

# 基于多分辨率分析的X荧光能谱的 除噪与弱峰检测

邹永祥<sup>1,2</sup> 吴建平<sup>1</sup>

1(成都理工大学核技术与自动化工程学院 成都 650009)

2(宜宾学院 宜宾 644007)

**摘要** 在对X荧光谱噪声的分析基础上,阐述了多分辨率分析的基本思想,并将之应用于X射线能谱定量分析中的噪声的消除,取得了良好的效果。利用噪声和信号小波变换的性质随尺度的加大而显著不同的特点,运用小波多分辨率分析进行信号噪声的消除,可提高弱峰的检测能力,实验结果表明,该降噪的方法不仅计算速度快,而且和其它的方法相比,对低含量元素形成的弱峰的定量分析结果也更加理想。

**关键词** 多分辨率分析, X荧光能谱, 除噪, 弱峰检测

**中图分类号** O657.62, TP391

X射线荧光分析中,须进行X射线能谱分析以获得元素特征X射线的信息,但是,X射线能谱的测量、采集、传输的过程中,不可避免地会受统计涨落及其它干扰,它们叠加于有用信号上,使测量精度降低,能量分辨率下降。有些元素的特征峰很弱,易被强峰的康普顿坪或本底及统计涨落部分掩盖,难以识别检测。因此,在X射线能谱分析中,去除噪声和弱峰分析十分重要。X能谱的除噪,通常是对谱数据进行平滑化处理或傅立叶滤波。但传统方法的不足在于:第一会把谱峰展平,谱的原始特征受到破坏;第二是整个能谱都采用相同的处理方式,对不同性质的能谱影响的程度不一样,不利于后续分析。

多分辨率分析,是把信号在一系列不同层次的空间上分解的分析方法。它可将各种交织在一起的不同频率组成的混合信号分解成不相同频率的子信号,可在不同分辨率下根据信号和噪声的不同分布去除噪声,多分辨率分析具有灵活的奇异特征提取和时变滤波等功能,能实现有效降噪并检测信号的波形特征。我们根据X能谱特征峰信号与噪声信号的特点,采用多分辨率分析处理方法处理X射线能谱的噪声,取得较好效果。

## 1 X荧光能谱信号分析

### 1.1 X荧光能谱的组成及其影响因素

X荧光能谱中有被测元素的特征X射线,且每个元素都有不同的线系,有的样品(如地质样品)的元素成分众多,谱线多有重叠。X荧光能谱中还有各种噪声信号,主要产生于:1)射线与物质的相互作用,2)探测器测量过程中引入的电子学噪声。

光电效应和散射是X射线与物质相互作用的两种主要方式<sup>[1]</sup>。X光子对原子外层电子的光电效应形成该元素的特征X射线峰。在非相干散射的康普顿效应中,反冲电子会在X能谱的特征峰前形成一个能量从零至最大能量 $E_{\max}$ 的平台状的连续谱。X能谱的形成过程中还伴随着其它的作用过程,也影响了X射线的谱形:(1)散射与反散射峰产生的散射光子被探测器晶体吸收,使康普顿坪区的计数增加。(2)X射线通过多种效应产生次级电子构成的X射线能谱,除特征峰外还有连续谱。(3)X射线与物质相互作用过程随机性造成的统计涨落,使较弱的特征峰落在强的康普顿坪上,有可能全部或部分湮没在康普顿坪及其统计涨落之中,给探测带来困难。

核电子学中最重要电子噪声主要是散粒噪声和热噪声<sup>[2]</sup>,它们都可表示为随机的脉冲序列,其功率谱密度近似为常数(白噪声),在整个频率范围内都均匀分布,在幅度域内服从高斯分布。

四川省应用基础项目(2006J13-018)资助

第一作者:邹永祥,男,1973年出生,1997年毕业于四川师范大学,现成都理工大学硕士研究生,研究方向信号采集与处理,宜宾学院讲师

收稿日期:2007-12-28,修回日期:2008-03-10

## 1.2 X 能谱的构成及频域特性

为了解 X 荧光谱的特征谱和噪声的频谱分布, 我们采用傅立叶变换研究其频域特性<sup>[3]</sup>。根据频域采样定理选取的采样区间为  $[-\pi, \pi]$ , 将频率归一化到  $[-0.5, 0.5]$  范围内, 如图 1。

图 1 的 X 谱由 4 种成分组成: (1) 变化频率最低的连续谱, 主要有低频本底、部分特征峰和少量统计涨落频率, 构成频带集中在  $[-\pi/50, \pi/50]$  内; (2)

