

## 基于卷积神经网络的光谱预处理方法

焦青亮<sup>1</sup>, 刘明<sup>1\*</sup>, 于坤<sup>2</sup>, 刘子龙<sup>2,3</sup>, 孔令琴<sup>1</sup>, 惠梅<sup>1</sup>, 董立泉<sup>1</sup>, 赵跃进<sup>1</sup>

1. 北京理工大学光电学院, 精密光电测试仪器与技术北京市重点实验室, 北京 100081
2. 河南师范大学物理学院, 河南省红外光谱测量与应用重点实验室, 河南 新乡 453007
3. 中国计量科学研究院光学与激光计量科学研究所, 北京 100013

**摘要** 光谱的预处理在光谱分析中占有非常重要的地位。针对现有光谱去噪算法对弱峰保存能力差、基线校正算法对光谱能量过扣除、光谱特征峰定位不准确以及各种预处理算法串行处理造成的误差累计等问题, 设计了一个端到端的卷积神经网络。该网络由两个模块组成: 基线校正和去噪模块和特征峰定位模块。这两个模块相互连接又独立输出。理想条件下, 可以依据光谱的线型函数和特征峰的位置拟合出无噪声无基线的光谱, 所以在基线校正和光谱去噪模块中连接特征峰定位模块的输出可以有效的提高去噪和基线校正的精度; 而高质量的光谱有助于更加精确的估计光谱峰的位置, 因此这两个模块相互连接可以有效提高重建光谱的质量。光谱基线校正和去噪模块是一个前馈网络, 该模块由多个卷积层、激活函数和批归一化层构成, 每一层均连接了特征峰定位模块的输出。特征峰定位模块是一个多尺度特征融合网络, 该模块使用不同尺寸的卷积核将光谱分为不同的尺度, 融合大小不同尺度的特征估计光谱特征峰的具体位置。在网络训练时, 使用不同温度、湿度和不同预热时间的光谱仪获得光谱作为输入样本, 使用中国计量院的标准仪器获得光谱数据作为输出样本。在实验中, 首先对合成的光谱分别添加不同信噪比的噪声和不同峰值的高斯基线, 分别评价该网络在噪声抑制、基线校正、光谱特征峰校正的能力; 然后将添加噪声和基线后的玉米的红外光谱作为样本, 用最先进的算法对它们进行预处理, 然后用偏最小二乘法估计玉米中的水和油的浓度。估计的浓度与用标准仪器测量的真实浓度进行比较, 以证明所提出的 CNN 的优势。实验证明, 所设计的网络在单任务和多任务处理中均能取得良好的结果。而且经过该网络处理的光谱在定量分析中可以得到更准确的结果, 具有较强的实用价值。

**关键词** 光谱学; 卷积神经网络; 光谱去噪; 基线校正; 特征峰定位

**中图分类号:** TH744 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2022)01-0292-06

### 引言

光谱的定量分析是光谱应用的重要方面。实际应用中, 由于温度、湿度和仪器自身等问题, 未经预处理的光谱会导致定量分析出现误差、组分预测错误等问题, 因此光谱预处理是光谱分析中重要的组成部分。

光谱预处理包括光谱去噪、基线校正和谱峰定位等。其中, 光谱去噪算法包括高斯滤波, SG 平滑, 短时傅里叶变换, 小波变换等算法。这些去噪算法可以移除光谱噪声, 但是会损失光谱的精度, 因为它们实质上是通过降低原始测量的光谱分辨率来消除噪声<sup>[1]</sup>。其中, 高斯滤波和 SG 平滑<sup>[2]</sup>

等算法原理简单, 但是较小的窗口对噪声的移除效果有限, 较大的窗口会严重的损失光谱数据, 因此使用这些方法去噪时需要谨慎的选择参数; 基于傅里叶变换和小波分析<sup>[3-4]</sup>等多尺度分析的方法是根据噪声的性质, 将光谱数据分为高频分量和低频分量, 通过截断高频分量的方法, 减小噪声对光谱的影响。这些方法的效果大多取决于几个参数的选择, 例如小波基选择和阈值权值选择方法, 因此去噪结果会包含主观性。

