

文章编号: 0253-2239(2006)11-1601-4

# 基于小波变换的差分吸收光谱数据处理方法\*

李素文 谢品华 李玉金 秦敏 司福琪 李昂 刘建国 刘文清

(中国科学院环境光学与技术重点实验室, 中国科学院安徽光学精密机械研究所, 合肥 230031)

**摘要:** 差分光学吸收光谱法(DOAS)已经成为测量大气中微量气体成分含量常用的方法, 该方法是通过窄带分子的特征吸收波段来区分微量气体种类; 并基于最小二乘原理, 利用测量的大气光谱的差分吸收截面与标准的吸收截面进行拟合, 确定待测气体的浓度。但在实际测量中由于系统噪声叠加在吸收光谱上, 会影响测量精度。差分吸收光谱系统中惯用的方法采用多项式平滑滤波去除噪声, 提出利用软阈值小波变换去噪, 并对实验结果进行比较, 发现软阈值小波去噪, 可以提高差分吸收光谱系统的测量精度, 降低差分吸收光谱系统的检测限。

**关键词:** 大气光学; 差分光学吸收光谱法; 去噪; 小波变换; 软阈值

中图分类号: TP183; O657 文献标识码: A

## Wavelet Transform Based Differential Optical Absorption Spectroscopy Data Processing

Li Suwen Xie Pinhua Li Yujin Qin Min Si Fuqi Li Ang Liu Jianguo Liu Wenqing

(Key Laboratory of Environmental Optics and Technology, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, the Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031)

**Abstract:** Differential optical absorption spectroscopy (DOAS) has become a widely used method to measure trace gases in the atmosphere, which detects trace gases by analyzing the typical absorption waveband of narrow band molecules. The concentration of trace gases is retrieved through least-squares fits of reference absorbing cross section to the differential cross section. But in the application, for the superposition of noises on the absorption spectra, the measurement precision is affected. In the DOAS, denoising by polynomial smoothing filtering is the traditional method. Wavelet transform with soft threshold is put forward to reduce noises, which improves the precision of DOAS and declines the measuring limit, according to the comparison with experimental results.

**Key words:** atmospheric optics; differential optical absorption spectroscopy; denoising; wavelet transform; soft threshold

### 1 引 言

差分吸收光谱(DOAS)法已成为进行大气污染监测的常用方法之一, 该方法利用测量的差分吸收截面与标准的吸收截面进行最小二乘拟合, 反演待测气体的浓度, 目前已经广泛地应用到环境检测仪器中<sup>[1~5]</sup>。

差分吸收光谱法测得的气体差分吸收截面上含

有噪声, 传统的数据处理方法是多项式平滑降噪, 这样会使吸收截面上的细节信息或高频分量有所丢失。而小波变换具有良好的时频局域化特性, 能通过伸缩和平移对信号进行多分辨力分析能聚焦到信号的任意细节, 是一种很好的信号分析手段<sup>[6~12]</sup>。论文提出采用软阈值小波滤波法, 处理差分吸收光谱系统测量数据, 降低差分吸收截面上高频噪声, 并

\* 国家自然科学基金(10274080)资助课题。

作者简介: 李素文(1968~), 女, 安徽淮北人, 副教授, 博士研究生, 主要从事信号处理、环境监测技术的研究。

E-mail: swli@aiofm.ac.cn

导师简介: 刘文清(1954~), 男, 安徽蚌埠人, 研究员, 博士生导师, 主要从事环境光学特性、有害痕量气体光学与光谱学监测方法、新型环境监测技术的研究。

收稿日期: 2005-08-18; 收到修改稿日期: 2006-03-28

给出实验结果,发现小波降噪效果优于传统的平滑降噪,采用小波变换可以提高差分吸收光谱系统的测量精度,降低差分吸收光谱系统的检测限。

## 2 差分吸收光谱方法简介

差分吸收光谱仪器结构如图 1 所示。整套仪器主要包括:光源、收发一体的望远镜系统、角反射镜、石英光纤、光谱仪、CCD 探测器和采集电路、计算机。

仪器的工作过程是:氙灯发出的光由望远镜准直为平行光射向远处的角反射镜,从角反射镜反射回的光聚集在光纤的入射端面,然后光谱仪分光和 CCD 探测器转换为电信号,采集系统采集,最后送入计算机进行存储和数据处理。

