysis and Appl., 1997, 3(1): 63.

## Analysis of Several Methods for Wavelet Denoising Used in Near Infrared Spectrum Pretreatment

HAO Yong, CHEN Bin\*, ZHU Rui

College of Biological and Environment Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China

**Abstract** Based on the wavelet analysis, the noise of the near infrared first derivative spectrum of rapeseed oil is eliminated. Several popular wavelet denoising methods are introduced, including wavelet decomposition and reconstruction method, nonlinear wavelet soft-threshold denoising method, and wavelet transform modulus maxima method. The results show that the wavelet transform modulus maxima method is the best, the nonlinear wavelet soft-threshold method is the second, and other are worse. The wavelet transform modulus maxima method can produce more precise model with little deviation.

**Keywords** Near infrared spectrum; Wavelet transform; Denoising

(Received Jun. 22, 2005; accepted Nov. 8, 2005)

\*Corresponding author