光谱基线校正包括小波变换<sup>[5]</sup>, 多项式拟合, 自适应迭代重权惩罚最小二乘<sup>[6]</sup>, 非对称最小二乘<sup>[7]</sup>等方法。这些方法大多可以有效的估计光谱基线, 但是会扣除光谱的真实强度。其中多项式拟合、非对称最小二乘等方法对光谱的信噪

收稿日期: 2020-12-29, 修订日期: 2021-04-11

基金项目: 国家重点研发计划项目(2018YFF0300800)资助

作者简介: 焦青亮, 1993 年生, 北京理工大学光电学院博士研究生

\* 通讯作者 e-mail: bit411liu@bit.edu.cn

e-mail: jiaoql2006@126.com

比有一定要求,在重叠峰处可能无法取得光滑的基线。而基于小波变换的方法,通过对小波低频分量进行处理,估计光谱基线。这些算法可以满足大多数基线估计,但是由于小波基函数的问题,会出现基线畸变的现象。

光谱峰定位方法包括对称零面积法<sup>[8]</sup>,多阶导数法和正弦余弦算法<sup>[9]</sup>等,这些方法虽然可以定位光谱峰,但对光谱质量有一定要求,并且在重叠峰的估计与定位上存在偏差。

上述方法大多只能完成单项预处理任务,在串行运行时会出现误差的积累。但是随着深度学习的不断发展,神经网络已经被证明可以有效的抑制噪声、校正基线<sup>[10-12]</sup>和估计谱峰,这使多项预处理任务同时处理成为可能。因此,本工作提出了一种卷积神经网络(CNN),该网络可以同时实现光谱去噪、基线校正和谱峰定位等任务,可以有效的提高重建光谱的质量。

## 1 算法原理及结构

### 1.1 光谱线型函数

在光谱的形成过程中,发光粒子不同的运动速度、能级结构和它们间的相互撞击会使光谱形成不同的线型,即 Gauss 线型、Lorenz 线型和 Voigt 线型。假设  $\lambda_0$  是光谱的中心波长,  $\alpha_L$  是 Gauss 线型或 Lorenz 线型的半峰全宽,  $\alpha$  是高斯线型的峰值,  $a$  是一个取值范围在 (0, 1) 之间的参数,所以上述三种线型的可以表示为

$$G(\lambda) = \alpha \exp\left[-\frac{(\lambda - \lambda_0)^2}{\alpha_L^2}\right] \quad (1)$$

$$Q(\lambda) = \frac{1}{\pi} \frac{\alpha_L}{(\lambda - \lambda_0)^2 + \alpha_L^2} \quad (2)$$

$$V(\lambda) = aG(\lambda) + (1 - a)Q(\lambda) \quad (3)$$

在具体应用中,大部分实验得到的光谱峰均可以由三种光谱线型表示,因此在模拟实验和提出网络的训练中使用由上式合成的模拟光谱加入训练集和测试集,不仅可以有效的提高数据集中样本的多样性,而且会提高光谱预处理的效果。

### 1.2 一维卷积网络

卷积神经网络已经在计算机视觉领域取得成功。为了光谱预处理,本工作选择了一维卷积网络,在卷积神经网络中有多种操作算子。选择了卷积层(Conv),激活函数,批归一化层(batch normalization, BN),最大池化层(max pooling, MP),上采样层(up sample, US),多尺度融合层(multiscale fusion, MF)等算子。在 CNN 中,最重要的两个算子为 Conv 和 MP。其中,Conv 可以提取光谱特征,是 CNN 的基础;MP 可以减少特征冗余,加快网络收敛。本文采用线性整流单元函数(rectified linear unit function, ReLU)作为激活函数。

