

УДК 681.391:543/545

ВЕЙВЛЕТ-АНАЛИЗ В ОБРАБОТКЕ СИГНАЛОВ АНАЛИТИЧЕСКИХ ПРИБОРОВ

© 2016 Р.Т. Сайфуллин, А.А. Наумов

Самарский государственный технический университет

Статья поступила в редакцию 17.03.2016

В статье рассмотрены свойства вейвлет-преобразования и его применение для обработки сигналов аналитических приборов (хроматографов, полярографов, масс-спектрометров и др.). Для конкретных сигналов и вейвлет-функций представлены результаты аналитического вычисления непрерывного вейвлет-преобразования, которые используются затем в алгоритмах вычисления информативных параметров пиков и разделения совмещенных сигналов.

Ключевые слова: вейвлет, вейвлет-преобразование, обработка сигналов

Вейвлет-анализ является одним из наиболее мощных и гибких средств исследования и цифровой обработки сигналов: помимо задач их фильтрации и сжатия, анализ в базисе вейвлет-функций позволяет решать задачи идентификации, моделирования, аппроксимации стационарных и нестационарных процессов, исследовать вопросы наличия разрывов в производных и т.д. Вейвлет-преобразование привносит в обработку сигналов дополнительную степень свободы. Например, гармонический анализ Фурье способен показать поведение сигнала в частотной области, оставляя открытым вопрос о локализации во времени различных компонент сигнала. Таким образом, вейвлет-функции базиса позволяют сконцентрировать внимание на тех или иных локальных особенностях анализируемых сигналов, которые не могут быть выявлены с помощью традиционного преобразования Фурье.

Непрерывное вейвлет-преобразование (ВП) сигнала $f(t)$ имеет следующий вид [1]:

$$W_f(a, b) = a^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \Psi\left(\frac{t-b}{a}\right) dt, \quad (1)$$

где функция $\Psi\left(\frac{t-b}{a}\right)$ называется вейвлетом; a, b – параметры соответственно масштаба и сдвига. Множитель $a^{-\frac{1}{2}}$ обеспечивает единичную норму для любой базисной функции $\Psi_{a,b}(t) = a^{-\frac{1}{2}} \Psi\left(\frac{t-b}{a}\right)$.

Обратное вейвлет-преобразование записывается в виде:

$$f(t) = \frac{1}{C_\Psi} \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty W_f(a, b) \Psi_{a,b}(t) \frac{da db}{a^2}.$$

Здесь C_Ψ – нормирующий коэффициент:

$$C_\Psi = \int_{-\infty}^\infty \frac{|\hat{\Psi}(\omega)|}{|\omega|} d\omega < \infty, \quad (2)$$

где $\hat{\Psi}(\omega)$ – Фурье-образ вейвлет-функции $\Psi(t)$. Из равенства (2) следует условие допустимости использования функции $\Psi(t)$ в качестве вейвлет-функции: среднее (нулевой момент) $\Psi(t)$ должен быть нулевым

$$M_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(t) dt = 0. \quad (3)$$

Другое требование – быстрое убывание $\Psi(t)$ с ростом частоты. Для практических приложений часто бывает необходимым обеспечение нулевых значений первых m моментов вейвлета:

$$M_m = \int_{-\infty}^{\infty} t^m \Psi(t) dt = 0, \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (4)$$

Разложим ВП (1) в ряд Тейлора при $b = 0$:

$$W_f[a, 0] = a^{-\frac{1}{2}} \left(\sum_{m=0}^n f^{(m)}(0) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{t^m}{m!} \Psi\left(\frac{t}{a}\right) dt + O(n+1) \right),$$

где $f^{(m)}(0)$ – производная порядка m ; $O(n+1)$ – члены ряда Тейлора порядка выше n . Используя определение моментов (4), можно записать:

$$W_f[a, 0] \approx a^{-\frac{1}{2}} \left(f(0) M_0 a + \frac{f^{(1)}(0)}{1!} M_1 a^2 + \frac{f^{(2)}(0)}{2!} M_2 a^3 + \dots + \frac{f^{(n)}(0)}{n!} M_n a^{n+1} \right). \quad (5)$$

