

基于小波统计分析的 X 射线衍射信号消噪研究

高清维 刘艳美* 庄镇泉

(中国科学技术大学电子科学与技术系,合肥 230026)(*安徽大学物理系,合肥 230039)

【摘要】本文讨论了小波统计分析的 X 射线衍射信号消噪方法,选取具有 7 阶消失矩的 Symmlet 小波将受噪声污染的 X 射线衍射信号进行多层分解,利用小波变换的细节系数估计噪声均方差 σ ,选取阈值 $\sigma \sqrt{2 \ln n}$ (n 为细节系数长度),对小波分解的细节系数进行阈值处理,然后进行信号重建,以达到对信号消噪和提纯,实验结果表明,这种去噪方法是非常有效的,它在消除噪声的同时保留了信号的奇异特征。

关键词:小波变换 统计分析 X 衍射 消噪

De-noising of X Radial Diffraction Signal Based on Wavelet Statistical Analysis

Gao Qingwei Liu Yanmei Zhuang Zhenquan

(Department of Electronic Science and Technology, University of Science and Technology of China, Hefei, 230026)

(Department of Physics, Anhui University, Hefei, 230026)

Abstract: In this paper, the de-noising method of wavelet statistical analysis is discussed. Symmlet wavelet with seven vanishing moments is selected to decompose the noisy X radial diffraction signal for several levels. The noise mean square σ is estimated by the wavelet details at first level, the wavelet details toward 0 by a threshold $\sigma \sqrt{2 \ln n}$, where n is length of the detail. The recovery signal is reconstructed, experiment result shows this de-noising method reserves singularity character of signal. It is very valid.

Keywords: Wavelet transform, statistical analysis, X radial diffraction, de-noising.

1 引言

X 射线衍射是测定晶体甚至固体分子结构的最重要工具之一,测定晶体结构的主要任务有两方面:晶胞的形状和大小及晶胞中原子的种类和分布,前者由测定 X 射线衍射的方向来进行分析,后者则通过对各个衍射点或线的强度确定。由于振动、电磁干扰以及电压不稳定等原因,常使 X 射线衍射信号受到噪声污染,给所测信号的分析带来不便,特别是当测试信号中有弱峰信号情况时,噪声污染使弱峰难以识别。平滑滤波是降低噪声的常用方法,但是 X 射线衍射测试信号常表现为尖锐的山峰状信号,平滑滤波在去除噪声的同时也会使有用的谱峰变得平滑以及峰形发生畸变。目前,小波分析正成为国内外极为活跃的研究方向之一。本文利用小波分析的多分辨率分析可以聚焦到信号的任意细节进行处理的特点,采用噪声分离的非线性小波方法,从混有噪声的信号中恢复原信号波形取得了明显的效果,也为仪器测试信号提纯提供了一个新的方法。

本文获得 973 国家重点基础研究发展规划项目(G1998030413)和国家自然科学基金(59903006)资助。

本文于 2000 年 12 月收到。高清维:博士研究生;庄镇泉:教授,博士生导师。

2 小波多分辨率分析

设 $\{V_j\}_{j \in \mathbb{Z}}$ 是一个给定正交多分辨率分析^{[1][2]}, $\phi(t)$ 及 $\psi(t)$ 分别是对应的尺度函数和小波函数, 即

$$\phi(t) = \sqrt{2} \sum_k h_k \phi(2t - k) \quad (1)$$

$$\psi(t) = \sqrt{2} \sum_k g_k \psi(2t - k) \quad (2)$$

设信号 $f(t) \in V_j$ 是一给定的分辨率为 2^{-j} 的多分辨率逼近, Mallat 给出了离散二进小波变换的金字塔算法, 若 f_k 为信号的离散采样数据, 令 $c_{j,k} = f_k$ (实际应用中常以 $C_{0,k} = f_k$ 作为计算的初始信号序列), 则有信号的多分辨率分析公式为:

$$\begin{cases} c_{j+1,m} = \sum_k \bar{h}(k-2m) c_{j,k} \\ d_{j+1,m} = \sum_k \bar{g}(k-2m) c_{j,k} \end{cases} \quad (3)$$

