

一种提取重叠信号峰位置的新方法^{*}

邱建 丁², 邹小勇¹, 梁汝萍^{1,2}, 莫金垣¹
(1. 中山大学 化学与化学工程学院, 广东 广州 510275;
2. 萍乡高等专科学校 化工系, 江西 萍乡 337055)

摘 要: 提出了一种用于提取重叠信号中峰位置的新方法—小波分形峰位法, 对重叠信号峰位置的提取进行了研究。结果表明: 该法是提取含噪重叠信号中峰位置的有效工具, 方法简便易行。
关键词: 小波分形峰位法; 连续小波变换; 分形理论
中图分类号: O652 7 **文献标识码:** A **文章编号:** 0529-6579 (2003) 01-0123-02

重叠化学信号的分辨是分析化学中一个长期存在的难题。数学方法是处理重叠化学信号的重要手段。分峰后峰位置不变是重叠峰分辨所需满足的基本条件之一, 是复合信号进一步定性分析的基础, 因此在重叠含噪信号的分辨解析中, 关键是峰位置的确定^[1,2]。

分形理论自 Mandelbrot^[3] 于 1975 年创立以来, 它已经迅速发展成为一门新兴的数学分支, 已在许多科学领域广泛应用, 但在化学信号处理方面尚未见报道。本文将具有良好时—频局部性的小波变换和能处理复杂现象揭示隐藏于现象背后的局部与整体本质联系的分形理论有机地结合起来, 提出了小波分形峰位法, 用于对模拟信号和实验信号处理, 峰位置提取的相对误差小于±1.0%。

1 原 理

对于信号 $f(t) \in L^2(R)$ 的连续小波变换为:
$$W_f(a, b) = |a|^{-1/2} \int_R f(t) \overline{\Psi\left(\frac{t-b}{a}\right)} dt \quad (1)$$

其中, t 是时间变量, a 为尺度参数, b 为平移参数。本文选择 haar 小波基, 尺度范围为 55~65。

维数是描述分形特征的重要参数, 容量维数 D_c (capacity dimension) 是其中一种, 它是以包覆为基础, 其定义表达如下^[3]:

$$D_c = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\ln N(\epsilon)}{\ln (1/\epsilon)} \quad (2)$$

由于小波分析和分形理论具有深刻的内在联系, 在尺度变换上具有一致性。本文将二者有机地结合起来, 提出了一种简单而准确确定复合信号峰位置的新方法——小波分形峰位法, 其原理是: 通过连续

小波变换, 将原始重叠的复合信号 $f(t)$ 转换成容量维数 $f(D_c)$, 得到容量维数的特性峰尖, 通过容量维数的特性峰尖来准确、简捷地确定峰位置。

2 仿真实验

用高斯函数模拟了不同分离度下的重叠信号, 如图 1(a), 其中包含 5 个峰(虚线所示), 从左至右的分离度分别为 0.5, 0.6, 0.7 和 0.8。在图 1(a) 中, 信号 b 为信号 a 叠加了高斯白噪声后的信号, 信噪比 $S/N=10$ 。图 1(b) 为经小波分形峰位法对图 1(a) 中含噪信号 b 处理后的容量维数图。可见, 图中容量维数的基线有小幅波动, 但基本保持在 1 左右, 然而在信号中各单独峰处和两峰之间峰谷处容量维数发生急剧变化而形成特性峰尖。图 1(b) 中的容量维数特性峰尖 1, 2, 3, 4, 5 分别对应于图 1(a) 中的峰 1, 2, 3, 4, 5 位置, 峰位置的相对误差如表 1 所示。

表 1 小波分形峰位法提取模拟
信号峰位置的相对误差

Tab 1 The relative errors of peak positions
extracted by wavelet fractal peak positions method

峰	设定的峰位置	提取的峰位置	相对误差/%
1	0	0.006 4	0.640
2	0.429 7	0.429 3	-0.093
3	0.976 6	0.972 3	-0.440
4	1.894 5	1.887 5	-0.369
5	3.261 7	3.287 8	0.800

^{*} 收稿日期: 2002-10-24
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 (001237)
作者简介: 邱建丁 (1973 年生) 男, 博士研究生; 通讯联系人: 莫金垣; E-mail: cesnjy@zsu.edu.cn
(C)1994-2019 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

