

基于 EEMD 的中药三维荧光光谱去噪方法研究^①

樊凤杰^{②*} 轩凤来^{③*} 白 洋* 高儒帅**

(* 燕山大学电气工程学院生物医学工程系 秦皇岛 066004)

(** 燕山大学电气工程学院自动化系 秦皇岛 066004)

摘 要 针对中药三维荧光光谱信号特征提取中的噪声问题,基于集合经验模态分解(EEMD)的去噪原理,对中药溶液的三维荧光光谱信号进行去噪研究。利用相关系数和箱线图筛选固有模态分量(IMF),将筛选后的 IMF 进行重构得到去噪后的数据。并探讨了 EEMD 分解时添加的高斯白噪声的幅值及设定相关系数的大小对去噪效果的影响。结果显示,当高斯白噪声的幅值为原信号标准差的 0.2 倍,相关系数大于 0.5 筛选 IMF 分量时,EEMD 方法能很好地消除中药白术溶液三维荧光光谱信号中的噪声。进一步将该方法与经验模态分解(EMD)及小波去噪方法进行比较,结果表明,EEMD 方法对中药溶液三维荧光光谱数据去噪效果优于 EMD 及小波去噪方法。

关键词 三维荧光光谱,经验模态分解(EMD),集合经验模态分解(EEMD),小波分解,光谱去噪,中药

0 引 言

中药指纹图谱技术是实现中药现代化的有力工具^[1],已广泛用于中药鉴别、成分分析、质量控制、中药分类识别等领域。中药指纹图谱按测试手段分为中药化学指纹图谱和中药生物指纹图谱,中药化学指纹图谱系是指采用光谱、色谱和其他分析方法建立的用以表征中药化学成分特征的指纹图谱,常用的光谱有红外光谱、荧光光谱、紫外吸收光谱^[2]。其中荧光光谱分析法由于灵敏、快速、高效、实用性强等优点逐渐成为中药分析中倍受关注的研究方法^[3]。李兴旺等^[4]对 5 种 56 个批次中药注射剂的荧光光谱进行分析,结果表明三维荧光光谱聚类图有较好的分类和预测作用,并有较强的可视性,可用于中药注射剂的鉴别和聚类分析。闫立华等^[5]利用荧光光谱法对玄参汤剂的荧光光谱进行分析,为

玄参汤剂的质量鉴别提供了一种新的分析手段。杜建卫^[6]对中药光谱指纹图谱与色谱指纹图谱的分类特性进行了研究,结果表明光谱谱图数据的分类效果要明显优于色谱谱图数据。

在中药三维荧光光谱分析过程中,由于受到仪器以及外界环境的影响,荧光信号往往包含一定的噪声,影响光谱信号的特征,因此对中药三维荧光光谱进行消噪是中药光谱特征提取及分类识别研究的关键步骤。目前,常用的光谱去噪方法大致上分为两类:一类是以光谱平滑技术为主,例如移动平均法、最小二乘多项式法等^[7]。另一类则以信号提取和噪声分离为主,主要有小波去噪^[8,9]、经验模态分解(empirical mode decomposition,EMD)^[10]等。以光谱平滑技术为主的去噪方法在有效去除噪声的同时,会对原始荧光光谱的形状产生影响,导致光谱信号失真。以信号提取和噪声分离为主的去噪法成为当前光谱去噪的主要方法。小波去噪过程中,基函

① 国家自然科学基金(61201111)和燕山大学博士基金(BL17026)资助项目。
② 女,1977 年生,博士,副教授;研究方向:数据挖掘,中医药大数据知识发现;E-mail: ffjnz@ 126.com
③ 通信作者,E-mail: ml8332537214_2@ 163.com
(收稿日期:2018-04-24)

