

## 基于小波变换和高斯拟合的在线谱图综合处理方法

李翠萍<sup>1,2</sup>, 韩九强<sup>1\*</sup>, 黄启斌<sup>2</sup>, 穆宁<sup>2</sup>, 朱大洲<sup>3</sup>, 郭春涛<sup>4</sup>, 曹丙庆<sup>2</sup>, 张琳<sup>2</sup>

1. 西安交通大学智能网络与网络安全教育部重点实验室, 陕西 西安 710049
2. 防化研究院, 北京 102205
3. 国家农业信息化工程技术研究中心, 北京 100097
4. 北京普析通用仪器有限责任公司, 北京 100081

**摘要** 微小型移动式现场在线检测技术是分析仪器发展的新领域。针对复杂工作环境中谱图存在强噪声干扰、谱峰重叠、不规则峰形等严重影响仪器的定性和定量准确度的瓶颈技术, 提出了一种基于小波变换和高斯拟合相结合的谱图在线综合处理方法, 用自研的仪器对甲苯和全氟三丁胺两种典型化合物的谱图进行了处理, 并与实验室分析仪器普遍应用的算法进行了对比分析。结果表明, 综合方法能够有效解决强噪声干扰、谱峰重叠、不规则峰形问题, 提高仪器的定性和定量准确性, 同时能够实现数据压缩, 满足仪器的在线实时检测要求。综合方法处理甲苯特征峰的平均信噪比(SNR)较移动平滑方法提高了1.3倍, 峰位误差 $\Delta M$ 降低了3.6倍, 处理全氟三丁胺谱图的数据压缩比为197:1。

**关键词** 小波变换; 高斯拟合; 信号去噪; 谱图处理; 数据压缩; 现场在线检测

**中图分类号**: O657; TP301 **文献标识码**: A **DOI**: 10.3964/j.issn.1000-0593(2011)11-3050-05

### 引言

精密仪器的小型化、微型化、功能专门化以及成本低价化是目前分析仪器发展的一个重要趋势<sup>[1]</sup>。微小型移动式现场检测技术是分析仪器发展的新领域, 随着电子技术、新材料、新工艺领域的飞速发展, 为适应科技进步和市场需求, 涌现出了很多微小型光谱仪、质谱仪等研究成果<sup>[1-3]</sup>。微小型移动式现场检测仪器能够由车载或人员携带深入现场实现快速启动、无需进行样品前处理, 在线实时检测, 具有移动性强、通用性好、灵敏度高、响应时间快、环境适应能力强、智能化程度高、操作简单等特点, 广泛用于复杂环境下对现场物质快速定性和定量检测, 在环境监测、生产安全、食品安全、公共安全以及航天和军事等领域越来越发挥着重大的作用。不同于实验室分析仪器, 由于移动式现场检测仪器常常工作在野外复杂的现场环境中, 加之受国内仪器制造水平的制约, 仪器采集的信号常常包含着复杂的噪声干扰, 存在谱峰重叠、峰形不规则等现象, 这将会严重影响特征信息的提取和谱峰识别。通常用于谱图信号预处理和谱峰特征提取的方法有<sup>[4-7]</sup>: 移动平均平滑(moving and averaging, MA)、

多项式最小二乘拟合平滑(savitzky-golay, SG)、傅里叶变换(FFT)、卡尔曼滤波(KMF)、中值滤波(median filter, MF)、小波变换(WT)、匹配滤波等等。针对谱峰重叠和不规则峰形问题, 谱峰优化方法如二阶导数法能够增强谱图的分辨率<sup>[8]</sup>, 通过谱峰函数如高斯函数(Gaussian)、洛伦兹函数(Lorentzian)或 $\text{sech}^2$ 函数拟合修正不对称谱峰形<sup>[9]</sup>, 通过多项式回归拟合方法实现飞行时间质谱对生物蛋白的高精度测量<sup>[10]</sup>。上述方法分别对于去除高频噪声、尖脉冲、基线漂移、化学噪声、优化谱图获得了较好的效果, 但文献报道的方法尽管算法先进、处理效果较好, 但大多用于实验室分析仪器的离线处理, 算法复杂, 实时性较差, 难以满足现场检测仪器的应用需要。现场检测仪器除了具有强噪声干扰、谱峰形状不规则外, 此类仪器用于现场在线连续监测往往数据量大, 而为了实现微型化、低功耗等研究目标, 采用的微处理器储存容量相对较小, 且针对现场突发事件检测又力求算法简单, 仪器响应时间短。因此, 既能有效去除强噪声干扰, 又能解决谱峰重叠和不规则峰形问题, 同时还需满足现场在线实时处理, 是现场检测分析仪器谱图处理的难点<sup>[9,11]</sup>。