### 1.3 网络结构

光谱噪声属于高通信号具有随机性,光谱基线属于低通信号,光谱特征峰属于高通信号且具有二阶稀疏性。根据这些特点,本工作提出的卷积神经网络的网络结构如图 1 所示。

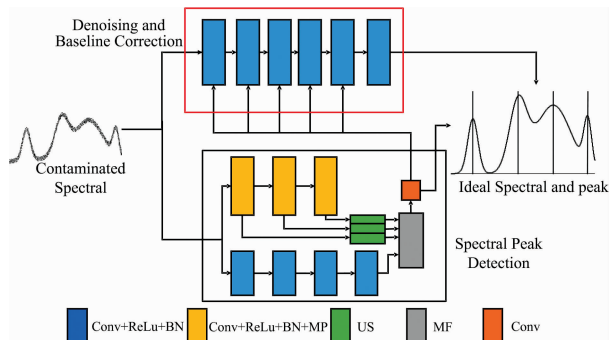


图 1 网络的结构

Fig. 1 The structure of proposed CNN

该网络由基线校正和去噪模块和光谱峰检测模块组成,基线校正和去噪模块目的是移除光谱中的噪声和基线,并为光谱峰值检测提供高质量光谱;光谱峰检测模块是为了估计光谱峰位置,并依据光谱峰的位置反作用于去噪和基线校正模块。

图 1 红框是去噪和基线校正模块,该模块是一个前馈网络,由 Conv, ReLU 和 BN 构成。在实际测试中层数较深的网络可以获得较好的效果,但是会出现过拟合的现象并且运行时间较长。为了防止过拟合现象,加入 Dropout 策略;为了减少运行时间,通过多次实验确定了如图 1 所示的 6 层结构。如前所述,大部分光谱峰都是由三种线型函数组成,理论上可以根据光谱峰的位置、峰高和半峰宽等信息,通过拟合的方法得到无噪声无基线的光谱。因此在设计网络的时候,加入光谱峰的位置信息可以指导网络在光谱峰处尽可能的保存光谱数据、防止过平滑和基线的过扣除,这样不仅会缩短训练时间,而且会防止网络产生过去噪、损失光谱精度等问题。相比于光谱峰的位置,光谱的峰高和半峰宽受噪声影响较大,为了防止错误估计带来的问题,在设计网络时仅加入光谱峰的位置信息。

图 1 黑框是光谱峰检测模块,该模块是多特征融合网络。因为光谱峰与噪声同属于高通信号,因此采用两种不同的尺度检测光谱峰。通过多次实验得到大尺寸网络和小尺寸网络的层数。大尺寸的网络运行速度较快,但是对弱峰和重叠峰存在一定误判和漏判,因此又使用最大池化来估计光谱峰位置;小尺度的网络精度较高,但运行时间较慢,因此使用卷积层,激活函数和批归一化来估计光谱峰位置。经过多尺度特征融合和卷积层后,可以获得光谱峰的位置。其中,在大尺度网络中加入上采样层,可以使各层得到的特征与原始光谱的尺寸一致,这样不仅可以减小对样本的预处理,而且可以减少训练时间。

## 2 实验部分

### 2.1 数据准备

网络训练时,将不同温度、湿度以及光谱仪预热时间得到的未处理的光谱作为受到噪声污染的光谱,在计量检定规程 JJG1034 指定的温度和湿度下,使用中国计量院标准装置

获取的光谱作为理想光谱, 并加入模拟光谱, 对网络进行训练。

选择了离散小波硬阈值(DWT)和 SG 滤波来对比本网络的去噪效果, 选择了文献[6]和文献[8]作为对比方法验证本网络的基线校正效果, 选择了三阶导数法(TD)和文献[10]来说明光谱峰定位的效果。

为了简洁地表示去噪和基线校正方法, 用 DWT+[6]表示使用 DWT 去噪并使用文献[6]提出的方法移除基线; SG+[6]表示使用 SG 去噪和文献[6]的方法移除基线; DWT+[8]表示使用 DWT 去噪和文献[8]的方法移除基线; SG+[8]表示使用 SG 滤波去噪和文献[8]的方法移除基线。均方