数是固定的,一旦确定好小波基,将用于分析所有数据,如果选择的小波基不合适将会限制其去噪性能。EMD 可以将数据分解成具有物理意义的一组本征模态函数分量,在一定程度上克服了小波变换的不足,但 EMD 存在的模态混叠问题影响去噪效果,而集合经验模态分解(ensemble empirical mode decomposition, EEMD)可有效地解决这一问题。EEMD 是一种新的自适应时频分解方法,根据信号自身局部特点自适应得到基函数进行信号分解,并且通过添加高斯白噪声解决了经验模态分解存在的模态混叠问题,达到较好的去噪效果^[11]。因此,本文将 EEMD 分解方法应用到中药三维荧光光谱信号去噪研究中,详细分析了 EEMD 中加入的高斯白噪声的幅值大小以及选取的相关系数对去噪效果的影响。最后将 EMD 及小波分解与重构的去噪方法与 EEMD 去噪法从定性定量角度进行对比实验研究,分析了 EEMD 方法的有效性和优越性。

1 EEMD 算法原理及分解步骤

1.1 EEMD 原理

EEMD 是以 EMD 分解为基础,为了解决 EMD 分解过程中产生的模态混叠问题而产生的一种新的噪声辅助数据分析方法,它拥有 EMD 的优点,且具有更强大的抗模态混叠能力。EEMD 算法的实质是在原始信号上添加高斯白噪声,进行多次 EMD 分解,利用不相关随机序列统计均值为 0 的原理,取固有模态分量(intrinsic mode function, IMF)的均值作为最终结果^[12]。其分解步骤如下:

第一步:首先选取原始数据信号 $x(t)$, 加入高斯白噪声 $h_i(t)$ 得到待处理的信号 $x_i(t)$ 。公式表示为

$$x_i(t) = x(t) + h_i(t) \quad (1)$$

第二步:对待处理的信号 $x_i(t)$ 进行 EMD 方法分解,得到 IMF 分量 $M_{ij}(t)$, 其中 $M_{ij}(t)$ 为经过加入 i 次高斯白噪声后, EMD 分解所得到的第 j 个 IMF 的分量。

第三步:重复第一步和第二步 N 次,即每次都加入不同的高斯白噪声。

第四步:经过第三步后可以得到多个 IMF, 然后对多个 IMF 的每一个进行平均得到一个新的 IMF, 此时的 IMF 表示为 $M_j(t)$ 。公式表示:

$$M_j(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N M_{ij}(t) \quad (2)$$