谱线谱峰占数道至数十道, 之间并非相互独立, 频率范围 1 弧度/道以下, 属于低频信号。特征是跨距小、变化频率高且对称; 谱线中特征峰的频带主要在  $[-\pi/5, \pi/5]$  区间; (3) 由计数过程中产生的逐道统计起伏, 频率也较高。在  $[-\pi, \pi/5]$  和  $[\pi/5, \pi]$  区间内主要是本底统计涨落和很少特征峰的频率成分叠加; (4) 核电子学噪声为每道独立分布的独立事件, 相关长度是一道, 频率范围扩大到  $\pi$  弧度/道, 属于高频信号。

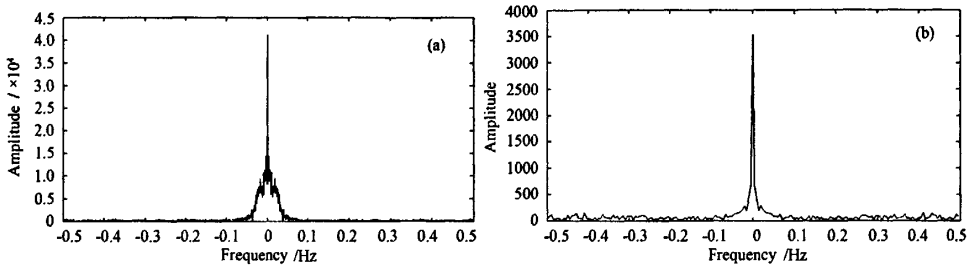


图 1 原始 X 荧光谱(a)和噪声(b)的频谱图  
Fig.1 Original X-ray (a) and noise (b) spectra

上述 X 能谱包含尖峰或突变部分, 且噪声也不完全是平稳的白噪声。可认为 X 能谱是低频的真信号与高频的噪声之和, 因而谱线和噪声具有不同的频率特征。

## 1.3 X 荧光能谱中弱峰的特点

特征 X 射线峰的强弱由样品的元素含量决定, 低含量元素的峰较弱, 有可能被噪声掩盖, 须研究弱峰的检测与分离, 先对能谱降噪, 再提取弱峰。

传统的谱平滑处理可消除部分统计涨落, 但其增加了峰位下本底的计数, 损失了峰信号的部分信息, 使信噪比降低、统计误差增大、判断限增高, 使原本比较弱的峰变得更弱, 降低了检测弱峰的能力。

这里采用峰本比  $C$  来表征在强本底时探测弱峰的能力。其定义为特征峰内净计数(通常称为峰面积)  $N$  与峰下本底数(即峰内总计数与净计数之差)  $B$  的比值:

$$C = \frac{N}{B}$$

峰本比的大小反映了峰强度的大小, 峰本比越大说明越容易区分峰与本底, 检测弱峰的能力越强。

## 2 多分辨率分析理论

### 2.1 基本思想

多分辨率分析是在不同尺度、不同分辨率下由粗到精的逐级分析方法。其中, 时域尺度由大到小变化时, 对应的频域尺度由小到大变化, 由低通滤波器可得到大尺度信息, 即低频信息——信号轮廓信息, 由高通滤波器可得到小尺度信息, 即高频信息——噪声及突变信息。它将被分析的信号分解为不同频率范围内的信号分量, 能有效地应用于信噪分离。

多分辨率分析是在  $L^2(R)$  函数空间内, 将函数  $f(t)$  描述为一系列的近似函数的极限。每一个近似都是  $f(t)$  的平滑版本, 具有越来越精细的近似函数。这些近似函数系在不同尺度上得到。设  $\{V_J\}$  是给定的多分辨率分析 ( $J$  为对应尺度),  $\Psi(t)$  和  $\Phi(t)$  分别是相应的小波函数和尺度函数。设输入一维信号  $f(t)$ , 由于物理分辨率有限, 可设  $f(t) \in V_J$ , ( $J$  为分解的起始级尺度, 通常为 0), 则:

$$f(t) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} c_{J,k} \phi_{J,k}(t) \quad (1)$$

式中,  $\{c_{J,k}\}_{k \in \mathbb{Z}}$  具有有限长度  $N_J$  ( $k$  为对应位移), 利用 Mallat 算法<sup>[4]</sup>, 可将信号分解成不同的通道成分:

$$f(t) = C_{J-M} f(t) + \sum_{j=J-M}^{J-1} D_j f(t) \quad (2)$$

式(2)表明  $f(t)$  系不同分辨层上的函数叠加而成, 第一部分是其低频部分, 第二部分是其高频部分, 其中:

$$\begin{cases} C_j = HC_{j+1} \\ D_j = GD_{j+1} \end{cases} \dots\dots\dots (j = J-1, J-2, \dots J-M) \quad (3)$$