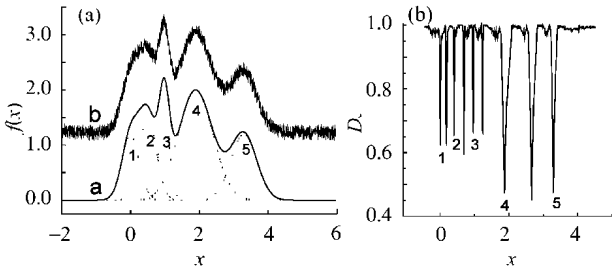


图 1 模拟重叠信号及其经小波分形峰位法处理的结果

Fig 1 Simulated overlapping signal contaminated by noise and its corresponding curve after performed by wavelet fractal peak positions method

- (a) I 重叠信号 (点线: 用来模拟重叠信号的 5 个独立峰; 实线: 模拟重叠信号);
II 加噪声重叠信号;
- (b) 经小波分形峰位法处理后的容量维数图

3 对实验数据的处理结果

根据实验数据得到的伏安信号如图 2 (a) 所示, 由图可见, 由于镉和铟的还原电位很靠近, 造成它们的伏安峰严重重叠, 因此很难用 DPV 直接进行同时测定。然而这种伏安峰经小波分形峰位法处理后, 原本难以确定的峰位置现在可以简单、准确且直观地加以确定出来。处理结果如图 2 (b) 所示, 图 2 (b) 中峰尖 1 和峰尖 3 分别对应于图 2 (a) 中的峰 1 和峰 2 的峰位置; 图 2 (b) 中峰尖 2 对应于图 2 (a) 中峰 1 和峰 2 之间的峰谷。峰位置的处理结果列于表 2, E_p^0 为各离子单独存在于溶液中时测得的峰电位, 以其作为理论电位; E_p' 为经小波分形峰位法处理后所得的峰电位。

可见, 小波分形峰位法提取峰位置的相对误差小于 $\pm 1.0\%$, 进一步表明了该法的可靠性。

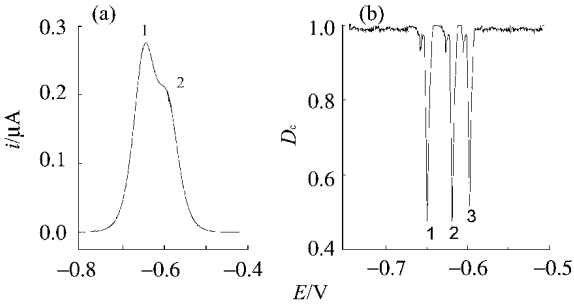


图 2 对 Cd (II) 和 In (III) 实验体系的处理结果
Fig 2 Processed results of Cd (II) — In (III) system

- (a) 为原始伏安峰;
- (b) 为经小波分形峰位法处理后的容量维数峰

表 2 小波分形峰位法提取 Cd(II) — In(III) 体系峰电位的相对误差

Tah 2 The relative errors of the peak potentials (Cd(II) — In(III)) extracted using wavelet fractal peak positions method

元素	E_p^0/V	E_p'/V	相对误差 /%
Cd(II)	— 0. 642	— 0. 646	— 0. 623
In(III)	— 0. 600	— 0. 597	0. 500

参考文献:

[1] ZOU X Y, MO J Y. Spline wavelet overlapped peaks analysis [J] . Chinese Science Bulletin, 1999, 44(10) : 901— 903.

[2] ZHANG Y Q, MO J Y, ZOU X Y, et al. Spline wavelet self-convolution in processing overlapped peaks in capillary electrophoresis[J] . Analyst, 2000, 125: 1303— 1305.

[3] 曼德尔布洛特 B. 分形对象——形、机遇和维数[M] . 文志英, 苏虹, 译. 北京: 世界图书出版公司, 1999: 132.

A New Method for Extracting Peak Positions of Overlapping Signals

QIU Jian ding^{1, 2}, ZOU Xiao yong¹, LIANG Ru ping^{1, 2}, MO Jin yuan¹

(1. School of Chemistry and Chemical Engineering, Sun Yat sen University, Guangzhou 510275, China;
2. Department of Chemical Engineering, Pingxiang College, Pingxiang 337055, China)

Abstract: A new method called wavelet fractal peak positions method (WFPPM) for extracting peak positions of various overlapping signals with noise by combining continuous wavelet transform and fractal theory is proposed. The differential pulse voltammetric overlapping peaks of the mixture of Cd (II) and In (III) are processed by this method. The results show that WFPPM is an efficient tool in extracting solo peak position from overlapping signals with noise even in the case of considerable overlap and serious interference of noise.

Key words: wavelet fractal peak positions method (WFPPM); continuous wavelet transform (CWT); fractal theory