其中 $M_j(t)$ 为第 j 个 IMF 分量,并筛选相应的 $M_j(t)$ 组成 IMF 数据组。其流程图如图 1 所示。

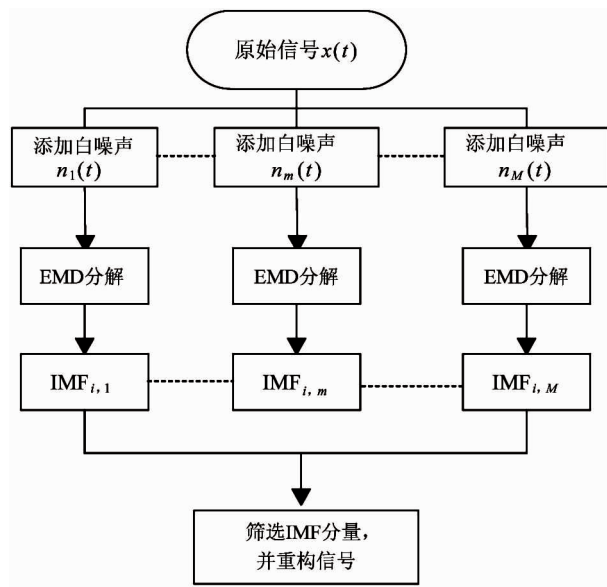


图1 EEMD 流程图

1.2 信号仿真及分析

为了验证 EEMD 算法去噪的有效性,使用 Matlab 软件进行如下简单信号的去噪实验,原始信号如下: $x(t) = 5\sin(\frac{1}{20}\pi t) + 4\sin(\frac{1}{10}\pi t) + 3\sin(\frac{1}{30}\pi t)$, 利用 Matlab 中 wgn 函数产生 5 dBW 噪声强度的高斯白噪声,加入到原始信号中得到含噪声的待分解信号 $y(t)$ 。设定 EEMD 分解时的参数如下:总体平均次数为 100,加入的高斯白噪声的幅值为待分解信号 $y(t)$ 标准差的 0.2 倍,然后得到 10 个 IMF 分量,通过函数 corrcoef 得到各个分量和信号 $y(t)$ 之间的相关系数分别是 1.000、0.2538、0.3594、0.6008、0.7615、0.3583、0.0548、0.0429、0.0286、0.0389,选择相关系数大于 0.5 的 IMF 分量,由于 IMF1 为原始信号,并且由图 2 箱线图可以看出,IMF2、IMF3、IMF6、IMF9 的上限和下限即非异

常范围太小,IMF7、IMF8、IMF10 的异常值太多,因此选择分量 IMF4 和 IMF5 进行重构,由图 3 可知 $y(t)$ 经 EEMD 去噪后效果明显。

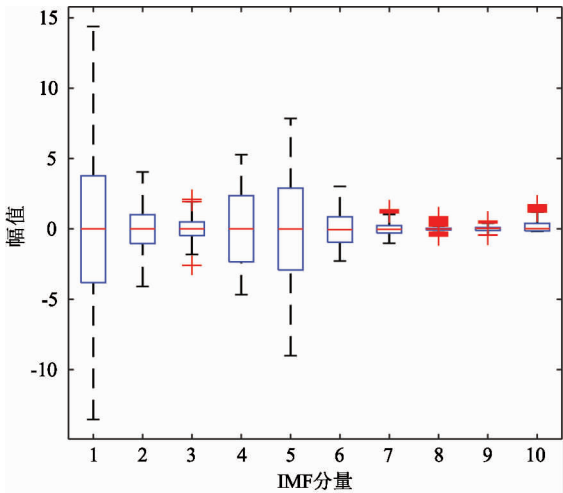


图 2 各分量箱线图

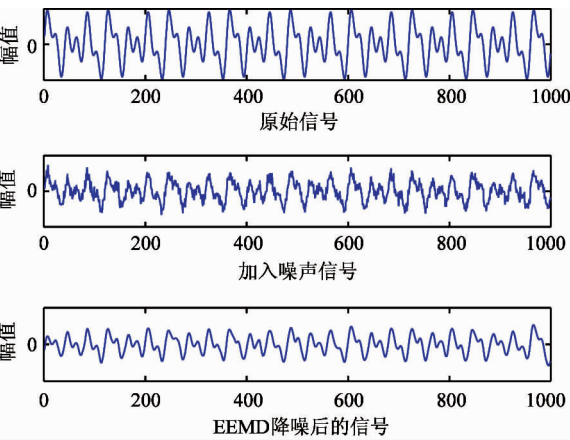


图 3 信号 $y(t)$ 经 EEMD 去噪前后对比

2 实验与结果分析

2.1 样品配置

称取从药店购买的白术 0.6 克,放入 250 ml 烧杯中,加入 100 ml 蒸馏水浸泡 30 min,用武火煮沸,再用文火熬煮 35 min,冷却至室温,过滤至 100 ml 容量瓶,加蒸馏水稀释,得到 6 mg/ml 的白术溶液。

2.2 实验过程

使用英国 Edinburgh Instruments 公司生产的 FS920 号稳态荧光光谱仪测量 6 mg/ml 白术溶液的荧光光谱。测量时为保证光源的使用寿命,需将仪