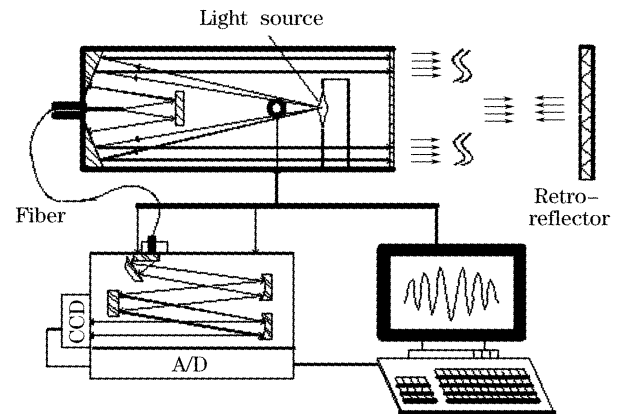


图 1 差分吸收光谱仪器结构框图

Fig. 1 Schematic view of DOAS instrument

发射光  $I_0$  和反射光  $I$  之间的关系遵从比尔-朗伯(Beer-Lambert)定律<sup>[1~3]</sup>:

$$I(\lambda) = I_0(\lambda) \exp \left\{ \sum_{i=1}^n [-\sigma_i(\lambda) - \sigma'_i(\lambda) - \epsilon_R(\lambda) - \epsilon_M(\lambda)] N_i L \right\} + B(\lambda), \quad (1)$$

$\lambda$  表示波长,  $\sigma_i(\lambda)$  是所测第  $i$  种气体的分子窄带吸收截面,  $\sigma'_i(\lambda)$  则是宽带吸收截面,  $N_i$  是第  $i$  种气体的浓度,  $L$  表示光程,  $n$  是所测气体的种类数,  $\epsilon_R(\lambda)$  和  $\epsilon_M(\lambda)$  则分别是瑞利散射系数和米氏散射系数,  $B(\lambda)$  是各种噪声之和。对(1)式两边取对数,可得

$$\ln[I_0(\lambda)/I(\lambda)] = \sum_{i=1}^n [\sigma_i(\lambda) + \sigma'_i(\lambda) + \epsilon_R(\lambda) + \epsilon_M(\lambda)] N_i L + B'(\lambda), \quad (2)$$

变换后的  $B(\lambda)$  记为  $B'(\lambda)$ , 由于  $\sigma'_i(\lambda)$ 、 $\epsilon_R(\lambda)$  和  $\epsilon_M(\lambda)$  是随波长作慢变化的。利用多项式拟合去除慢变化,剩下的光谱表达式为

$$\ln(I_0/I) = \sum_{i=1}^n \sigma_i N_i L + B'(\lambda), \quad (3)$$

(3)式称为差分吸收光学密度,与标准的吸收截面进行拟合,确定待测气体的浓度。存在噪声  $B'(\lambda)$ , 传统的差分吸收光谱去噪方法为多项式平滑,但容易丢失吸收截面上的特征信息,影响测量精度。本文提出软阈值小波变换去噪,通过选择合适的小波和小波系数来滤除上式中的  $B'(\lambda)$ 。实验结果表明采用软阈值小波变换不仅能较好滤除噪声,还能较好地保留光谱特征信息。

## 3 小波变换与降噪理论

假设  $\psi(\cdot)$  是小波函数,  $\phi(\cdot)$  为对应的尺度函数,对离散序列  $x(k)$  进行离散二进正交小波变换可得到

$$\begin{cases} c_{i_0, j} = \sum_k x(k) \phi_{i_0, j}(k), \\ d_{i, j} = \sum_k x(k) \psi_{i, j}(k), \end{cases} \quad (4)$$

