

文章编号:1002-2082(2016)03-0397-05

基于改进小波阈值的量子点荧光光谱降噪研究

陈 余,张正平,王 婧,陈霄鹏,朱紫阳

(贵州大学 大数据与信息工程学院,贵州 贵阳 550025)

摘 要:使用光谱仪采集到的信号难免受到不同噪声源的影响。为了提高光谱信号解析的精准度,通过分析小波应用于信号降噪的原理以及经典的软、硬阈值降噪法存在的缺陷,提出了一种改进的阈值降噪法。该方法既克服了硬阈值法产生间断点,软阈值法产生恒定偏差的缺陷,又尽量地保留了有用信号。实验选用的小波基函数为 SymletsA,分解层数为 4,结合 Birge-Massart 策略模型确定的分层阈值对硒化镉量子点荧光光谱信号进行降噪处理。结果表明,与经典的软、硬阈值降噪法相比,通过改进阈值降噪法得到重构信号的信噪比($SNR=47.550\ 2$)、能量占比($PER=0.973\ 3$)和均方误差($MSE=149.421\ 3$)均有提高和改善。

关键词:小波;阈值;降噪;荧光光谱

中图分类号:TN249

文献标志码:A

doi:10.5768/JAO201637.0302006

Fluorescence spectrum denoising of quantum dots based on improved wavelet threshold

Chen Yu,Zhang Zhengping,Wang Jing,Chen Xiaopeng,Zhu Ziyang

(Academy of Big Data and Information Engineering,Guizhou University,Guiyang 550025,China)

Abstract: The signal collected by using the spectrometer is inevitably affected by different noise sources. In order to increase the analytical accuracy of spectrum signal, an improved denoising method with threshold was presented by analyzing the principle of applying the wavelet to signal denoising and the defects existed in classical denoising methods by using soft and hard thresholds. The improved method can overcome both the defects, that the hard threshold method generates discontinuities and the soft threshold method generates a constant variation, and can retain the useful signals as much as possible. In experiment, the SymletsA wavelet was selected as the wavelet function with 4 series, through combining with the per-level threshold determined by the Birge-Massart tactics pattern, the denoising process was conducted for the fluorescence spectrum signal of CdSe quantum dots. Simulation results demonstrate that the rebuilt signal by the improved denoising method with threshold can has a increased signal-to-noise ratio($SNR=47.550\ 2$) and a energy accounting($PER=0.973\ 3$), as well as an improved mean squared error($MSE=149.421\ 3$) compared with the classical denoising methods by using soft and hard thresholds.

Key words: wavelet; threshold; denoising; fluorescence spectrum

收稿日期:2015-11-09; 修回日期:2016-01-24

基金项目:国家国际科技合作专项项目(2014DFA00670)

作者简介:陈余(1987—),男,四川自贡人,硕士,主要从事信号检测与信息处理方面的研究。

E-mail:273220526@qq.com

通信作者:张正平(1964—),男,湖南怀化人,教授,博士生导师。

E-mail:zpzhang@gzu.edu.cn

引言

光谱分析中重点关注的是信号的局部特征,即光谱曲线中波峰的形状、位置和峰值强度^[1]。然而在光谱仪采集信号的过程中,难免会受到外界光照、环境温度和仪器特性等因素的影响^[2],导致实测信号往往含有高频噪声。如果直接使用采集到的光谱信号进行定量分析,必然会增大光谱鉴别的虚警率。因此,在深入分析之前,必须采取行之有效的方法对获取的原始信号进行相应的降噪预处理,以减弱或消除噪声和无用信号对有用信号的影响,才能提高光谱图解析的精度^[3-5]。

由于在正交小波中,正交基的选取比传统方法更接近实际信号本身,所以通过小波变换可以更容易地分离出噪声或其他不需要的信息,因此在信号降噪中小波分析有着传统方法无可比拟的优势^[6]。小波分析是一种兼顾时域和频域的分析方法,因其多分辨率分析的特点广泛适用于非平稳信号的处理^[7-9]。在小波分解过程中,通过抑制部分小波系数实现降噪主要是基于如下事实:在光谱信号中,低频部分(近似系数)是表征信号本身特征的,而高频部分(细节系数)则是表征信号的细微差别。由于原始信号每次分解得到的近似系数比以前更光滑,舍去的细节信息就存放在各层细节系数中,因此为了保持原相对完整的信息,笔者采用了一种改进的阈值降噪方法处理各层小波系数,并在此基础上有选择地抑制保留的细节系数,以此达到降噪的目的。本文通过基于理论分析的实验验证了该方法的有效性。