根误差(RMSE)和拟合优度(GFC)作为评价指标, RMSE 越小, 表示重建光谱质量越高, GFC 越接近 1, 光谱重建质量越高。

## 2.2 仿真实验

因为实际中不存在理想光谱, 因此根据式(1)、式(2)和式(3)获取的模拟光谱, 并随机添加噪声和基线, 可以精确的评估网络的性能。首先对网络的去噪能力进行分析。因为环境和仪器给光谱带来的噪声可以认为是相互独立的, 根据中心极限定理, 光谱噪声服从高斯分布, 因此加入信噪比为 50, 40, 30, 20 和 10 dB 的高斯白噪声, 结果如图 2。

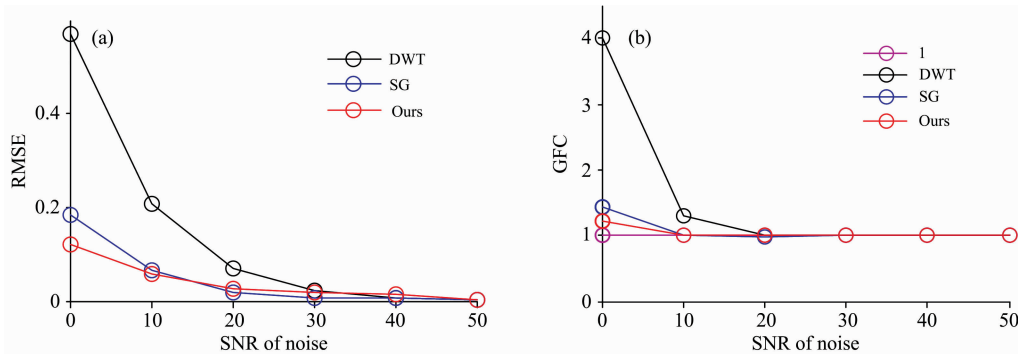


图 2 光谱去噪结果

(a): RMSE; (b): GFC

Fig. 2 The result of spectral denoising

(a): RMSE; (b): GFC

图 2(a)是去噪后的 RMSE, (b)是 GFC。可以看到随着添加噪声信噪比的增加, 去噪后的光谱与理想光谱越吻合, 本文提出的网络在光谱去噪任务中可以取得较好的结果。

因为高斯函数具有上升和下降两个过程, 可以描述大多数基线, 因此在模拟光谱中加入峰值分别为 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5 和 0.6 的高斯基线。基线校正结果如图 3 所示。

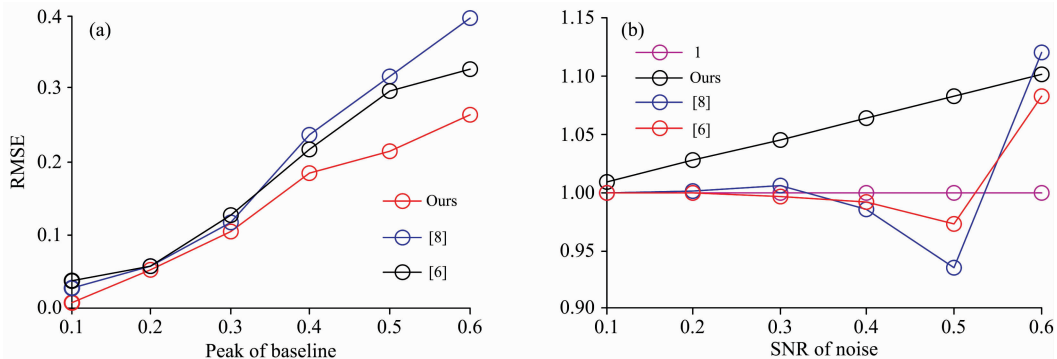


图 3 基线校正的结果

(a): RMSE; (b): GFC

Fig. 3 The result of baseline correction

(a): RMSE; (b): GFC

如图 3 所示, 图 3(a)是去噪后的 RMSE, (b)是 GFC。可以看到随着基线峰值的增加, 重建光谱与理想光谱越吻合, 相比于文献[6]和文献[8], 本文提出的网络在基线校正中可以取得较好的结果。