器冷却降温至 $-19\text{ }^{\circ}\text{C}$ 后再进行测量。测量前需设置荧光光谱仪的测量参数,设置积分时间 0.1 s,激发波长 EX 扫描范围 220 ~ 550 nm,发射波长 EM 扫描范围为 240 ~ 570 nm。为尽量避免瑞利散射的干扰,设置发射扫描波长起点始终滞后激发波长 20 nm,激发与发射步长均为 10 nm。测量得到图 4 白术溶液三维荧光光谱图,以及图 5 白术溶液等高线图。

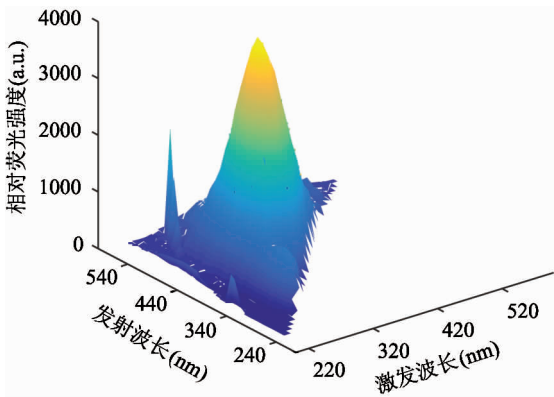


图 4 白术溶液三维荧光光谱图

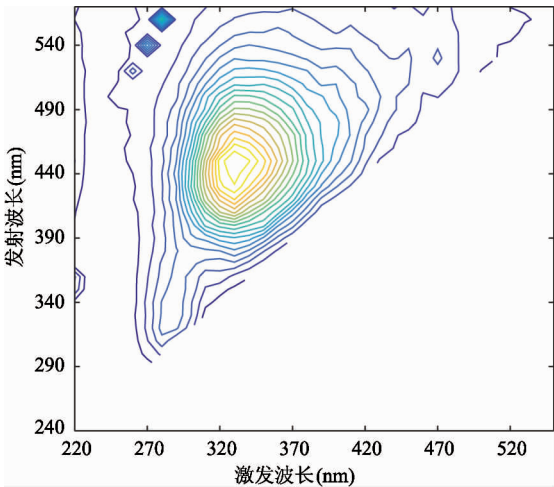


图 5 白术溶液等高线图

2.3 基于 EEMD 的数据处理及结果分析

由图 4 白术溶液的三维荧光光谱图可以看出,在激发波长 300 至 500 nm 处有一个主峰,在主峰附近有很强的噪声,由图 5 等高线图可以看出最佳激发波长 330 nm、荧光峰值波长 440 nm 处为等高线的中心即主峰,在 $\text{EX} = 260 \sim 280\text{ nm}$, $\text{EM} = 520 \sim 560\text{ nm}$ 范围内,有 3 处二级瑞利散射噪声。

以白术溶液的三维荧光光谱数据在激发波长 $EX = 260\text{ nm}$ 处为例,当总体平均次数为 100,加入的高斯白噪声的幅值为原始信号标准差的 0.2 倍, EEMD 分解后得到 6 个 IMF 分量,如图 6 所示。通过 `corrcoef` 函数得到 6 个分量的相关系数,分别为 1.000、0.3855、0.3294、0.2290、0.10001、0.6240,用相关系数和箱线图对分解后的 IMF 分量进行评估,选择相关系数大于 0.5 的 IMF 分量。由于 IMF1 为原始信号,且由图 7 箱线图可知,IMF2 和 IMF3 的异常值太多,IMF4 上限和下限即非异常范围太小,因此,只选择分量 IMF6,进而得到图 8 所示的重构后信号的等高线图,由图可以明显看到 260 nm 处的噪声已消除,因此,在主观上可以看出该分解算法可以有效地消除三维荧光光谱中的噪声。

