

化学信号滤波的小波新技术*

王 瑛, 莫金垣

(中山大学化学与化学工程学院, 广东 广州 510275)

摘 要: 提出了一种基于墨西哥帽小波的信号滤波的新方法——MWDA。它是一种化学计量学技术, 易于操作, 被成功地应用到分析化学信号的处理中。MWDA 即使处理信噪比为 1 的高噪音信号, 仍能获得满意的结果。

关键词: 墨西哥帽小波滤波算法 (MWDA); 曲线拟合; 滤波; 信号处理

中图分类号: O652.7 **文献标识码:** A **文章编号:** 0529-6579 (2002) 03-0123-02

在分析化学中, 从大量分析仪器得到的检测信号通常含有随机噪声。这些噪声大大降低了分析的准确性和精密度, 而且严重影响了仪器分析方法的检测限。为了减少噪音, 一方面是改进仪器, 另一方面是发展化学计量学方法来去噪, 即滤波。小波变换是在傅立叶变换基础上发展起来的一种强大的信号处理新工具, 基于小波变换的滤波方法是最近研究的热点^[1]。

通常采用的小波多频率通道滤波方法, 不需预先知道信号的任何信息, 算法简单, 但还是存在不足: 被处理信号的采样点数要求为 2^n ; 需要人为选择合适的滤波参数, 参数设置中的人为因素对分析结果有显著影响; 不适合处理含噪窄带锐峰和成指数衰减的信号。样条小波最小二乘法^[2] (SWLS) 克服了上述缺点, 但经该方法处理后的信号基线仍然不够平坦, 且往往需要对信号进行多次滤波才能较好地去除噪声。本文提出一种全新的信号滤波方法——墨西哥帽小波滤波算法 (MWDA)。它除噪能力强, 很好地解决了上述的所有问题, 具有重要意义。

墨西哥帽小波滤波算法基于曲线拟合技术。曲线拟合技术就是, 对于一组离散的数据点 $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^k$, 选择或构造一个新函数 $f(x)$ —— 拟合函数, 利用它去逼近原始数据点。在曲线拟合过程中, 以原始数据与拟合数据之间的误差平方和最小作为拟合的标准, 此即最小二乘原理。若 $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^k$ 为含有噪声的信号, 那么 $f(x)$ 就是滤除噪声后的信号。

墨西哥帽小波具有简单的显示表达式^[3]

$$\Psi(t) = (1 - t^2) \exp(-t^2/2) \quad (1)$$

而且其函数图像光滑。另外, 该小波随系数衰减得较快, 比较接近人眼视觉的空间相应特性, 因此它比较适合用作拟合函数。本文选用墨西哥帽函数作为 $f(x)$ 的具体形式, 根据最小二乘原理对原始信号进行数据拟合, 以达到去除噪音的目的, 这就是墨西哥帽小波滤波算法。

根据以上的算法原理, 自行编写了处理程序, 从而使整个滤波过程由计算机自动实现。

作为一种新的信号滤波方法, 为检验算法的有关性能, 首先采用该方法对仿真信号进行了处理。当信噪比在 4~1 之间变动时, 处理后的曲线与理论曲线符合得很好, 且峰位置严格保持不变, 峰高的相对误差小于 3%。将该方法运用于实验数据的滤波处理中, 也取得了满意的结果。为进一步研究该方法的特点和优势, 将 MWDA 与 SWLS 进行了比较, 结果表明 MWDA 是一种更好的滤波方法。图 1 是一个对毛细管电泳信号的处理实例。毛细管电泳已经作为一种分析工具被广泛应用, 它的信号为含噪窄带锐峰, 具有如图 1a 所示的典型形式。当应用小波变换对该信号滤波时, 包含着有用信息的尖锐信号峰将被作为噪音除去。但应用 MWDA 进行处理, 可以将噪音完全去除, 而有用信号不会损失 (如图 1b)。同时给出了应用 SWLS 对该信号处理的结果 (图 1c), 以便比较。从图中可以看出, MWDA 是一种有效的信号处理工具。