В соответствии с (3) $M_0 = 0$, тогда первый член в разложении (5) является нулевым. Следовательно, ВП постоянного сигнала даст в результате нуль. Таким образом, число нулевых моментов вейвлета определяет порядок полинома, который будет проигнорирован вейвлет-преобразованием в анализируемом сигнале. Например, выходной сигнал аналитического прибора имеет составляющую дрейфа базовой линии, которая обычно представляется как полиномиальный сигнал вида $d(t) = d_0 + d_1 t + d_2 t^2$, где d_0, d_1, d_2 – некоторые коэффициенты. При этом коэффициенты d_1, d_2 определяют собственно дрейф, который может вызываться нестабильностью режимов аналитической системы прибора, дрейфом параметров электронного блока и другими причинами. Если для ВП использован вейвлет $\Psi(t)$ с двумя нулевыми моментами, то эта дрейфовая составляющая не отразится на результате преобразования выходного сигнала прибора.

Коэффициенты $W(a, b)$ содержат комбинированную информацию как об используемом вейвлете, так и об анализируемом сигнале. Выбор анализирующего вейвлета определяется тем, какую информацию

Сайфуллин Раухат Талгатович, доктор технических наук, профессор. E-mail: ims@samgtu.ru
Наумов Александр Анатольевич, аспирант. E-mail: Naumoff.aleksandr@gmail.com

требуется извлечь из сигнала. Каждый вейвлет имеет характерные особенности во временном и частотном пространстве, поэтому с помощью разных вейвлетов можно полнее выявить или подчеркнуть те или иные свойства анализируемого сигнала.

Спектр $W(a, b)$ одномерного сигнала представляет собой поверхность в трехмерном пространстве. Способы визуализации этой информации могут быть различными. Вместо изображения поверхностей часто представляют их проекции на плоскость (a, b) с изолиниями или изоуровнями, позволяющими проследить изменение амплитуд вейвлет-преобразования на разных масштабах и во времени. Несмотря на то, что коэффициенты вейвлет-преобразования содержат комбинированную информацию, вейвлет-анализ позволяет получить и объективную информацию об исследуемом сигнале, так как некоторые важные свойства вейвлет-преобразования не зависят от выбора вейвлета.

В качестве вейвлетов будем использовать производные функции Гаусса:

$$\psi_n(t) = (-1)^{n+1} \frac{d^n}{dt^n} e^{-\frac{t^2}{2}}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Наибольшее применение находят гауссовы вейвлеты небольших порядков:

$$\psi_1(t) = -te^{-\frac{t^2}{2}};$$

$$\psi_2(t) = (1 - t^2)e^{-\frac{t^2}{2}};$$

$$\psi_3(t) = (t^3 - 3t)e^{-\frac{t^2}{2}};$$

$$\psi_4(t) = (-t^4 + 6t^2 - 3)e^{-\frac{t^2}{2}};$$

$$\psi_5(t) = (-t^5 + 10t^3 - 15t)e^{-\frac{t^2}{2}};$$

$$\psi_6(t) = (-6t^6 + 15t^4 - 45t^2 + 15)e^{-\frac{t^2}{2}};$$

$$\psi_7(t) = (-t^7 + 21t^5 - 105t^3 + 105t)e^{-\frac{t^2}{2}};$$

$$\psi_8(t) = (-t^8 + 28t^6 - 210t^4 + 420t^2 - 105)e^{-\frac{t^2}{2}}.$$

Присутствие экспоненциального множителя в вейвлетах обеспечивает их локальность. Гауссов вейвлет $\psi_n(t)$ имеет n нулей. Из определения гауссовых вейвлетов следует, что производная от вейвлета $\psi_n(t)$ совпадает (с точностью до знака) с вейвлетом $\psi_{n+1}(x)$:

$$\frac{d\psi_n(t)}{dt} = -\psi_{n+1}(t).$$

Вейвлетом может быть и разность функций Гаусса. Обобщенная формула для этого вейвлета имеет вид:

$$\psi(t) = e^{-At^2} - Ce^{-Bt^2}; \quad A = \frac{B}{C^2};$$

$$\hat{\psi}(\omega) = \sqrt{\frac{\pi}{A}} e^{-\frac{\omega^2}{4A}} - C \sqrt{\frac{\pi}{B}} e^{-\frac{\omega^2}{4B}}.$$