其中  $i$  为尺度函数,  $j$  为平移参数;  $c_{i_0, j}$  为概貌分量,反映信号的低频部分;  $d_{i, j}$  为细节分量,反映各频段的高频分量。因而信号序列可表示为

$$x(k) = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} c_{i_0, j} \phi_{i_0, j}(k) + \sum_{i=-\infty}^{i_0} \sum_{j=-\infty}^{\infty} d_{i, j} \psi_{i, j}(y), \quad (5)$$

多分辨力分析就是把原始信号分解成具有不同分辨力的分量,然后把这些分量逐个加上,逐步提高分辨力,直到最后把分辨力提高到 1,即还原原始信号。利用小波变换的多分辨力特性去噪,是因为若原始信号中含有噪声成分同样也会在小波分解分量中得到反映,在重构时合理舍去,达到去噪声目的。根据(4)式,可知任意尺度  $i$  下和位移  $j$  处的某个细节小波系数  $d_{i, j}$  可以看作是若干个独立随机变量的线性组合。可以确定这样一个阈值,使得小于此阈值的细节小波系数被切除,利用余下地细节分量和概貌分量来重构信号,相当于对原信号降噪<sup>[8]</sup>。

小波应用中,小波系数的取舍很重要,所以阈值的选择非常关键。目前,大多采用 Donoho<sup>[8]</sup>提出的通用阈值算法,通用阈值  $T_i$  由下式定义:

$$T_i = s \sqrt{2 \ln n}, \quad s = 3 \times \left[ \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n d_i^2 \right]^2, \quad (6)$$

其中  $s$  为噪声层的估计值<sup>[3]</sup>,  $n$  是测量的数据点数,  $d_i$  是第  $i$  个测量点的噪声大小。为了即降低噪声, 又能保留光谱中有用的光谱特征, 我们这里采用 Donoho 提出的软阈值<sup>[8]</sup>, 软阈值的处理是把信号绝对值与阈值进行比较, 小于阈值的信号为零, 大于阈值的信号变为该点与阈值的差值。软阈值的系数由下式确定:

$$d_{i,j}^s = \begin{cases} 0, & |d_{i,j}| < T_t \\ \text{sgn } d_{i,j} (|d_{i,j}| - T_t), & |d_{i,j}| \geq T_t \end{cases} \quad (7)$$

式中  $d_{i,j}$  为细节小波系数,  $\text{sgn}$  为符号函数。通过合理选择小波和小波系数取舍的阈值, 可以很好重构信号, 达到有效的降噪目的, 而不丢失特征信息。

选择一小波  $\psi(x) = \text{sym8}$ , 级数  $N = 3$ , 以含噪  $\text{SO}_2$  吸收截面为例, 分析其分解、重构过程。图 2 是含噪声的  $\text{SO}_2$  差分吸收截面, 图 3 是分解过程, 其中图 3(a) 是  $\text{SO}_2$  吸收截面的概貌分量即粗略的廓

线; 图 3(b)~图 3(d) 是细节分量即高频分量, 它们由噪声和  $\text{SO}_2$  吸收尖峰部分或称高频成分共同构成。图 4 利用软阈值处理后的概貌分量和细节分量重构的  $\text{SO}_2$  差分吸收截面, 噪声被降低而信号特征部分和位置不变。