为解决上述问题, 本文提出了一种离散小波变换和高斯

收稿日期: 2011-05-13, 修订日期: 2011-07-20

基金项目: 国家重点基础研究发展计划(973计划)项目(2011CB706900)资助

作者简介: 李翠萍, 女, 1966年生, 防化研究院高级工程师 e-mail: cuipingli86@126.com

\*通讯联系人 e-mail: jqhan@mail.xjtu.edu.cn

拟合相结合的在线谱图综合处理方法。首先采用离散小波变换对质谱信号进行去噪处理,然后通过建立高斯模型对谱峰信号进行拟合和 LM 非线性优化,从而改善峰形质量,提高仪器的信噪比和谱峰识别的准确率。通过用自研的车载质谱仪对甲苯和全氟三丁胺两种典型样品进样分析,验证了所提出方法的有效性。同时还将本文方法与目前实验室分析仪器普遍采用的平滑降噪和谱图处理方法进行了对比,对信噪比(SNR)、根均方误差(RMSE)、实时性、峰面积、半峰宽和峰位等信号处理参数进行了分析对比。

## 1 实验与方法

### 1.1 信号模型

设从现场检测分析仪器采集的离散观察数据  $X(n)$  可描述为

$$X(n) = S(n) + B(n) + N(n) \quad (1)$$

其中,  $X(n)$  为原始谱图信号的离散观察数据,  $n=1, \dots, N$  为数据长度,  $S(n)$  为样品的特征谱信号,  $B(n)$  为低频基线或背景干扰,  $N(n)$  为高频噪声。

谱峰信号  $S(n)$  用高斯模型描述, 则式(1)可表述为

$$X(n) = \sum_m \frac{A_m}{\omega_m \sqrt{\pi/2}} \exp\{-2[(n-c_m)/\omega_m]^2\} + B(n) + N(n) \quad (2)$$

式中,  $A_m$  为特征峰面积,  $\omega_m$  为特征峰半峰宽,  $c_m$  为特征峰中心位置,  $m$  为化合物特征峰。设谱峰信号  $S(n)$  的频率分布位于高频噪声和低频基线(背景)之间, 基线或背景信号  $B(n)$  因受物理或化学过程影响(如温度漂移、背景干扰等)通常表现为具有缓变特征的低频扰动, 噪声  $N(n)$  由随机噪声和化学噪声组成, 假设  $N(n)$  为零均值分布的高斯白噪声。

### 1.2 小波去噪

从信号理论的观点, 谱峰信号  $S(n)$  通常具有峰变特性和多分辨特性<sup>[9]</sup>, 因此, 小波变换的多分辨分析的特点和时频局部特性是处理谱峰信号的理想工具。小波去噪包括三个关键的步骤: 选取小波基、小波阈值和阈值函数。选择适合现场检测仪器信号和噪音特点的小波滤波器类型、合适的分解层数, 同时还能够兼顾仪器在线处理的需要是研究的关键。本文尝试了多种自适应选取小波基、自适应选择阈值的方法。根据谱峰信号的峰形特点, 对小波家族中广泛应用于信号处理的 Daubechies, Symlets 和 biorthogonal 小波系列中十三个小波函数分别采用最小描述长度准则(MDL)<sup>[11,12]</sup>、最大信噪比和消耗时间进行了小波基和阈值的自适应选取(分解层数均为 4 层)。从降噪效果来看, db4, sym3 和 bior5.5 去噪效果较好, 综合考虑算法的复杂性和处理时间, 采用 Daubechies 小波系的 db4 小波函数、4 层分解进行降噪处理。针对现场分析仪器的应用特点, 降噪阈值采用通用阈值方法进行估计<sup>[13]</sup>, 阈值函数采用软阈值方法<sup>[14]</sup>。通过对小波变换后第一层分解的轮廓部分进行基线处理, 扣除缓变的低频基线漂移, 然后对进一步分解的小波系数进行软阈值处理, 去除高频噪声, 保留特征信息。