引入 $H = (H_{m,k}), G = (G_{m,k})$, 其中 $H_{m,k} = \bar{h}(k-2m), G_{m,k} = \bar{g}(k-2m)$, (3) 式可写成

$$\begin{cases} c_{j+1} = Hc_j \\ d_{j+1} = Gc_j \end{cases} \quad (4)$$

$c_{j,k}$ 为信号的逼近系数, $d_{j,k}$ 为信号的细节系数。相应信号的有信号的重建公式为:

$$c_{j,k} = \sum_m h(k-2m) c_{j+1,m} + \sum_m g(k-2m) d_{j+1,m} \quad (5)$$

即

$$c_j = H^* c_{j+1} + G^* d_{j+1} \quad (6)$$

其中 H^* 和 G^* 分别是 H 和 G 的对偶算子。

3 小波统计分析信号消噪方法

小波统计分析消除噪声^[3]是由 Donoho 和 Johnstone 提出的通过选择适当小波系数重构的方法, 得到对源信号的一个估计值, 是一种基于风险估计的检测方法, 一个源信号 $f(t_i)$ 被一加性噪声污染, 则污染后的信号为

$$y_i = f(t_i) + e_i \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (7)$$

$t_i = i/n, e_i$ 为白噪声, $e_i \sim N(0, \sigma^2), f(\cdot)$ 是需要恢复的未知信号, 我们要测量一个估计值 $\hat{f}(\cdot)$, 设 $f = (f(t_i))_{i=1}^n$ 和 $\hat{f} = (\hat{f}(t_i))_{i=1}^n$ 分别代表真实值向量和估计样值向量, 并设 $\|f\|_{2,n}^2 = \sum_{i=1}^n f_i^2$ 表示 L_n^2 的平方模。用风险率 R 作为考核其性能的标准

$$R(\hat{f}, f) = n^{-1} \|\hat{f} - f\|_{2,n}^2 \quad (8)$$

我们希望 $R(\hat{f}, f)$ 尽可能地小。

对于含有噪声的信号 y_i , 令 $c_{0,k} = y_i$ 表示初始信号序列, 按 (4) 式对 $c_{0,k}$ 进行多级分解, 得到逼近系数 $c_{j,k}$ 和多级细节系数 $d_{1,k}, d_{2,k}, \dots, d_{j,k}$, 逼近系数 $c_{j,k}$ 主要是源信号的成分, 细节系数

$d_{j,k}$ 主要是噪声成分以及少量源信号奇异点处的小波变换成分, 设 $d_{j,k} = \theta_{j,k} + z_{j,k}$, 其中 $\theta_{j,k}$ 为源信号小波变换成分, $z_{j,k}$ 为噪声小波变换成分, 令 $\hat{d}_{j,k}$ 为 $d_{j,k}$ 的估计值

$$\hat{d}_{j,k} = \begin{cases} \bar{d}_{j,k} & 1 \leq j \leq j_0 \\ d_{j,k} & j_0 < j \leq J + 1 \end{cases} \quad (9)$$

j_0 成为低分辨率截断参数, $\bar{d}_{j,k}$ 可由阈值门限算出, 阈值门限可选取为 $\sigma \sqrt{2 \ln n}$, σ 为白噪声的均方差, n 为白噪声的长度; 对于白噪声而言, 其小波变换主要集中在第一层细节系数中, 随着 j 增大, 白噪声小波变换的方差逐渐减小, 因此可以利用小波变换第一层细节系数估计噪声的方差, $\sigma = \text{median}(|d_{1,k}|) / 0.6745$; 对 $d_{j,k}$ 的阈值处理可分为硬阈值和软阈值两种方式, 硬阈值处理为

$$\bar{d}_{j,k} = \begin{cases} d_{j,k} & |d_{j,k}| \geq \sigma \sqrt{2 \ln n} \\ 0 & \text{其它} \end{cases} \quad (10)$$

软阈值处理为

$$\bar{d}_{j,k} = \begin{cases} \text{sgn}(d_{j,k})(|d_{j,k}| - \sigma \sqrt{2 \ln n}), & |d_{j,k}| \geq \sigma \sqrt{2 \ln n} \\ 0, & \text{其它} \end{cases} \quad (11)$$

对处理后的细节系数与逼近系数按(6)式重建得到噪声污染信号的估计值 \hat{f} 。软阈值处理得到的估计信号 \hat{f} 同原始信号 f 具有相同的光滑度, 然而从 l^2 范数误差 $R(\hat{f}, f)$ 最小观点来讲, 硬阈值处理优于软阈值处理方法, 但由硬阈值处理得到的估计信号 \hat{f} 不具有期望的同原始信号 f 相同的光滑度。