式(3)的 Mallat 分解算法如下:

$$\begin{array}{c} C_J \rightarrow C_{J-1} \rightarrow C_{J-2} \rightarrow \dots\dots\dots \rightarrow C_{J-M} \\ \searrow D_{J-1} \searrow D_{J-2} \searrow \dots\dots\dots \searrow D_{J-M} \end{array} \quad (4)$$

上面给出了将  $f(t)$  分解到不同分辨层并分析处理的过程。 $\{C_j\}$  和  $\{D_j\} (J-M \leq j \leq J-1)$  为对应尺度的低频系数和高频系数,  $C_{J-M}$  是  $J-M$  尺度的低频系数( $J-M$  为分解的顶级尺度), (3)式中  $H$  的作用相当于一个低通滤波器,  $G$  相当于一个高通滤波器。故基于小波的多分辨率分析是将信号  $f(t)$  分解成频率小于  $2^{-J+M}$  成分  $G_{J-M} f(t)$  和频率介于  $2^{-J}$  与  $2^{-(J+1)}$  之间的成分  $D_j f(t) (J-M \leq j \leq J-1)$ 。噪声和有效信号在进行小波分解后, 低频系数  $\{C_{J-M}\}$  和高频系数  $\{D_j\} (J-M \leq j \leq J-1)$  有不同的变换规律, 因此, 将有噪信号在某一尺度下分解到不同的频带内, 通过置零高频系数和低频系数去掉噪声。这时形成了新的低频系数  $\{\tilde{C}_{J-M}\}$  和高频系数  $\{\tilde{D}_j\} (J-M \leq j \leq J-1)$ , 重构  $f(t)$  在  $V_J$  的表示。再按 Mallat 重构算法得用矩阵 (或算子) 表示式:

$$\begin{aligned} \tilde{C}_{j+1} &= H^* \tilde{C}_j + G^* \tilde{D}_j \dots\dots\dots \\ (j &= J-M, J-M+1, \dots J) \end{aligned} \quad (5)$$

式中,  $H^*$ ,  $G^*$  分别为  $H$  和  $G$  的共轭转置矩阵 (也称共轭算子)。Mallat 重构算法(5)可用式(6)表示:

$$\begin{array}{c} C_{J-M} \rightarrow C_{J-M+1} \rightarrow \dots\dots\dots \rightarrow C_{J-1} \rightarrow C_J \\ D_{J-M} \nearrow D_{J-M+1} \nearrow \dots\dots\dots \nearrow D_{J-1} \nearrow \end{array} \quad (6)$$

式中,  $H^*$  和  $G^*$  分别为重构的低通和高通滤波器。这样就得到去噪后的信号为:

$$\tilde{f}(t) = \sum_{k \in Z} \tilde{C}_{J,k} \phi_{J,k}(t) \quad (7)$$

对原始信号作越来越粗的逼近时, 丢掉的是一些频率较高的细节成分, 也即每次“剥”去的是信号中频率较高的噪声信号成分。一系列逼近过程是一系列剥去高频信号分量的过程。在 X 射线能谱中<sup>[5]</sup>, 真正谱线的频率特征是跨距大、频率低。因此, 如对 X 射线能谱进行多分辨率分析, 实际上就是一个不断对谱峰进行剥离的过程, 当分解到一定尺度水平时, 剩下的就是一些频率较低的元素特征谱信号分量。在多分辨率分析中, 直接抽取一些尺度水平较高的也就是对应频率较低的信号分量来重构, 直接获得真正的谱线。

## 2.2 运用多分辨率分析除噪的具体实现

由上文, 多分辨率分析去噪声的原理基于信号和噪声的小波变换特性的不同<sup>[6]</sup>。一个含噪信号的小波变换, 由原始信号的小波变换和噪声的小波变换相加组成。其中, 原始信号通常表现为低频信号或一些比较平稳的信号, 而噪声信号则通常表现为高频信号。X 射线能谱中含噪部分主要包含在高频小波系数中, 可应用门限阈值等形式处理小波高频系数, 再重构信号达到消噪目的。

消噪步骤为: (1)按谱数据的特点选择一个小波基函数并确定一个小波分解的层次  $N$ , 然后对信号  $S$  进行  $N$  层小波分解。(2)小波分解高频系数的阈值量化。对第 1 层到第  $N$  层的每一层高频系数, 选择一个阈值进行软阈值量化处理。(3)由小波分解的第  $N$  层的低频系数和经量化处理后的第 1 层到第  $N$  层的高频系数进行信号小波重构。