为了与实验室分析仪器常用的信号处理效果进行对比分

析, 采用窗口移动平均平滑处理(MA)方法对仪器的实测数据进行了平滑处理, 移动窗口宽度设置为 11 点。

去噪效果和失真度采用信噪比(SNR)和均方根误差(RMSE)作为评价指标, 信号的信噪比越高, 噪声消除越充分, 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>[15]</sup>。

### 1.3 高斯拟合

小波降噪从理论上能够解决信号去噪、基线校正、谱峰重叠等问题, 但并不能有效解决不规则峰形问题。采用高斯模型对降噪处理后的信号进行拟合以修正不规则峰形。式(2)中特征峰的峰面积  $A_m$ 、半峰宽  $\omega_m$ 、峰中心  $c_m$  三个谱峰参数的准确确定是建模和拟合的关键。在峰参数的确定中, 考虑到不规则的峰形问题, 首先在小波变换降噪处理后的峰形数据中通过峰极大值法确定特征峰的最大值  $h_{\max}$  及其对应的位置  $x_0$ , 然后由此向左右分别寻找峰的首尾端点  $x_l$  和  $x_r$ , 计算半峰宽参数  $\omega_m$ , 通过积分求得峰面积  $A_m$ , 利用质心法求出峰中心  $c_m$ <sup>[16]</sup>

$$c_m = \frac{\sum_{i=x_l}^{x_r} y_i x_i}{\sum_{i=x_l}^{x_r} y_i} \quad (3)$$

在拟合中应用 LM 算法(Levenberg-Marquardt)进行非线性优化<sup>[17]</sup>, 对优化拟合后的特征峰进行逐一识别, 得到规则的高斯特征峰, 通过进一步的峰强和峰位计算, 并归一化处理, 得到质谱柱状图, 用于与国际标准谱库(如 NIST)中的谱图进行检索和比对, 得到准确的物质定性结果; 依据峰强和标准浓度建立标准曲线, 得到物质的准确定量结果。

化合物谱图信号中每个特征峰的峰面积  $A_m$ 、半峰宽  $\omega_m$ 、峰中心  $c_m$  参数的准确性是仪器能够准确定性和定量的关键参数, 也是评价仪器灵敏度、分辨率、选择性的关键指标。

### 1.4 信号获取

试验数据采用自行研制的车载质谱仪样机进行采集, 仪器的四极杆质量分析器、EI 离子源、膜直接进样系统、离子泵真空系统、信号采集和处理系统等核心部件全部自主研发。仪器的质量数范围: 1~550 amu, 分辨率:  $\Delta M \leq 1$  amu; 进样工作参数: 质谱真空度  $1 \times 10^{-4}$  Pa, 灯丝能量: 69.65 eV, 离子源温度: 101.1 °C, 电子倍增器电压 954.3 V, 扫描范围: 50~550 amu。进样方式为直接进样, 扫描方式为全扫描。样品选取甲苯(toluene)和全氟三丁胺(FC43, perfluorotributylamine), 甲苯为 M 和 M+1 相邻特征峰的典型化合物, 全氟三丁胺为在仪器质量数范围内特征谱分布广泛的典型化合物, 通常用于质谱仪的内标, 其谱图的质量代表了仪器的性能和水平。其中, 甲苯的进样量为 20 ng, 用微量进样器移取 10  $\mu$ L 的甲苯样品, 置入 10 mL 的容量瓶中, 用甲醇稀释, 此时甲苯溶液浓度为 0.1%。移取上述溶液 50  $\mu$ L 至 5 mL 容量瓶中, 用甲醇定容, 直到溶液浓度为  $10^{-5}$ 。再用 5  $\mu$ L 的微量进样器移取样品 2  $\mu$ L 进样, 即为 20 ng 进样量。对于全氟三丁胺(perfluorotributylamine), 采用纯样品进样 10  $\mu$ L。