为了研究不同参数时 EEMD 的降噪效果,所以假设总体平均次数为100,加入的高斯白噪声的幅

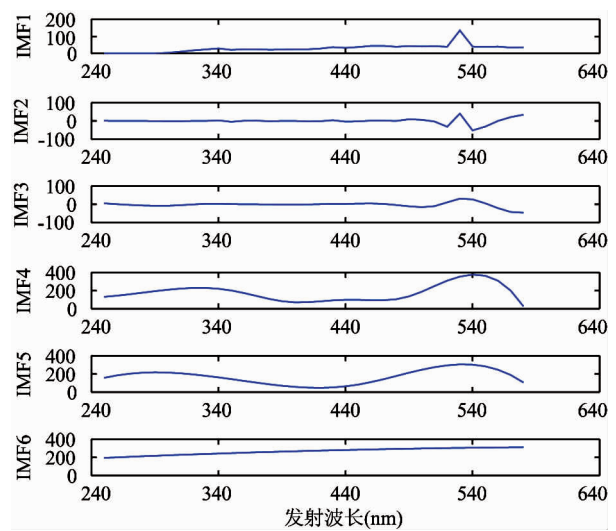


图 6 IMF 分量图

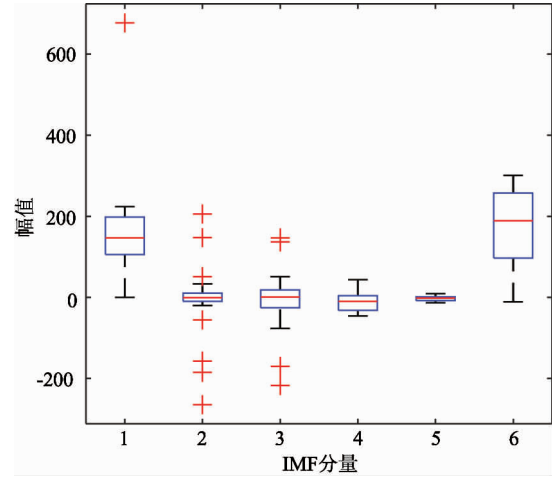


图 7 IMF 分量的箱线图

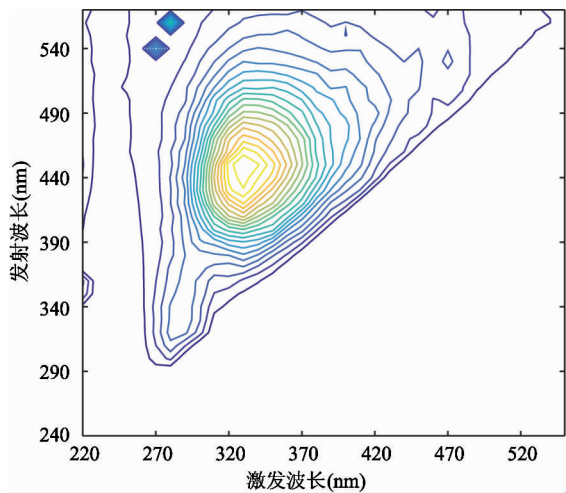


图 8 在 $EX = 260\text{ nm}$ 处 EEMD 降噪后的等高线图

值分别为原始信号标准差的 0.1 倍、0.2 倍、0.3 倍,用 d 表示,分别采用当相关系数大于 0.3、0.5 时筛选 IMF 分量,相关系数用 R 表示。用信噪比和均方误差评价去噪效果,分别用 SNR 和 $RMSE$ 表示。得到表 1 所示的不同相关系数去噪效果对比表。

表 1 不同相关系数去噪效果对比表

d	0.1		0.2		0.3	
R	0.3	0.5	0.3	0.5	0.3	0.5
$SNR(\text{dB})$	16.9340	17.2136	17.0177	17.2734	17.0050	17.2623
$RMSE$	116.2978	112.7162	115.1796	111.9433	115.3444	112.0920

由表 1 可以看出,当 d 为 0.2, R 为 0.5 时信噪比最高,均方误差最低,去噪效果最好。因此,设定

总体平均次数为 100,加入的高斯白噪声的幅值分别为原始信号标准差的 0.2 倍,采用相关系数大于

0.5 时筛选 IMF 分量重构信号,将其余两处噪声进行 EEMD 分解,得到消除噪声后的三维荧光光谱图和指纹图如图 9 和图 10 所示,可以看到 EX = 260 ~ 280 nm 处的噪声均已消除。