4 X 射线衍射测试信号的消噪实现

在信号消噪中, 合适的小波选取, 直接影响信号消噪的效果, 对于小波函数 $\psi(t)$, 若

$$\int_{-\infty}^{\infty} t^m \psi(t) dt = 0; \quad m = 0, 1, \dots, M - 1 \quad (12)$$

我们称小波 $\psi(t)$ 有 M 阶消失矩^[4], 小波的消失矩特性使信号在小波展开时消去了其低阶平滑部分, 也即信号展开为多项式的前 $M - 1$ 项对应信号的光滑部分, 小波系数将是非常小的, 因此小波变换将仅仅反映信号的高阶变化部分, 在噪声污染信号作小波变换时, 小波消失矩越高, 细节系数的噪声成分越高, 源信号成分主要集中在逼近系数中, 这是我们所希望的。但是, 小波的消失矩越高, 对应的小波滤波器系数越长, 这给计算带来不便。因此, 可根据信号的特点选取合适的小波, 对 X 射线衍射信号我们一般选取具有 7 ~ 10 阶消失矩的 Symmlet 小波, 具体算法如下:

4.1 信号的小波多分辨率分解

利用 Mallat 分解算法对被噪声污染的 X 射线衍射信号进行多层分解, 形成逼近系数和多层细节系数, 每次分解过程如图 1(a) 所示, 图 1(b) 为相应的重建过程。

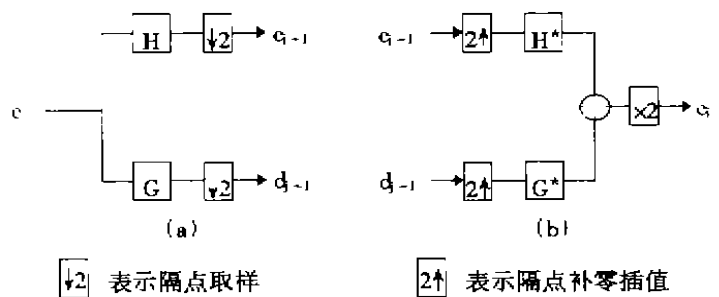


图 1 (a) 信号的分解过程 (b) 信号的重建过程

4.2 噪声均方差估计及细节系数阈值处理

由于噪声污染的 X 射线衍射信号经小波多层分解后,第一层小波变换的细节系数主要是噪声成分,因此利用第一层小波变换的细节系数进行噪声均方差 σ 估计,均方差估计值为

$$\sigma = \frac{\text{median}(|d_{1,k}|)}{0.6745} \tag{13}$$

计算阈值 $\sigma \sqrt{2 \ln n}$,确定低分辨率参数 j_0 .对 $j \leq j_0$ 的细节系数 $d_{j,k}$ 进行阈值处理,其它系数保持不变。

4.3 信号重建

对处理后的细节系数及逼近系数按 Mallat 重建算法进行信号的重建,即得到消噪后的信号。

5 实验结果与讨论

图 2(a)是日本 MAC Science 公司生产的 MXP18KW 型 X 射线衍射仪上实测 ZnO 薄膜材料 X 射线衍射信号(安徽大学结构物理和新材料重点实验室提供),我们选择消失矩阶数为 $M = 7$ 的 Symmlet 小波对实测信号进行 3 层分解, j_0 取 3,按上述消噪算法进行消噪处理,结果如图 2(b)及图 2(c)所示,图 2(b)是小波分解细节系数硬阈值处理的消噪结果,图 2(c)是小波分解细节系数软阈值处理的消噪结果,从实验结果可以看出,采用硬阈值处理的信号与采用软阈值处理的信号相比,仍有少量毛刺,信号波形较粗糙,采用软阈值处理的信号波形形状较好,信号幅度稍有下降,但是在 X 射线衍射信号分析中,并不关心信号中峰的绝对幅度,而是关心信号中各个峰的相对幅度比例,因此采用软阈值处理的消噪效果比硬阈值处理的消噪效果更为理想,而且采用统计分析及阈值消噪方法在去除噪声时可以保留信号中突变的有用信号成分,经消噪后反映晶体结