1 小波分析用于信号降噪的原理

1.1 基本降噪模型

如果一个纯净信号 $X(t)$ 被噪声污染后为 $F(t)$,那么基本的噪声模型就可以表示为

$$F(t) = X(t) + \sigma Y(t) \quad (1)$$

其中: $Y(t)$ 为噪声; σ 为噪声强度。小波变换的目的就是要抑制 $Y(t)$ 以恢复 $X(t)$ 。从统计学的观点看,这个模型是一个随时间推移的回归模型,这种分解方法可以看做是在正交基上对函数 $X(t)$ 的无参估计。

1.2 降噪的过程

小波分析用于信号降噪的过程通常分为 3 个

步骤:

1) 分解过程:根据应用场合的不同,综合考虑小波函数的紧支集、对称性、正则性、消失矩等,选取适合的小波基函数对信号进行 N 层小波分解。

2) 作用阈值过程:根据 Donoho 提出的小波阈值算法,对分解得到的各层小波系数进行硬阈值或软阈值处理。其中,硬阈值算法可以表示为

$$\hat{W}_{j,k} = \begin{cases} W_{j,k}, & |W_{j,k}| \geq \lambda \\ 0, & |W_{j,k}| < \lambda \end{cases} \quad (2)$$

软阈值算法可以表示为

$$\hat{W}_{j,k} = \begin{cases} \text{sgn}(W_{j,k})(|W_{j,k}| - \lambda), & |W_{j,k}| \geq \lambda \\ 0, & |W_{j,k}| < \lambda \end{cases} \quad (3)$$

(2)式和(3)式中: $W_{j,k}$ 为对原始信号进行分解后的小波系数; λ 为阈值; $\hat{W}_{j,k}$ 为经过阈值降噪处理后小波系数的估计值。

3) 重建过程:根据降噪处理后的第 N 层近似系数和各层细节系数($cd_i, i=1, 2, \dots, N$),运用小波变换的重建算法实现信号的重构。

2 阈值确定模型的选择

在小波分析用于信号降噪的过程中,核心的步骤就是在系数上作用阈值,因此阈值的选取直接影响降噪的质量。本文采用的方法是根据原始信号的信噪比确定各层系数降噪所需的阈值。假定噪声为高斯白噪声(噪声的数学期望为 0),信噪比就用原始信号小波分解的各层系数的标准差来衡量。阈值确定的数学模型主要有两个:

1) 默认的阈值确定模型:

$$\lambda = \sigma \sqrt{2 \log(n)} \quad (4)$$

(4)式中, n 为信号的长度。

2) Birge-Massart 策略阈值确定模型:

指定分解层数 b ,保留 b 层以上的所有系数;对第 a 层($1 \leq a \leq b$),保留绝对值最大的 n_a 个数, n_a 由(5)式确定:

$$n_a = M(b+2-a)^\alpha \quad (5)$$

(5)式中, M 和 α 均为经验系数,默认取 $M=L(1)$ ($L(1)$ 为第 1 层分解后系数的长度),用于压缩取 $\alpha=1.5$,降噪取 $\alpha=3$ 。

由于本文采用的阈值降噪法需对各层小波系数设置不同的保留阈值,而通过默认的阈值确定

模型求得的阈值为全局阈值,因此使用 Birge-Massart 策略确定分层阈值更恰当。

3 改进的阈值降噪法

针对含噪信号的降噪处理,Donoho 等创造性地提出了小波阈值法降噪。该方法在实际运用中取得了瞩目的成就,但也存在瑕疵。通常情况下

小波硬阈值法会导致作用后的光谱曲线在某些点(阈值点)产生间断,虽然小波软阈值法克服了这一缺陷,但却给重构信号引入了附加振荡。除此之外,阈值函数将小于阈值的小波系数全部置 0,会使得高频部分的有用信号无法参与重构,从而降低了还原度。针对这些缺陷,文献[10]提出了一种改进的阈值函数,如(6)式:

$$\hat{W} = \begin{cases} W_{j,k}, & |W_{j,k}| > \lambda \\ \text{sgn}(W_{j,k}) \cdot \frac{2|W_{j,k}|}{\lambda} \cdot \left(|W_{j,k}| - \frac{\lambda}{2}\right), & \frac{\lambda}{2} \leq |W_{j,k}| \leq \lambda \\ 0, & |W_{j,k}| < \frac{\lambda}{2} \end{cases} \quad (6)$$