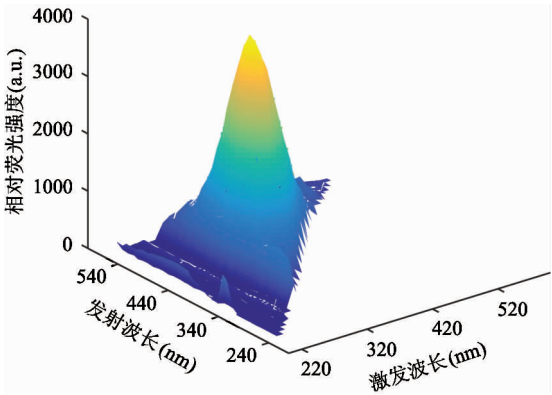


图 9 EEMD 消噪后白术溶液的三维光谱图

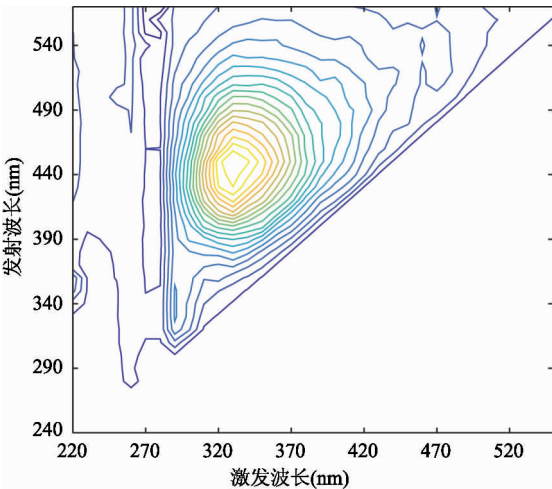


图 10 EEMD 消噪后白术溶液的等高线图

2.4 基于 EMD 及小波分解与重构的数据处理及结果分析

为了进一步验证 EEMD 方法对中药溶液三维荧光光谱数据去噪的优越性,将 EEMD 方法与 EMD 及小波去噪方法进行对比分析,分别得到消除噪声后的三维荧光光谱和等高线光谱图,如图 11 ~ 图 14 所示。

与 EEMD 消噪后的白术溶液三维荧光光谱图(图 9)和等高线图(图 10)比较可以看出,EMD 降噪后在激发波长 260 nm 至 280 nm 处的噪声仍然存在

在,只是降低了散射峰的荧光强度。小波降噪后,在激发波长 260 nm 处的噪声仍未消除,仅仅消除了激发波长 270 nm 至 280 nm 处的噪声,荧光强度有所降低。为了进一步比较 EEMD 方法与 EMD 及小