最后验证同时移除噪声和基线效果, 在添加峰值为 0.2 的光谱基线后, 分别添加信噪比为 0, 10, 20, 30 和 40 dB 的

高斯白噪声, 使用 DWT+[6], DTCWT+[8], SG+[6]和 SG+[8]四种组合移除噪声和基线。结果如表 1 所示。

根据表 1, DWT 去噪算法效果较差, 而提出的算法效果最优, 尤其添加信噪比为 0 dB 的高斯白噪声和高斯基线时, 本网络的 RMSE 比其他方法小了 0.407, 说明光谱峰定位在噪声抑制和基线校正的过程中有一定作用。为了更直观的表

示噪声抑制和基线校正的能力，图 4 是添加 0 dB 的高斯噪声和基线后的结果。

线校正的过程，在强噪声和基线下，TD 和文献[10]存在较大的误差，因此在无噪声的模拟光谱上进行光谱峰定位，结果如表 2。

在光谱峰定位方面，因为 TD 和文献[10]没有去噪和基

表 1 去噪和基线校正结果 (RMSE\GFC)

Table 1 The result of denoising and baseline correction (RMSE\GFC)

SNR of noise	DWT+[6]	DWT+[8]	SG+[6]	SG+[8]	Ours
0	0.981\6.379	0.973\5.963	0.577\1.197	0.571\1.183	0.146\1.011
10	0.313\1.961	0.308\1.964	0.203\0.976	0.219\0.971	0.059\0.980
20	0.099\1.061	0.096\1.059	0.068\0.952	0.067\0.950	0.020\0.988
30	0.031\1.012	0.030\1.010	0.011\1.001	0.011\1.001	0.006\0.999
40	0.010\1.000	0.010\1.000	0.007\0.998	0.007\0.999	0.002\0.999