所有的计算均采用自编的 MATLAB 程序完成, 小波去噪调用 MATLAB 中的 WAVELET 小波工具箱进行, 计算

平台为 MATLAB R2010b (Windows XP, the Mathworks Inc., Natick, MA), 计算机配置为 Intel 奔腾双核 2.8 GHz, 1 GB 内存。

## 2 结果与讨论

采用离散小波变换 (DWT) 分别对甲苯和全氟三丁胺的原始谱图进行去噪处理, 并与目前常用的移动平均平滑方法 (MA) 的去噪效果进行对比。图 1(a) 为仪器对甲苯进样采集的谱图信号并叠加了高斯白噪声后的含噪信号, (b) 和 (c) 分别为移动平均平滑和小波去噪后的谱图。图 2(a) 和 (b) 为甲苯谱图信号采用高斯拟合前后的谱图信号。图 3 和图 4 分别为仪器对全氟三丁胺进样采集的原始信号和小波降噪后的谱图信号, 图 4 为全氟三丁胺谱图信号采用高斯拟合前后的谱图信号。表 1 列出了两种降噪方法后的信噪比 SNR 和根均方差 RMSE, 并列出了采用高斯拟合和未进行峰形修正的谱峰参数 ( $A$ ,  $\omega$ ,  $c$ ) 对照表。表 1  $\Delta M$  为综合处理后的峰位  $c_m$  与国际标准谱库 NIST2.0 的  $c_0$  的峰位偏差, 用于表征定性检测精度。为了验证算法的在线实时性, 表 1 分别记录了用两种方法综合处理每张化合物谱图的时间  $t$  (ms), 同时计算了处理每个特征峰信号的压缩比  $R$ 。

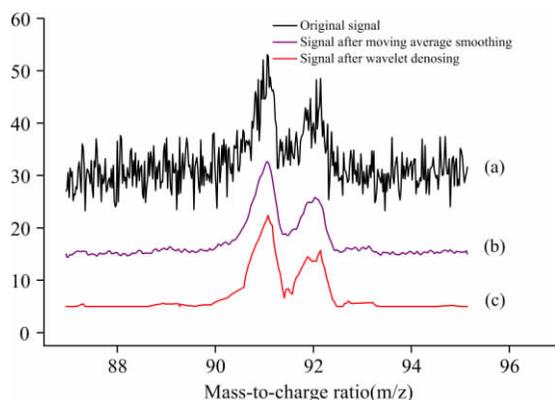


Fig 1 The spectrometric signals of toluene

(a): Original signal; (b): Signal denoised by MA;  
(c): Signal denoised by WT

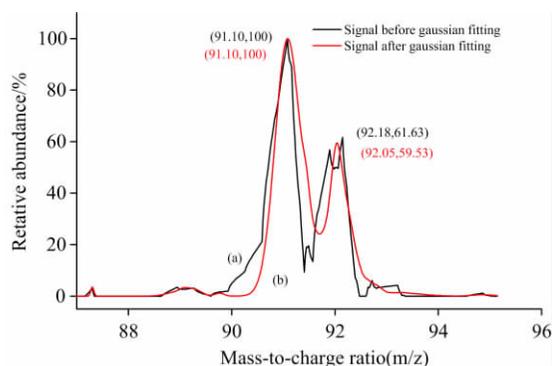


Fig 2 The spectrometric signals of toluene

(a): Before Gaussian fitting; (b): After Gaussian fitting

由图 1 可见移动平均平滑和小波方法有效去除噪声, 通

过分析表 1 中移动平滑和小波去噪后信号的信噪比 SNR, 得出小波方法在处理噪声干扰严重、信噪比低的信号 (叠加强噪声后的甲苯信号) 去噪方面要优于移动平滑方法。小波去噪处理甲苯的平均信噪比较移动平滑方法提高了 1.3 倍。分析表 1 中的根均方差 RMSE 可知, 小波去噪后信号的根均方差小于移动平均平滑处理后信号的根均方差, 小波去噪方法能更好地保留原始信号的细节信息, 信号失真较小。同时, 从图 1 可见, 小波方法还在一定程度上起到了将甲苯  $m/z=91$  和  $92$  两个重叠的相邻峰分开的作用, 这为后续的高斯拟合奠定了基础。