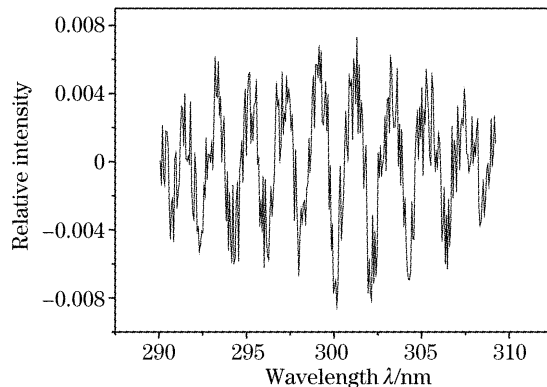


图 2  $\text{SO}_2$  的原始光谱

Fig. 2 Original spectrum of  $\text{SO}_2$

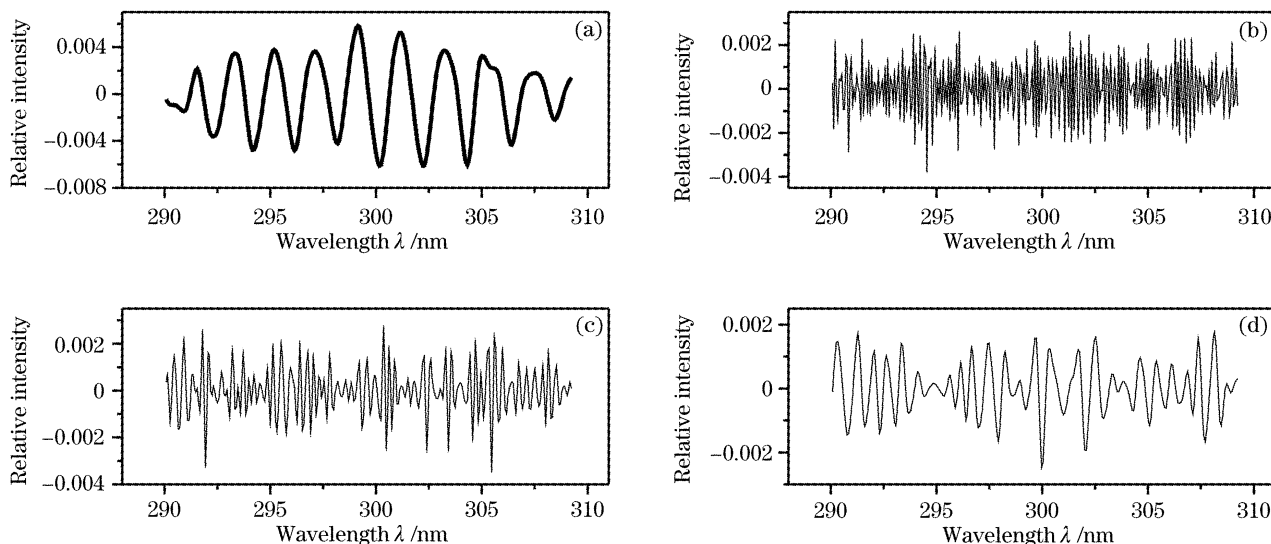


图 3  $\text{SO}_2$  光谱的小波分解。(a) 概貌分量, (b)~(d) 细节分量

Fig. 3 Wavelet decomposition of  $\text{SO}_2$  spectra. (a) Approach component, (b)~(d) detailed components