MWDA 比现行其它滤波方法更简单快速, 除噪能力更强, 且对于采样点数没有限制, 适用的信号类型广泛, 仅需一次滤波就能获得满意结果, 而且避免了人为因素对处理的影响。另外, 该方易于实现信号处理的自动化及在线处理。MWDA 是对滤波技术的新发展。

* 收稿日期: 2002-03-15

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (29975033); 广东省自然科学基金资助项目 (980340)

作者简介: 王瑛 (1976-), 女, 博士研究生, 通讯联系人, 莫金垣; E-mail: cesmjy@zsu.edu.cn

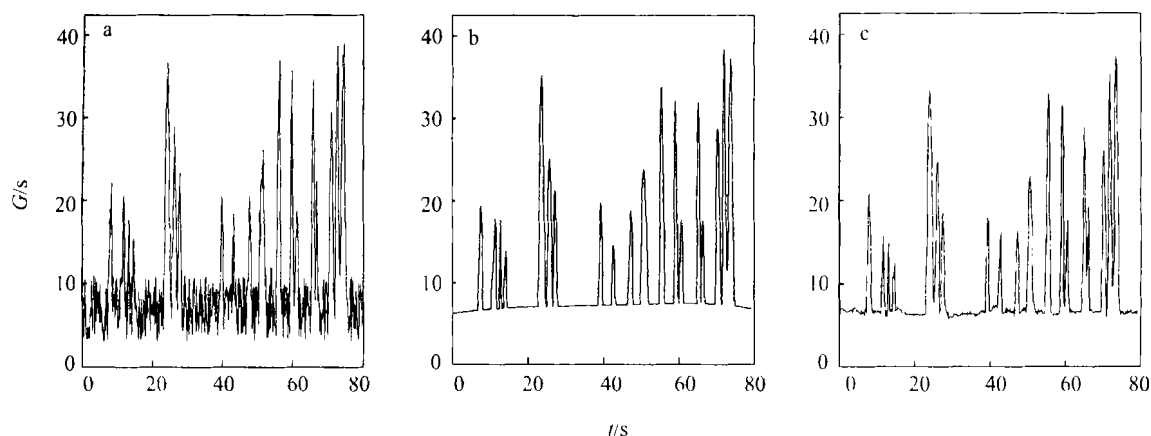


图 1 毛细管电泳实验信号及处理结果

Fig 1 Capillary electrophoresis signals and processing results

a 原始信号; b MWLS 处理结果; c MWDA 处理结果

从右至左依次为: 胱氨酸, 谷氨酸, 门冬氨酸, 酪氨酸, 脯氨酸, 蛋氨酸,
苏氨酸, 丝氨酸, 亮氨酸, 缬氨酸, 丙氨酸, 甘氨酸, 组氨酸, 赖氨酸, 精氨酸

参考文献:

- [1] LEUNG A K, CHAU F, GAO J. A review on applications of wavelet transform techniques in chemical analysis[J] . Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 1998, 43: 165—184.
- [2] ZHENG X P, MO J Y, XIE T Y. Studies of spline wavelet least square in processing electrochemical signals[J] . Talanta, 1999, 48(2): 425—436.
- [3] 杨福生. 小波变换的工程分析与应用[M] . 北京: 科学出版社, 1999: 22—23.

New Wavelet Filtering Technique of Chemical Signals

WANG Ying, MO Jin yuan

(School of Chemistry and Chemical Engineering, Sun Yat-sen (Zhongshan) University, Guangzhou 510275, China)

Abstract: A new filtering method MWDA in which Mexican Hat wavelet is used is presented. It is an efficient chemometrics technique and has been applied successfully in processing analytical chemistry signals. It is powerful and useful information can be extracted from signals of $S/N=1$.

Key words: Mexican Hat wavelet denoising algorithm; curve fitting; denoising; signal processing