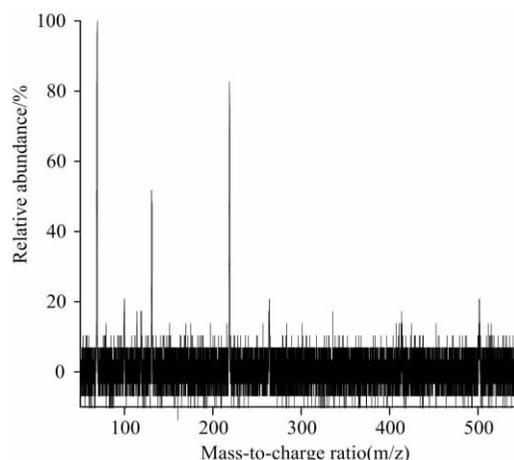


Fig 3 The original signal of perfluorotributylamine before wavelet denoising

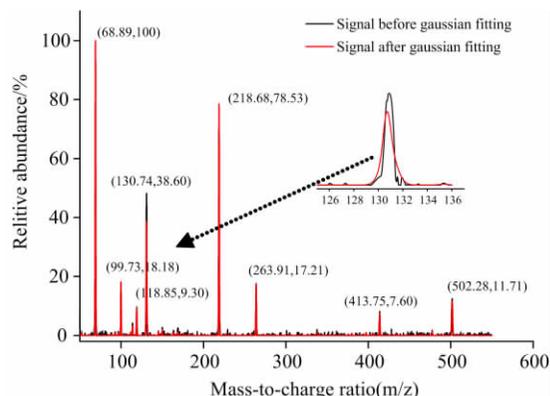


Fig 4 The spectrometric profile of perfluorotributylamine before and after Gaussian fitting

由于仪器性能、环境因素等多种因素影响, 峰形呈现叠加噪声、重叠、不对称等不规则现象。图 1 经过小波去噪, 谱图的噪声已基本被滤除, 信噪比提高, 特征信号得以保留, 但特征峰的不规则峰形问题仍没有解决。图 1(c) 中质荷比  $m/z=92$ , 在峰顶存在两个小的尖峰信号, 这些尖峰很容易被识别成碎片特征离子峰, 谱峰的不规则问题影响了谱峰检测, 进而影响了定性定量分析的精度。图 2 为高斯拟合前后甲苯的谱峰波形图, 可见在质荷比为  $m/z=91$ , 拟合前后特征峰位置基本相同, 但经过高斯拟合后峰形饱满, 更便于后续的谱峰识别。在  $m/z=92$  特征峰位置存在明显差异, 由

于受噪声影响出现了两个尖“峰”，并有明显的不对称现象，给峰识别造成很大困难。经过高斯拟合后， $m/z=92$  谱线  $\Delta M$  从 0.18 降到了 0.05，使谱峰计算误差降低了 3.6 倍，谱图波形平滑、饱满、对称性好，有效地提高了仪器对物质定性和定量分析的准确性。

为了验证方法的有效性，还采用相同的方法对表征仪器综合性能的标准物质全氟三丁胺谱图进行处理研究。由图 4 可见，在质荷比  $m/z=131$ ，在拟合前其峰顶存在着两个峰最大值，见图 4，使得按照通常的峰识别方法得到的谱图中出现  $m/z$  分别为 130.72 和 130.65 两个峰值，而理论值应该为 131，其与理论值的误差分别为 0.28 和 0.35，因此如果不对其谱图进行修正会给谱图检索和物质识别造成很大困难；此外，图 4 中在拟合前还存在很多细小的峰，其中很多峰为残余的噪声所致，而经过高斯拟合后，这种细小的峰的数目大