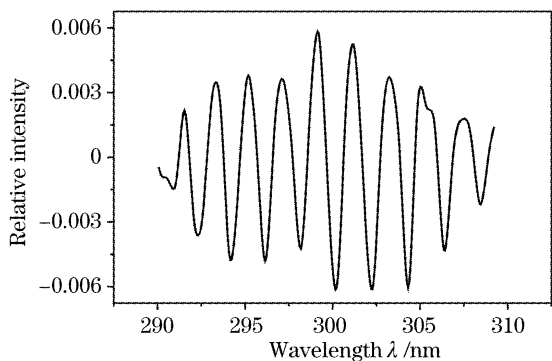


图 4 小波重构的  $\text{SO}_2$  光谱

Fig. 4 Wavelet reconstruction of  $\text{SO}_2$  spectrum

### 4 结果比较及结论

实验是对样气  $\text{SO}_2$  吸收截面进行的, 在其上叠加基于残差的噪声, 其强度为  $N(2 \times 10^{-3})$ , 保持噪声强度不变, 通过改变  $\text{SO}_2$  的浓度来改变信噪比。把叠加了噪声的  $\text{SO}_2$  差分吸收截面分别进行平滑滤波和小波变换滤波。处理后的吸收截面和标准的截面进行最小二乘拟合得到其浓度, 两种方法得到的浓度和相对误差如表 1 所示。由表 1 可以看出对于大信噪比的信号, 小波变换去噪和多项式平滑滤波相差不大, 但信噪比低时, 例如  $\text{SO}_2$  的浓度为

6.5  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 时,平滑降噪后得到的浓度为 7.8  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ,相对误差已达到 20%,而小波变换处理后的光谱进行浓度反演得到浓度为 7.1  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ,相对误差仅为 9.2%。这对于差分吸收光谱系统特别有价值,因为差分吸收光谱系统实际测量是痕量气体,一般浓度较低。图 5 是两种方法的相对误差图,横坐标为  $\text{SO}_2$  的浓度,纵坐标为相对误差。从图中可以直观的看到,低浓度的信号经过小波变换后得到的相对误差小于平滑去噪的相对误差。相对误差反映了测量结果的好坏,相对误差越小,说明测量结果越准确,反映到痕量气体的测量上,就是测量的精度提高。如果 10%误差可以接受的话,平滑降噪的检测限为 10  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ,而小波分析的检测限已经降到 6.5  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  以下。

表 1 平滑和小波变换处理结果的比较(单位:  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ )

Table 1 Comparison of results with smoothing and wavelet transform (concentration unit:  $\mu\text{g}/\text{m}^3$ )

Concentration	Smoothing and		Wavelet transform	
	relative errors		and relative errors	
50	50.8	1.6%	50.5	1.0%
25	25.5	2.0%	25.3	1.2%
15	16	6.0%	15.5	3.3%
10	10.9	9.0%	10.7	7.0%
6.5	7.8	20.0%	7.1	9.2%

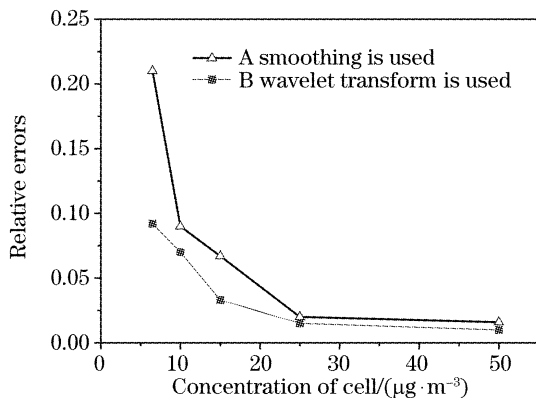


图 5 测量结果的相对误差对比图

Fig. 5 Comparison of relative errors

总之,在差分吸收光谱系统中采用小波变换对截面进行处理,充分利用小波变换时频局部特征,使得去噪后的光谱峰的形状、大小和位置特征保留完好,但叠加在测试光谱上的噪声信号却被去除,从而将信号与噪声区别开来,消除其中的噪声成分。实验结果说明了采用小波变换进行光谱的处理,不仅能有效地去除差分吸收截面上噪声,而且保留了光谱的特征成分,在和标准截面比对得到浓度时更加逼近真实值。所以采用软阈值小波变换可以提高差