Например, при $A = C = \frac{1}{2}$, $B = \frac{1}{8}$ получим:

$$\psi(t) = e^{-\frac{t^2}{2}} - \frac{1}{2}e^{-\frac{t^2}{8}}.$$

На выходе аналитических приборов регистрируются сигналы в виде локализованных пиков (см. табл. 1).

Таблица 1. Некоторые типовые модели аналитических пиков

Аппроксимирующая функция	Математическое выражение (p – площадь пика; μ – положение пика на оси развертки; β – среднеквадратичная ширина пика)	Область применения
Гаусса	$\frac{p}{\sqrt{2\pi\beta}} e^{-\frac{(t-\mu)^2}{2\beta^2}}$	Хроматография, масс-спектрометрия, рентгенодифракционный анализ
Лоренца	$\frac{p}{\pi\beta} \left[\frac{1}{\frac{(t-\mu)^2}{\beta^2} + 1} \right]$	Спектроскопия, рентгенодифракционный анализ
Гиперболическая вида I	$\frac{p}{2\beta \operatorname{ch} \left[\frac{\pi(t-\mu)}{2\beta} \right]}$	Полярография
Гиперболическая вида II	$\frac{\pi p}{2\beta \operatorname{ch}^2 \left[\frac{\pi(t-\mu)}{2\beta} \right]}$	Полярография

Для некоторых конкретных сигналов и вейвлет-функций возможно аналитическое вычисление непрерывного вейвлет-преобразования. Это позволяет по значениям вейвлет-коэффициентов определять информативные параметры пиков, входящих в состав исследуемого сигнала. Поскольку даже в случае зашумленных сигналов их вейвлет-образы имеют вид гладких кривых, возможно восстановление информативных параметров выходного сигнала прибора с достаточно высокой точностью.

Оценка параметров сигнала. Полезная составляющая выходного сигнала аналитического прибора в большинстве случаев может быть представлена в виде суперпозиции пиков, каждый из которых описывается гауссовой функцией [2, 3]:

$$S(t) = \sum_{i=1}^N A_i e^{-\frac{(t-\mu_i)^2}{2\beta_i^2}},$$

где i – номер пика, $i = 1, 2, \dots, N$; A_i – амплитуда i -го пика; μ_i – положение вершины i -го пика на оси развортки t ; β_i – среднеквадратичная ширина i -го пика. Первичная обработка сигнала заключается в определении информативных параметров пиков: $A_i, \mu_i, \beta_i, i = 1, 2, \dots, N$.

Пусть анализируемый сигнал содержит одиночный пик с параметрами A, μ, β . Вейвлет-образ этого пика при использовании гауссового вейвлета может быть вычислен аналитически и представлен в виде:

$$W_{g_n}(a, b)s = \frac{A\sqrt{\pi}\beta a^{(n+1)}}{\tau^{n+1}} g_n(z),$$

где $z = \frac{\mu-b}{\tau}$ и $\tau = \sqrt{a^2 + \beta^2}$.

Формулы вейвлет-коэффициентов второго и четвертого порядков имеют вид:

$$W_{g_2}(a, b)s = \frac{\sqrt{\pi}A\beta a^3}{\tau^3} \left[1 - \frac{(\mu-b)^2}{\tau^2} \right] e^{-\frac{(\mu-b)^2}{2\tau^2}},$$

$$W_{g_4}(a, b)s = \frac{\sqrt{\pi}A\beta a^5}{\tau^5} \left[6\left(\frac{\mu-b}{\tau}\right)^2 - \left(\frac{\mu-b}{\tau}\right)^4 - 3 \right] e^{-\frac{(\mu-b)^2}{2\tau^2}}.$$

На рис. 1 и рис. 2 представлены графики соответствующих вейвлет-коэффициентов модельного сигнала с параметрами пика $A=10$ и $\beta=8$.