大降低。经过高斯拟合后，出现 130.72 和 130.65 两个峰值的谱峰被修正为 130.74(见表 1)，其与理论值的误差也由 0.28 和 0.35 变为 0.26。由此可见，对于不规则峰形，高斯拟合算法能够对其进行有效的修正，使其谱图更加接近理论值，减少因谱峰不规则而造成的影响，能够显著提高仪器定性和定量结果的准确性。

此外，从表 1 拟合前后的压缩比中还可以看出，高斯多峰拟合采用三个谱峰参数表征峰信号，使表征甲苯和全氟三丁胺的谱图特征峰的数据量分别由 400 个点和 24 263 个点压缩为含有 6 个和 123 个参数，总体压缩比分别为 67:1 和 197:1，实现了数据压缩，有效减少了数据存储空间。

在算法的运算时间方面，采用本文综合方法所用的时间少于传统窗口平滑方法所用时间，在运算时间上满足仪器的实时在线检测要求。

Table 1 The comparison of different parameters after denoising and fitting by two methods

化合物名称	峰中心标准值 $c_0$	移动平滑		小波降噪		未经高斯拟合处理的谱图参数					高斯拟合处理后的谱图参数					压缩比 /R
		SNR	RMS	SNR	RMS	$c$	$A$	$w$	$\Delta M$	$t/ms$	$A$	$c$	$w$	$\Delta M$	$t/ms$	
甲苯	91	12.74	5.72	15.36	5.53	812	91.10	36	0.10	48	821	91.10	35	0.1	31	21:1
	92	10.53	5.93	14.26	5.89	693	92.18	26	0.18		691	92.05	27	0.05		16:1
	69	18.11	6.04	18.65	5.70	1 024	68.88	59	0.12	1 032	68.89	61	0.11	40:1		
	219	17.29	5.74	17.97	5.01	859	218.66	53	0.34	863	218.68	49	0.32	38:1		
	131	14.26	5.58	14.56	5.04	499	130.72 130.65	41	0.28 0.35	512	130.74	38	0.26	47:1		
FC43	100	8.90	4.46	9.95	3.58	175	99.74	46	0.26	173	163	99.73	44	0.27	110	22:1
	119	4.38	5.06	5.91	4.19	120	118.82	35	0.18		135	118.85	32	0.15		27:1
	264	9.75	3.59	10.53	3.52	186	263.88	46	0.12	196	263.91	44	0.09	24:1		
	502	7.22	3.65	8.02	3.61	138	502.38	38	0.38	139	502.28	36	0.28	51:1		
	414	3.13	4.04	4.85	4.02	96	413.69	37	0.31	413.75	34	0.25	34:1			

### 3 结 论

采用小波变换和高斯拟合相结合的综合方法处理现场在线检测分析仪器谱图存在的强噪声干扰、谱峰重叠和不规则峰形问题，分别对两种典型化合物甲苯和全氟三丁胺的谱图进行了处理，并与实验室分析仪器普遍应用的算法进行了对比分析。研究表明，对于强噪声干扰中的低信噪比谱图信

号，小波变换同窗口移动平滑方法相比能够更好地去除噪声、保留信号特征，可以在一定程度上解决谱峰重叠问题；采用高斯拟合算法能够改善因谱峰重叠、不规则峰形问题造成的定性误差。两种方法综合使用，能够有效提高仪器的定性和定量准确性；同时通过小波变换和高斯拟合，谱图的数据量也得到了显著压缩，节省了仪器的存储空间；通过选择合适的小波基、分解层数和谱峰识别方法，能够满足仪器的在线实时检测要求。

### References

- [1] LI Ming, FEI Qiang, JIN Qin-han, et al(李明, 费强, 金钦汉, 等). Chinese Journal of Scientific Instrument(仪器仪表学报), 2007, 28(6): 1147.
- [2] HAN Wen-nian, XU Guo-bin, WANG Yan, et al(韩文念, 徐国宾, 汪 曛, 等). Journal of Chinese Mass spectrometry Society(质谱学报), 2007, 28(4): 242.
- [3] Gao L, Song Q, Cooks R G. Anal. Chem., 2006, 78(17): 5994.
- [4] Barclay V J, Bonner R F, Hamilton I P. Anal. Chem., 1997, 69: 78.
- [5] Victor P A, Tomas R, Hsuan-Shen Chen, et al. Anal. Chem., 2003, 75: 6314.
- [6] GUO Fei, WANG Yu-lan(郭 飞, 王玉兰). Laser Journal(激光杂志), 2006, 27(4): 51.
- [7] SUN Gui-ling, ZHANG Cui-lan, FANG Yong-hua, et al(孙桂玲, 张翠兰, 方勇华, 等). Chinese Journal of Quantum Electronics(量子电子学报), 2006, 23(1): 22.