分光光谱系统的测量精度,从而也降低了差分吸收光谱系统的检测限。

## 参 考 文 献

- 1 U. Platt, D. Perner, H. W. Pätz. Simultaneous measurements of atmospheric  $\text{CH}_2\text{O}$ ,  $\text{O}_3$  and  $\text{NO}_2$  by differential optical absorption[J]. *Geophys. Res.*, 1979, **84**(10): 6329~6335
- 2 Platt U, Perner D. Direct measurements of atmospheric  $\text{CH}_2\text{O}$ ,  $\text{HNO}_2$ ,  $\text{O}_3$  and  $\text{SO}_2$  by differential absorption in the near UV[J]. *Geophys. Res.*, 1980, **85**(12): 7453~7458
- 3 Jochen Stutz, Ulrich Platt. Numerical analysis and estimation of the statistical error of differential optical absorption spectroscopy measurement with least-squares methods[J]. *Appl. Opt.*, 1996, (35): 6041~6053
- 4 Zhou Bin, Liu Wenqing, Qi Feng *et al.*. Differential optical absorption spectroscopy for atmosphere trace gases monitoring [J]. *The Research of Environment Sciences*, 2001, **14**(5): 23~26 (in Chinese)  
周 斌,刘文清,齐 锋等. 差分吸收光谱法测量大气污染气体的研究[J]. *环境科学研究*, 2001, **14**(5): 23~26
- 5 Qi Feng, Liu Wenqing, Zhou Bin *et al.*. Improving DOAS system measurement precision with artificial neural network method[J]. *Acta Optica Sinica*, 2002, **22**(11): 1345~1349 (in Chinese)  
齐 锋,刘文清,周 斌等. 利用人工神经网络方法提高差分吸收光谱系统测量精度研究[J]. *光学学报*, 2002, **22**(11): 1345~1349
- 6 Jiang Qingsong, Wang Jianyu. Study on signal to noise ratio estimation and compression method of operational modular images [J]. *Acta Optica Sinica*, 2003, **23**(11): 1335~1340 (in Chinese)  
蒋青松,王建宇. 实用型模块化成像光谱仪多光谱图像的信噪比估算及压缩方法研究[J]. *光学学报*, 2003, **23**(11): 1335~1340
- 7 Xu Ying, Zhao Jianlin, Xiang Qiang *et al.*. Image processing in numerical reconstruction for lensless Fourier transform hologram [J]. *Acta Optica Sinica*, 2004, **24**(11): 1503~1506 (in Chinese)  
徐 莹,赵建林,向 强等. 无透镜傅里叶变换全息图数值再现中的图像处理[J]. *光学学报*, 2004, **24**(11): 1503~1506
- 8 Donoho D L. De-Noising by soft-thresholding[J]. *IEEE Trans. on Information Theory*, 1995, **41**(3): 613~620
- 9 Yang Wei, Ming Zongfeng, Song Guoxiang *et al.*. A family of piecewise  $n$ -degree filter functions of wavelet threshold parameter [J]. *J. South China University of Technology*, 2005, **33**(8): 54~57 (in Chinese)  
杨 维,明宗峰,宋国乡等. 一族分段  $n$  次小波阈值参数滤波器函数[J]. *华南理工大学学报*, 2005, **33**(8): 54~57
- 10 Lin Hu, Guo Shuxu, Zhao Wei. Wavelet transform for evaluation of semiconductor laser reliability[J]. *Chin. J. Lasers*, 2004, **31**(9): 1050~1054 (in Chinese)  
林 虎,郭树旭,赵 蔚等. 小波变换用于半导体激光器可靠性分析[J]. *中国激光*, 2004, **31**(9): 1050~1054
- 11 Fei Peiyan, Guo Baolong, Meng Fanjie. Target extraction of underwater laser image based on statistic constic counteraction [J]. *Chin. J. Lasers*, 2004, **31**(7): 815~819 (in Chinese)  
费佩燕,郭宝龙,孟繁杰等. 基于统计对消的激光水下图像的目标提取法[J]. *中国激光*, 2004, **31**(7): 815~819
- 12 Li Ming, Wu Yan, Wu Shunjun. Multiple feature data fusion method in color texture analysis[J]. *Acta Optica Sinica*, 2004, **24**(12): 1617~1622 (in Chinese)  
李 明,吴 艳,吴顺君. 彩色纹理分析中的多特征数据融合方法[J]. *光学学报*, 2004, **24**(12): 1617~1622