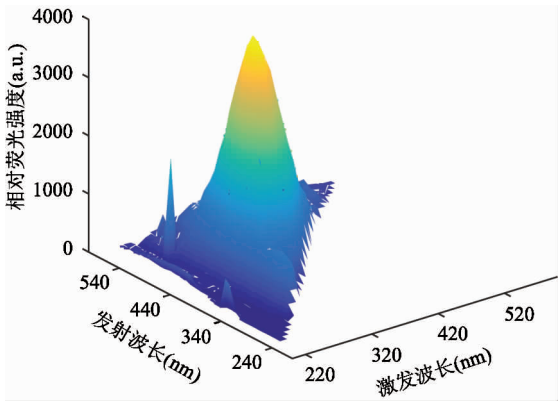


图 11 EMD 消噪后白术溶液的三维荧光光谱图

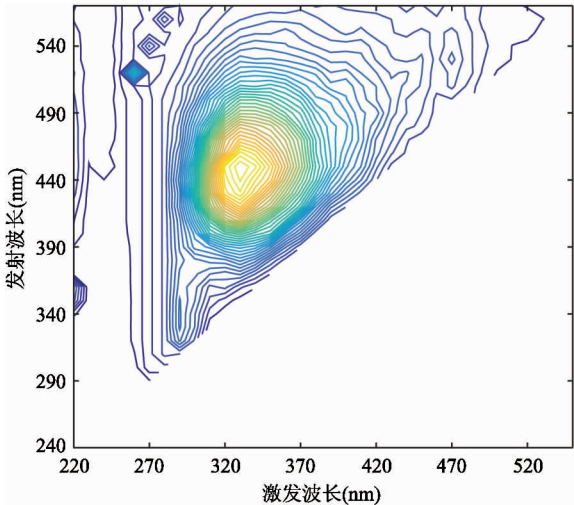


图 12 EMD 消噪后白术溶液的等高线图

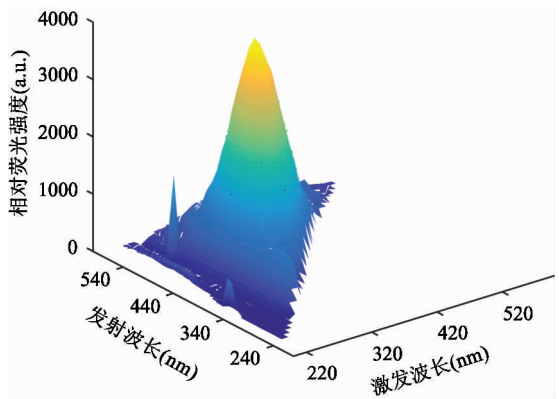


图 13 小波消噪后白术溶液的三维荧光光谱图

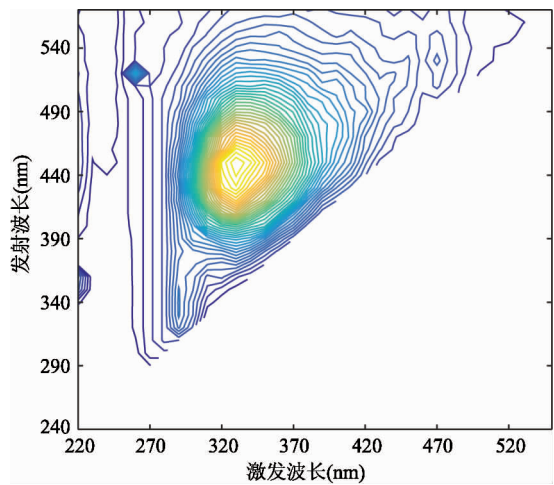


图 14 小波消噪后白术溶液的等高线图

波方法的去噪效果,以信噪比和均方误差作为评价指标进行去噪效果对比研究,结果如表 2 所示。由表 2 中 3 种方法去噪效果评价指标可以看出,EE-MD 去噪方法优于 EMD 及小波去噪方法。

表 2 3 种方法去噪效果评价指标

去噪方法\评价指标	SNR(dB)	RMSE
小波分解与重构	15.772	130.732
EMD	12.512	160.918
EEMD	17.273	111.943

3 结 论

中药现代化是目前国内外医药界研究的一大热点,中药指纹图谱技术是实现中药现代化的有力工具,是解决中药质量评价和分类鉴别的有效技术手段。但光谱测量中存在的噪声直接影响中药质量评价及模式识别的效果,本文以荧光光谱分析技术为基础,得到白术溶液的三维荧光光谱图和等高线图,以 EEMD 算法对该荧光光谱图进行去噪处理,并对去噪结果进行主观视觉上的比较、分析。结果表明,当参数为 $d=0.2$, $R=0.5$, 总体平均次数为 100 时筛选 IMF 分量,可以很好地去掉白术溶液荧光光谱噪声。另外,将 EEMD 去噪法与 EMD 及小波去噪法进行对比实验,从可视化角度进行了定性比较,同