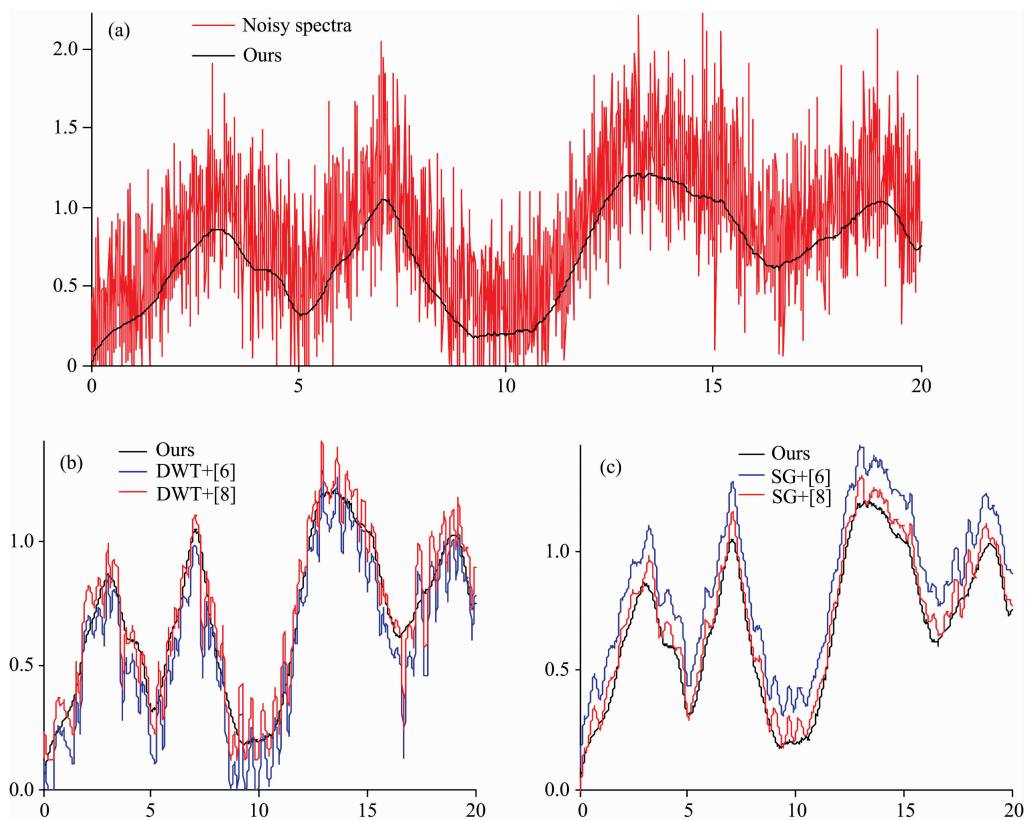


图 4 去噪和基线校正的效果

(a): 噪声和 Ours 对比; (b): DWT+[6], DWT+[8]和 Ours; (c): SG+[6], SG+[8]和 Ours

Fig. 4 Effect of denoising and baseline correction

(a): Noise and Ours; (b): DWT+[6], DWT+[8] and Ours; (c): SG+[6], SG+[8] and Ouss

表 2 光谱峰检测结果

Table 2 The result of spectrum peak detection

	标准		TD		[10]		Ours	
	位置	强度	位置	强度	位置	强度	位置	强度
1	3	0.586 7	3	0.586 7	3	0.586 7	3	0.586 7
2	7	0.843 9	7	0.843 9	7	0.843 9	7	0.843 9
3	13	1.055 4	13.26	1.030 7	13.14	1.053 1	13	1.055 4
4	15	0.875 5	—	—	14.69	0.919 6	15.02	0.870 5
5	19	0.762 3	19	0.762 3	19	0.762 3	19	0.762 3

根据表 2, 在理想无噪声无基线的情况下, TD 在较弱的重叠峰识别中存在问题, 文献[10]定位能力稍差, 本文提出的网络效果最好。

综上, 本文提出的网络不仅可以同时对光谱进行去噪、基线校正和光谱峰定位, 而且相比于传统算法, 该网络在去噪、基线校正和光谱定位等方面效果更好。

### 2.3 在实测光谱中的应用

使用偏最小二乘法对光谱进行定量分析, 以标准仪器测量的玉米的近红外光谱和每条光谱对应的水分、油等成分的浓度为样本, 共有 80 条光谱。实验中, 对每条光谱添加信噪比为 70 dB 噪声和基线, 使用估计浓度与测量浓度的均方根误差作为依据, 结果如表 3。

表 3 定量分析的均方根误差  
Table 3 RMSE of quantitative analysis

Denoising Baseline Peak	DWT				SG				Ours
	[6]		[8]		[6]		[8]		
	TD	[10]	TD	[10]	TD	[10]	TD	[10]	
Moisture	0.158	0.148	0.156	0.147	0.153	0.132	0.153	0.136	<b>0.119</b>
Oil	0.783	0.630	0.781	0.633	0.759	0.616	0.753	0.611	<b>0.414</b>

根据表 3, 通过对水分、油等物质浓度估计可以看出, 提出的网络在光谱的定量分析中, 可以取得最好的结果。证明了提出网络具有较强的使用价值。

## 3 结 论

提出一种可以同时完成光谱去噪、基线校正和谱峰定位

的卷积神经网络, 不仅提高了预处理任务的精度, 而且解决了光谱预处理中这些预处理算法的先后顺序的问题, 避免了各种算法串行运行导致误差累积的问题。仿真实验证明, 相比于传统的预处理算法, 本文提出的网络不仅可以得到高质量的光谱, 而且在光谱的定量分析中可以获得更准确的结果。