当 $|W_{j,k}| < \frac{\lambda}{2}$ 时,将小波系数置 0;当 $\frac{\lambda}{2} \leq |W_{j,k}| \leq \lambda$ 时,将小波系数进行抑制。函数在一定程度上克服了硬阈值法产生间断点,软阈值法产生恒定偏差的缺陷,并且保留了部分低于阈值的高频信号。但是文献[10]并没有说明保留阈值 $\frac{\lambda}{2}$ 的选取规则,具有随意性。另外在 $\frac{\lambda}{2} \leq |W_{j,k}| \leq \lambda$ 时,将所有小波系数抑制的同时也将表征信号本身的近似系数进行了抑制。因此本文提出了一种与细节系数所在层数相关的改进阈值函数,如式(7):

$$\hat{W}_{j,k} = \begin{cases} W_{j,k}, & |W_{j,k}| > \lambda \\ \text{sgn}(W_{j,k}) \cdot \left(|W_{j,k}| - \frac{\lambda}{N+1-i}\right), & \frac{\lambda}{N+1-i} \leq |W_{j,k}| \leq \lambda \\ 0, & |W_{j,k}| < \frac{\lambda}{N+1-i} \end{cases} \quad (7)$$

其中: i 为细节系数所在层数; N 为选定的小波分解层数。在小波分析中,小波变换分解命令(wavedec)的返回值在分解系数([C,L])中的记录方式是先将第 N 层的近似系数存放在首位,然后再依次存放各层细节系数。因此,分解层数 N 在与细节系数所在层数 i 做运算时需将 N 加 1。根据 mallat 算法^[11],通常小波变换分解到低层细节系数上的能量要高于分解到高层细节系数上的能量,即低层细节系数保留的有用信号更多。所以,为了更最大限度地保留有用信号,笔者设计了一种在低层保留阈值更小、高层保留阈值更大的可变保留阈值 $\frac{\lambda}{N+1-i}$ 。在此基础上,当 $\frac{\lambda}{N+1-i} \leq |W_{j,k}| \leq \lambda$ 时,仅对小波系数中的细节系数进行抑制以实现降噪。

4 实验结果及分析

4.1 小波基函数和最优分解层数的选取

实验采用波长为 365 nm 的激发光源 LIS365 照射 CdO 溶液与 Se 粉反应 15 min 时得到的量子点,由海洋光学 QE65000 光谱仪采集量子点荧光光谱,导入 Matlab 中得到如图 1 所示的 CdSe 量子点荧光光谱。光谱范围为 300 nm~1 200 nm,分辨率为 1 nm^{-1} ,横坐标为波长(nm),纵坐标为吸光度(a. u.)。

小波基函数的选取应兼顾紧支集、对称性、正则性、消失矩等特性。symN 小波族的构造类似于 dbN 小波族,且具有更好的对称性,可以减少重构时的相移。因此本文选用 symN 小波族对 CdSe 量子点荧光光谱信号进行降噪处理。由于支集太长会产生边界问题,支集太短又不利于信号能量

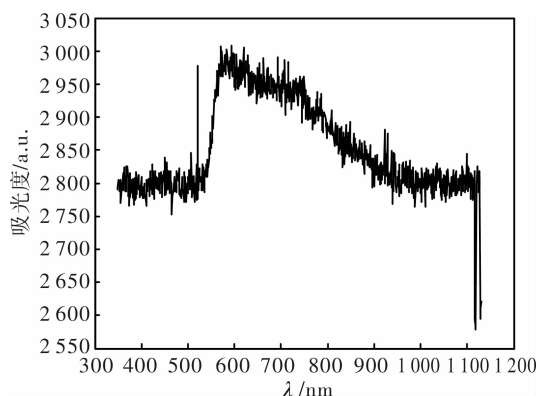


图 1 CdSe 量子点荧光光谱

Fig. 1 Fluorescence spectra of CdSe quantum dots
的集中,所以选用如图 2 所示支集适中的 sym4 作为小波基函数。