时以信噪比和均方误差值作为去噪效果评价指标进行了定量比较,定性定量对比结果均表明 EEMD 去噪方法的优越性。

参考文献

[1] 崔建新,崔建风,洪文学,等. 基于多参数距离融合聚类原理建立中药标准指纹图谱的研究[J]. 高技术通讯, 2014,24(1):99-103

[2] 王继国,雍克岚,陈旭,等. 基于中药血竭光谱指纹图谱的模式识别研究[J]. 计算机与应用化学,2005,22(5): 384-388

[3] 朱纯,谢心,赵金辰,等. 六味地黄丸三维同步荧光光谱特性的研究[J]. 光谱学与光谱分析,2017,37(1): 141-144

[4] 李兴旺,陈小康,徐永群. 中药注射剂荧光光谱三维聚类图分析研究[J]. 光谱实验室,2007,24(6):1111-1114

[5] 闫立华,宋峰,韩娟,等. 玄参汤剂的荧光光谱分析[J]. 光谱学与光谱分析, 2008,28(8):1891-1894

[6] 杜建卫. 基于小波变换的中药光谱图谱与色谱图谱分类特性研究[J]. 北京石油化工学院学报,2016,24(1): 59-63

[7] 于邵慧. 荧光光谱信号的去噪算法研究[J]. 合肥师范学院学报,2013,31(3):4-6

[8] 文莉,刘正士,葛运建. 小波去噪的几种方法[J]. 合肥工业大学学报(自然科学版), 2002,25(2):167-172

[9] 李慧,蔺启忠,王钦军,等. 基于小波包变换和数学形态学结合的光谱去噪方法研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2010,30(3):644-648

[10] 郝欢,王华力,魏勤. 经验模态分解理论及其应用[J]. 高技术通讯,2016,26(01):67-80

[11] Wu Z H, Huang N E. Ensemble empirical mode decomposition: a noise assisted data analysis method[J]. *Advances in Adaptive Data Analysis*,2009,1(1):1-41

[12] 赵肖宇,方一鸣,王志刚,等. EEMD 自适应去噪在拉曼光谱中的应用[J]. 光谱学与光谱分析,2013,33(12): 3255-3258

Research on denoising method of three dimensional fluorescence spectrum of traditional Chinese medicine based on EEMD

Fan Fengjie^{*}, Xuan Fenglai^{*}, Bai Yang^{*}, Gao Rushuai^{**}

(^{*} Department of Biomedical Engineering, College of Electrical Engineering,
Yanshan University, Qinhuangdao 066004)

(^{**} Department of Automation, College of Electrical Engineering, Yanshan University, Qinhuangdao 066004)

Abstract

Based on the denoising principle of ensemble empirical mode decomposition (EEMD), the three-dimensional fluorescence spectrum signal of traditional Chinese medicine solution is denoised. The intrinsic mode function (IMF) is filtered by correlation coefficient and box diagram, and the filtered IMF is reconstructed to get the data after denoising. The influence of the amplitude of Gauss white noise added by EEMD decomposition and the setting correlation coefficient on the denoising effect are also discussed. The results show that when the amplitude of Gauss white noise is 0.2 times that of the original signal standard deviation and the correlation coefficient is greater than 0.5 to screen the IMF component, the EEMD method can effectively eliminate the noise in the three dimensional fluorescence spectrum signal of traditional Chinese medicine *Atractylodes macrocephala*. The method is compared with the method of empirical mode decomposition (EMD) and wavelet denoising. The results show that the denoising effect of EEMD method on the three-dimensional fluorescence spectrum data of traditional Chinese medicine solution is better than that of EMD and wavelet denoising.

Key words: three dimensional fluorescence spectroscopy, empirical mode decomposition (EMD), ensemble empirical mode decomposition (EEMD), wavelet decomposition, spectral denoising, traditional Chinese medicine