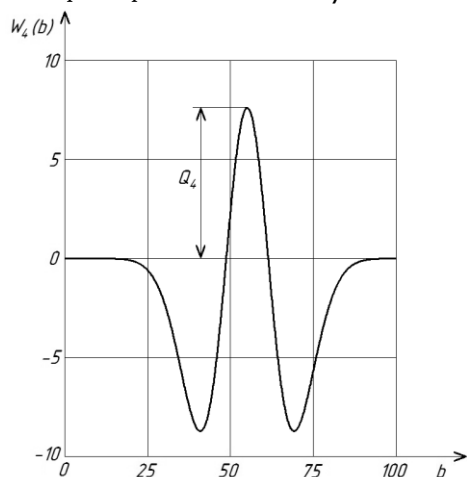


Рис. 1. Вейвлет-коэффициент четвертого порядка

При $z = 0$ четные вейвлет-коэффициенты $W_{g_2}(a, b)s$ и $W_{g_4}(a, b)s$ имеют абсолютный максимум, что может служить фактом обнаружения вершины пика в анализируемом сигнале. Обозначим максимальные значения вейвлет-коэффициентов $W_{g_2}(a, b)s$ и $W_{g_4}(a, b)s$ в максимуме через Q_2 и Q_4 . Решение соответствующей системы уравнений дает оценки параметров $\hat{\beta}$ и $\hat{A}$ одиночного пика анализируемого сигнала:

$$\hat{\beta} = a \sqrt{\left(\frac{3Q_2}{Q_4} - 1 \right)}; \quad (6)$$

$$\hat{A} = \frac{Q_2 \left(1 + \frac{\beta^2}{a^2} \right)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi} \cdot \hat{\beta}}. \quad (7)$$

Следовательно, интегральная интенсивность (площадь) гауссова пика может быть найдена из соображения:

$$\hat{p} = \sqrt{2\pi} \hat{A} \hat{\beta} = \sqrt{2} Q_2 \left(1 + \frac{\hat{\beta}^2}{a^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$

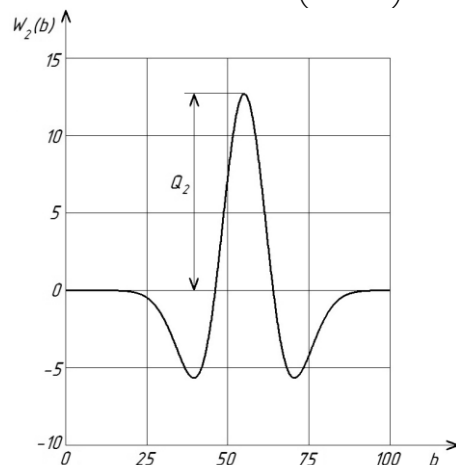


Рис. 2. Вейвлет-коэффициент второго порядка

Рассмотрим результат восстановления аналитического пика гауссовой формы на основе метода вычисления его вейвлет-коэффициентов. На рис. 3 сплошной линией показан исходный пик; точками – восстановленный пик с использованием соотношений (6, 7). В случае одиночного пика имеем полное их совпадение.

Разделение совмещенных сигналов. Рассмотрим применение метода для разделения совмещенных пиков. На рис.1 представлен сигнал с двумя совмещенными пиками, а на рис. 2 его вейвлет-коэффициенты соответственно второго и четвертого порядков.

Для оценки параметров пиков необходимо использовать следующую процедуру. На основе анализа вейвлет-коэффициентов по формулам (6), (7) восстанавливается первый пик, который затем вычитается из исходного сигнала. К разностному сигналу применяется вейвлет-преобразование второго и четвертого порядков, по максимальным значениям которых восстанавливается второй пик. Находим сигнал разности

между исходным сигналом и вторым пиком. Применяем к этому разностному сигналу вейвлет-преобразования и находим уточненные оценки параметров первого пика. Описанные действия производятся до тех пор, пока разностный сигнал между исходным сигналом и восстановленными пиками не перестанет уменьшаться. Данная процедура позволяет полностью восстановить неразделенные пики за 6-7 итераций.