## References

- [1] Bai Yanru, Liu Quan. Biomedical Optics Express, 2020, 11(1): 200.
- [2] Delwiche S R, Reeves J B. Applied Spectroscopy, 2010, 64(1): 73.
- [3] Chen Hao, Xu Weilian, Broderick Neil, et al. Journal of Raman Spectroscopy, 2018, 49(9): 1529.
- [4] QIU Xuan-bing, SUN Dong-yuan, LI Chuan-liang, et al(邱选兵, 孙冬远, 李传亮, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2019, 39(2): 628.
- [5] Bertinetto Carlo G, Vuorinen Tapani. Applied Spectroscopy, 2014, 68(2): 155.
- [6] Zhang Zhimin, Chen Shan, Liang Yizeng. Analyst, 2010, 135(5): 1138.
- [7] Baek Sung-June, Park Aaron, Ahn Young-Jin, et al. Analyst, 2015, 140(1): 250.
- [8] Zhang Zhimin, Tong Xia, Ying Peng, et al. Analyst, 2015, 140(23): 7955.
- [9] YU Kun, JIAO Qing-liang, LIU Zi-long, et al(于 坤, 焦青亮, 刘子龙, 等). Acta Optica Sinica(光学学报), 2019, 39(9): 0930008.
- [10] Joel Wahl, Mikael Sjdahl, Kerstin Ramser. Applied Spectroscopy, 2020, 74(4): 427.
- [11] Roberto C Carvajal, Luis E Arias, Hugo O. Applied Spectroscopy, 2016, 70(4): 604.
- [12] Zhang Xiaolei, Xu Jinfan, Yang Jie, et al. Analytica Chimica Acta, 2020, 1119: 41.

# Spectral Pre-Processing Based on Convolutional Neural Network

JIAO Qing-liang<sup>1</sup>, LIU Ming<sup>1\*</sup>, YU Kun<sup>2</sup>, LIU Zi-long<sup>2,3</sup>, KONG Ling-qin<sup>1</sup>, HUI Mei<sup>1</sup>, DONG Li-quan<sup>1</sup>, ZHAO Yue-jin<sup>1</sup>

1. Beijing Key Laboratory for Precision Optoelectronic Measurement Instrument and Technology, School of Optics and Photonics, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China

2. Henan Key Laboratory of Infrared Materials and Spectrum Measures and Applications, School of Physics, Henan Normal University, Xinxiang 453007, China

3. Institute of Optics & Laser Metrology, National Institute of Metrology, Beijing 100013, China

**Abstract** The techniques of Spectral Pre-Processing is important in qualitative spectral analysis. They were aiming at the problems of poor preservation of weak peaks in denoising algorithms, over-deduction of real spectral in baseline correction algorithms, inaccurate location of spectral peaks method, and error accumulation caused by serial use of various preprocessing algorithms. In this paper, we design a convolutional neural network (CNN). This CNN consists of two modules: baseline correction and denoising module and peak detection module, which are connected and output independently. In the ideal conditions, according to the spectrum linear function, the ideal spectrum can be obtained by fitting the spectral peak location. Therefore, connecting the output of the spectral peak detection module to the baseline correction and denoising module can improve the accuracy of baseline correction and denoising effectively; and high-quality spectrum is the basis of spectral peak detection. Hence the interconnection of two modules can improve the quality of the reconstructed spectrum effectively. The spectral baseline correction and denoising module is a feed forward network consisting of several convolution layers, activation functions and batch normalization layers. The characteristic peak detection module is a multi-scale feature fusion network, that uses different-sized convolution kernels to divide the feature spectrum into different scales. The module fuses feature of different sizes to estimate the location of the characteristic spectral peak. During the training of the proposed CNN, the spectrum obtained by spectrophotometers with different temperatures, humidity and preheating times were used as input samples. The spectrum obtained from standard instruments of the National Institute of Metrology was used as output samples. In the experiment, noise with different SNR and Gaussian baselines with different peak values were added to the synthesized spectrum applied to evaluate the superiority of proposed CNN in denoising, baseline correction and spectral characteristic peak detection. Then the near-infrared spectrum of the corn, which was added noise and baseline, were taken as samples. Moreover, they, which were preprocessed using preprocessing algorithms, were applied to estimate the concentration of water and oil in corn by partial least squares. The estimated concentration compares with the real concentration, which is measured with a standard instrument, to prove the advantage of the proposed CNN. Experiments show that the proposed CNN can achieve good results in both single-task and multi-task preprocessing. Moreover, the spectrum preprocessed by the proposed CNN can get the most accurate results in quantitative analysis, which demonstrates that the proposed CNN has strong practical value.

**Keywords** Spectroscopy; Convolutional neural network; Spectra denoising; Baseline correction; Characteristic peak positioning

(Received Dec. 29, 2020; accepted Apr. 11, 2021)

\* Corresponding author