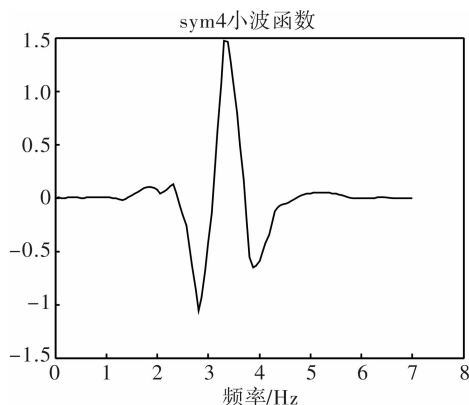


图 2 sym4 的小波函数图形

Fig. 2 Wavelet function graph of sym4

将 CdSe 量子点荧光光谱信号进行小波分解,细节系数在各分解层数上的奇异谱分布如图 3 所示。当分解层数为 4 时,奇异谱发生突变,说明最优分解层数即为 4。

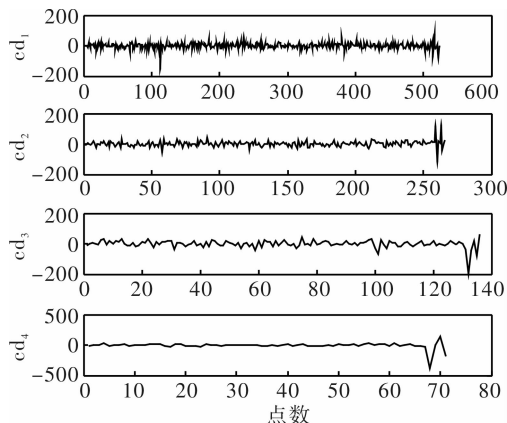


图 3 各层细节系数的奇异谱

Fig. 3 Singular spectra of detail coefficients in different decomposition levels

4.2 算法验证

为了检验本文提出的改进阈值函数在实现 CdSe 量子点荧光光谱信号降噪时的优势,采用传统的硬阈值法、软阈值法、文献[10]提出的阈值法和改进阈值法分别对原始信号进行降噪处理,通过 Matlab 提供的小波降噪命令同时完成了作用阈值和重构过程,降噪后的光谱曲线如图 4 所示。

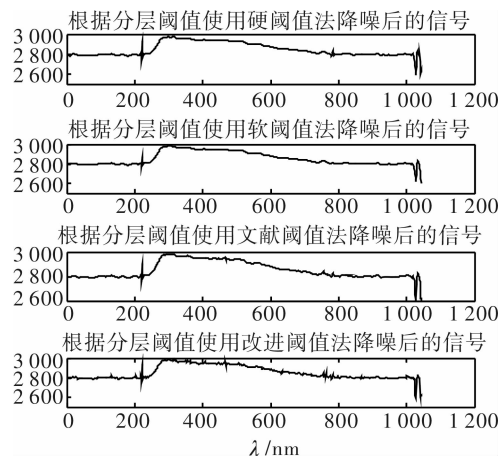


图 4 不同阈值函数的降噪效果

Fig. 4 Denoising effects of different threshold functions

为了进一步证明改进阈值降噪法的有效性,本文采用了信噪比(SNR)、均方误差(MSE)和能量占比(PER)3 项指标来对降噪效果进行量化评估。

$$\text{SNR}(X(t)) = 10 \log \frac{\sum_t X^2(t)}{\sum_t [X(t) - \widetilde{X}(t)]^2} \quad (8)$$

$$\text{MSE} = \frac{1}{t} \sum_t [X(t) - \widetilde{X}(t)]^2 \quad (9)$$

$$\text{PER} = \frac{\text{norm}(\widetilde{X}(t))}{\text{norm}(X(t))}$$

(8)~(10)式中: $X(t)$ 为原始信号; $\widetilde{X}(t)$ 为重构信号; t 为采样点;norm 为范数。量化评估的各项指标如表 1 所示。

表 1 不同降噪阈值的降噪效果

Table 1 Denoising effects of different denoising thresholds			
降噪阈值	信噪比/dB	均方误差/dB	能量占比
硬阈值	45.310 6	250.250 3	0.972 7
软阈值	44.817 7	280.322 5	0.949 5
文献阈值	46.047 0	211.216 4	0.972 9
改进阈值	47.550 2	149.421 3	0.973 3