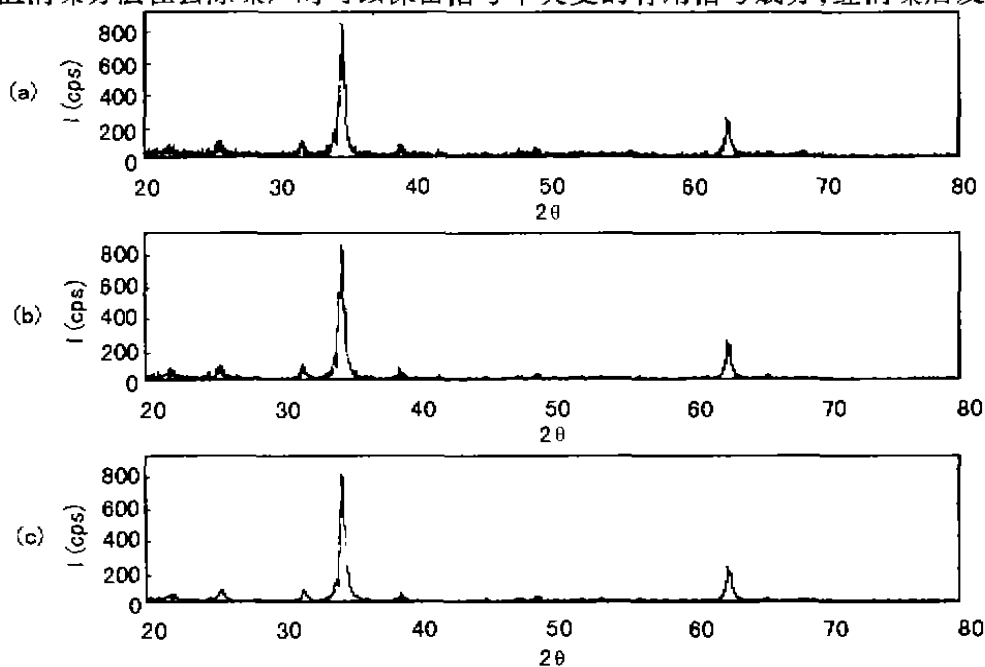


图 2 X 射线衍射信号消噪

(a)实测 X 射线衍射信号 (b)硬阈值消噪后 X 射线衍射信号 (c)软阈值消噪后 X 射线衍射信号

构特征的弱峰信号得以清晰浮现,为结构分析提供了更准确的依据,实验结果证明采用小波统计分析进行X射线衍射信号消噪和提纯是非常有效的方法。

致谢:感谢安徽大学物理系赵宗彦教授的大力支持和帮助!

参考文献

- [1] Mallat S G. A theory for multiresolution signal decomposition: the wavelet representation. IEEE Trans on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 1989, 11(7): 674 ~ 693.
- [2] 张贤达, 现代信号处理, 北京: 清华大学出版社, 1994: 506 ~ 513.
- [3] David L. Donoho and Iain M. Johnstone. Ideal spatial adaptation by wavelet shrinkage. Biometrika, 1994, 81, 3: 425 ~ 455.
- [4] I. Daubechies. Ten lectures on wavelet. Capital City Press, 1992.



作者简介

高清维:男,1965年1月4日生,安徽肥东县人,1985年毕业于安徽大学物理系,1998年于安徽大学获电路与系统专业硕士学位,现在安徽大学自动化系从事教学和科研工作,讲师,中国科学院大学电子科学与技术系信号与信息处理专业在职博士研究生,主要从事数字信号处理、小波分析、分形理论及其应用方面的研究工作。

(上接第10页)

参考文献

- [1] 高立明,林良明等,全方向蠕动机器人驱动内窥镜系统的研究,中国生物医学工程学报,Vol.17, No.1,1998,3, p36 ~ 41.
- [2] J. F. Rey, etc, al., Electronic Video Endoscopy: Preliminary Results of Imaging Modification, Endoscopy, Vol. 20, 1988: 8 ~ 10.
- [3] S. Guadagni, etc, al., Imaging in Digestive Videoendoscopy, SPIE Vol. 1420, Optic Fibers in Medicine, 1991: 178 ~ 182.
- [4] ALTERA Databook, 1998.
- [5] 王兆华,二维重叠列率数字滤波器,电子学报, Vol. 13, No. 6, 1985, 11: 13 ~ 18.



作者简介

江洁:2000年毕业于天津大学精密仪器与光电子学院,获博士学位,现为天津大学自动化学院博士后,主要从事医疗仪器的研制与医学图像的处理。