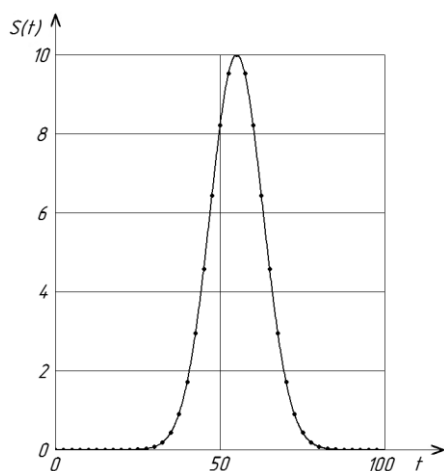


Рис. 3. Исходный и восстановленный пики: сплошная линия – исходный сигнал; $\cdots$ – восстановленный сигнал

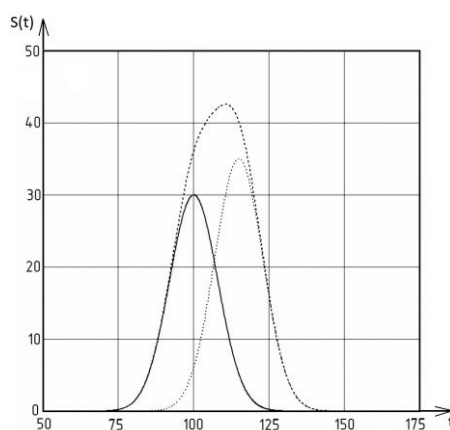


Рис. 4. Сигнал с двумя совмещенными пиками: сплошная линия – пик 1; $\cdots$ – пик 2; ---- суммарный пик

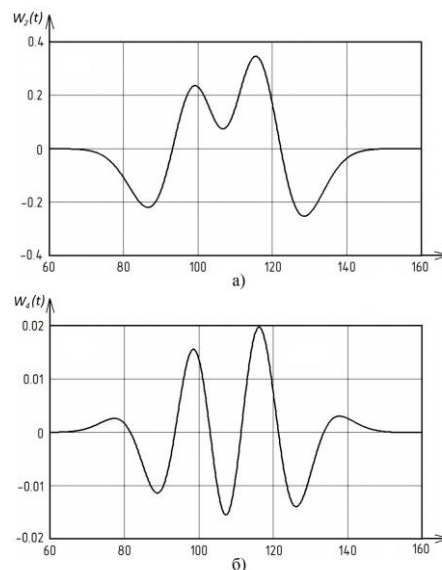


Рис. 5. Вейвлет-коэффициенты исходного сигнала: а – второго порядка; б – четвертого порядка

Выводы: Проанализирован метод первичной обработки сигналов аналитических приборов на основе их вейвлет-преобразования. Благодаря использованию заранее полученных формул расчета вейвлет-коэффициентов удается построить быстрые вычислительные алгоритмы обработки, что в сочетании с высокой их эффективностью является значительным достоинством метода.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Малашкевич, И.А. Вейвлет-анализ сигналов. Теория и практика. – Йошкар-Ола: МарГТУ, 2008. 224 с.
2. Русинов, Л.А. Автоматизация аналитических систем определения состава и качества веществ. – Л.: Химия, 1984. 160 с.
3. Манойлов, В.В. Получение и обработка информации аналитических приборов / В.В. Манойлов, Л.В. Новиков. – СПб: Университет ИТМО, 2014. 176 с.

WAVELET ANALYSIS FOR PROCESSING SIGNALS OF ANALYTICAL DEVICES

© 2016 R.T. Saifullin, A.A. Naumov

Samara State Technical University

In the paper properties of wavelet-transformation and its application to signals processing of analytical devices (chromatographs, polarographs, mass spectrometers, etc.) are considered. For concrete signals and wavelet-functions results of analytical calculation of continuous wavelet-transformation which are used then in algorithms of calculation the informative parameters of peaks and separation of the superposed signals are presented.

Key words: wavelet, wavelet-transformation, signals processing