5 结论

1) 通过分析阈值确定模型的适用范围,选定

了更适用于计算分层阈值的 Birge-Massart 策略模型确定各层阈值。

2) 在兼顾紧支集、对称性、正则性、消失矩等特性的前提下,考量了应用于小波分解适宜的支集长度,选定 sym4 小波作为基函数;通过观察 CdSe 量子点荧光光谱信号分解后各层细节系数的奇异谱分布情况,确定了最优分解层数。

3) 通过分析经典的硬阈值和软阈值降噪法的缺点,提出了一种改进的阈值降噪法,并结合选定的阈值确定模型对 CdSe 量子点荧光光谱信号进行了降噪处理。实验结果证明:无论是从相似性直观地判断,还是从信噪比、均方误差和能量占比进行量化评估,改进的阈值降噪法都具有优势。

参考文献

- [1] 秦侠,沈兰荪.小波分析及其在光谱分析中的应用[J].光谱学与光谱分析,2000,20(6):892-897.
Qin Xia, Shen Lansun. Wavelet transform and its application in spectral analysis. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2000, 20(6): 892-897.
- [2] 陈红.多组分污染物气体光谱检测关键技术研究[D].合肥:合肥工业大学,2011.
Chen Hong. Research of key technology of spectrum detection of multi-component pollutants[D]. Hefei: Hefei University of Technology, 2011.
- [3] Poornachandra S. Wavelet-based denoising using sub-band dependent threshold for ECG signals [J]. Digital Signal Processing, 2008(18):49-55.
- [4] Eiceman G A, Wang M, Prasad S, et al. Pattern recognition analysis of differential mobility spectra with classification by chemical family [J]. Analytica Chimica Acta, 2006, 579(1): 1-10.
- [5] Pasti L, Walczak B, Massart D L, et al. Optimization of signal denoising in discrete wavelet transform [J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 1999, 48(1): 21-34.
- [6] Xia Guorong, Xu Zhisheng, Ma Zhenyan. Application of multi-wavelet threshold denoising method in the wire rope flaw detection[J]. Journal of Test and Measurement Technology, 2007, 21(4): 319-323.
夏国荣,徐志胜,马振燕.多小波阈值降噪法在钢丝绳缺陷检测中的应用[J].测试技术学报. 2007, 21(4): 319-323.
- [7] Cinquemani E, Pillonetto G. Automatica, Wavelet estimation by Bayesian thresholding and model selection[J]. Automatica, 2008, 44(9):2288-2297.
- [8] Azzalini A, Farge M, Schneider K. Nonlinear wavelet thresholding: a recursive method to determine the optimal denoising threshold[J]. Applied and Computational Harmonic Analysis, 2005, 18(18):177-185.
- [9] Kubota H, Tanki N, Nanjo T. Effects of the threshold function form for wavelet noise reduction with generalized cross-validation method[J]. International Congress Series, 2004, 1268: 1238.
- [10] Jiang Weiwei, Lu Changhua, Zhang Yujun, et al. Research on spectrum signal denoising based on improved threshold with lifting wavelet[J]. Journal of Electronic Measurement and Instrumentation. 2014, 28(12): 1363-1368.
蒋薇薇,鲁昌华,张玉钧,等.基于提升小波改进阈值的量子点荧光光谱信号去噪研究[J].电子测量与仪器学报, 2014,28(12):1363-1368.
- [11] Zang Yuping, Zhang Dejiang, Wang Weizheng, Per-level threshold de-noising method using wavelet and its application in engine vibration analysis[J]. Journal of Vibration and Shock, 2009, 28(8): 57-60.
臧玉萍,张德江,王维正.小波分层阈值降噪法及其在发动机振动信号分析中的应用[J].振动与冲击, 2009,28(8):57-60.
- [12] Luo Manting, You Tengfei, Zhang Qiukun, et al. Time-domain optical coherence tomography system based on stationary wavelet transform[J]. Journal of Applied Optics, 2015, 36(4): 543-549.
罗曼婷,游腾飞,张秋坤,等.基于平稳小波变换的时域光学相干层析系统[J].应用光学,2015,36(4): 543-549.