- [ 8 ] YAN Yan-lu, ZHAO Long-lian, HAN Dong-hai, et al(严衍禄, 赵龙莲, 韩东海, 等). Elements and Application of Near-Infrared Spectra Analysis(近红外光谱分析基础与应用). Beijing: China Light Industry Press(北京: 中国轻工业出版社), 2005.
- [ 9 ] Eva Lange, Clemens Gropl, Knut Reinert, et al. Pacific Symposium on Biocomputing, 2006, 11: 243.
- [10] Strttmatter E F, Rodriguez N, Smith R D. Anal. Chem., 2003, 75: 460.
- [11] Cai Chun-sheng, Harrington P B. J. Chem. Inf. Comput. Sci., 1998, 38:1161.
- [12] Saito N. In Wavelets in Geophysics. Fofoula G E, Kumar P, Eds. New York: Academic Press, 1994, 299.
- [13] Donoho D L, Johnstone I M, Kerkyacharian G, et al. J. Roy. Stat. Soc. Ser. B, 1995, 57: 301.
- [14] Donoho D L. IEEE Trans. Inf. Theory, 1995, 41( 3): 613.
- [15] SHI Yong, LI Qi-feng, WANG Hua, et al(石 勇, 李奇峰, 汪 华, 等). Acta Pyhsica Sinca(物理学报), 2005, 54(5): 2418.
- [16] Chapman J R. Acadmic Press London, New York and San Francisco, 1978.
- [17] Press W, Teykolsky S W T, Flannery B. Cambridge University Press, 2002.

## An Integrated On-Line Processing Method for Spectrometric Data Based on Wavelet Transform and Gaussian Fitting

LI Cui-ping<sup>1,2</sup>, HAN Jiu-qiang<sup>1\*</sup>, HUANG Qi-bin<sup>2</sup>, MU Ning<sup>2</sup>, ZHU Da-zhou<sup>3</sup>, GUO Chun-tao<sup>4</sup>, CAO Bing-qing<sup>2</sup>, ZHANG Lin<sup>2</sup>

1. Ministry of Education Key Lab for Intelligent Networks and Network Security, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China
2. Institute of Chemical Defense, Beijing 102205, China
3. National Engineering Research Center for Information Technology in Agriculture, Beijing 100097, China
4. Beijing Purkinje General Instrument Co., Ltd., Beijing 100081, China

**Abstract** Miniature mobile field spectrometry is pivotal equipment for qualitative and quantitative *in-situ* analysis of chemical substances. To solve the problem of spectrum signal interfered by complicated noise, overlapped and irregular peak shape recognition, and quick monitoring, an integrated on-line processing method for spectrometric data based on wavelet transform and Gaussian fitting was developed. In this way, toluene and perfluorotributylamine were processed, and the results shows that the integrated method can powerfully and effectively eliminate the noise, retain the original feature, and correct the overlapped and asymmetrical peaks, which can improve the analysis accuracy of instrument, and also achieve data compression. In addition, the method satisfies the requirement of *on-site* analysis for mobile field spectrometry. For the processing of mass spectra of toluene, at the characteristic peaks of 91 and 92, the SNR increased 1.3 times compared to that of moving average smoothing method, while the error between original peaks and theoretic peaks decreased 3.6 times. In addition, Gaussian fitting described the multi-point mass spectra data by three Gaussian parameters, and achieved data compression. For the processing of mass spectrogram of perfluorotributylamine, the ratio of compression was 197 : 1.

**Keywords** Wavelet transform; Gaussian fitting; Signal de-noising; spectrogram processing; Data compression; *In situ* analysis

(Received May 13, 2011; accepted Jul. 20, 2011)

\* Corresponding author