处理中小波基函数的选择直接影响多分辨率分析结果, 在去噪声中, 小波基的选择要使得特征峰在小波基上的分解系数尽可能大, 而其它信号的分解系数要小, 同时为使处理后所获得的 X 射线能谱曲线不失真, 还要考虑对称性、紧支撑与支撑宽度、正交性等因素。Daubenchies<sup>[7]</sup>小波具有这些特点, 可满足实际处理要求。因此在数据处理中选用 Daubenchies 小波系中的 db4 小波。

寻求一个尺度既能保留峰信号又能有效减少噪声的影响。通过前面对 X 谱的频域特性分析, 特征峰的频带主要集中在  $[-\pi/5, \pi/5]$ , 有少部分在这个频带之外与噪声重叠。而 X 能谱的频谱经过两层分解之后频带包含了这个区间, 这符合提取特征峰的要求。对于特征峰在这个频带之外的信息我们可以通过对高频系数设定门限阈值的方法予以提取。因此本工作中选取两尺度分解, 即两层多分辨率分析。

以上处理步骤, 关键是如何选取阈值和如何进行阈值的量化处理, 这直接关系到信号的消噪质量。

选取原则尽可能在有效的消除噪声影响的情况下又不丢失特征峰信息。在 MATLAB 中用来消噪函数提供了 4 种阈值选自方案, 其中 heursure 阈值<sup>[6]</sup>是最优预测变量阈值选择, 是自适应阈值和固定阈值的综合, 用 heursure 阈值进行小波系数阈值量化, 既能将高频噪声消除, 又可将被高频噪声淹没的微弱信号提取出来。

### 3 实验与结果分析

X 荧光谱由离散的点组成, 在数学上把它们作为连续函数来处理。从峰型上看, 它们可分为强峰、弱峰和由统计涨落造成的锯齿状峰等。实验谱数据

不是时域, 而是能域(或道域)。实验采用多道能量色散 X 荧光分析仪, 有关参数为: 工作距离 20 mm; X 射线管管流 26.9  $\mu\text{A}$ ; X 射线管管压 7.59 kV。

#### 3.1 谱数据处理

用 X 荧光分析仪测量一赤铁矿样品, 图 2a 是原始能谱, 其能进行能谱定性定量分析的元素有: Ti、Al、Mn、Fe、Ca、Mn 及少量的 Ga、Co 等。对该能谱用五点平滑法、傅立叶低通滤波法或多分辨率分析法全谱处理, 结果分别见图 2b、图 2c、图 2d。

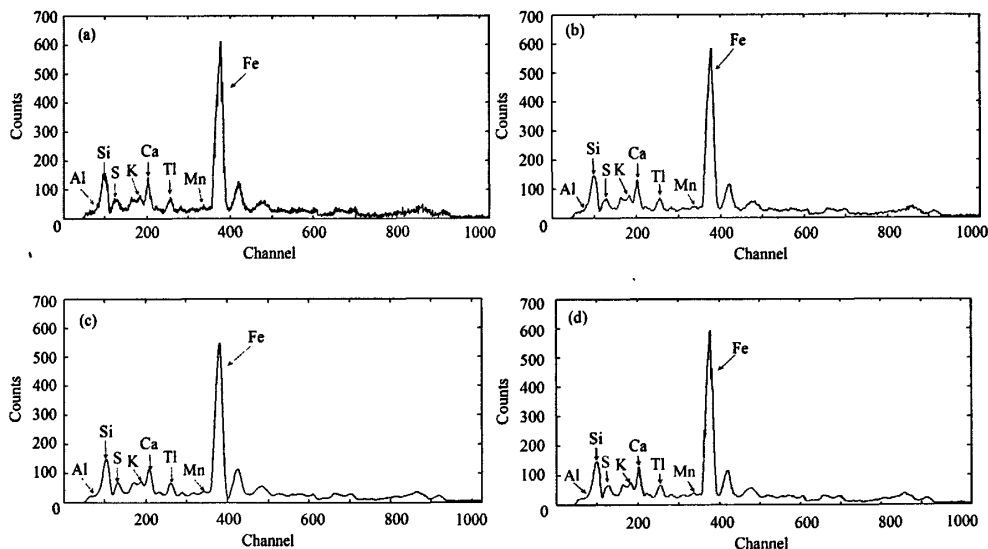


图 2 用 X 光管激发的铝矿样的 X 射线能谱

a) 原始能谱, b) 经 5 点平滑处理后, c) 经傅立叶低通滤波处理, d) 经多分辨率分析处理

Fig.2 X-ray spectra of a Al mineral sample excited with an X-ray tube, a) the collected spectra, b) after data smoothing (five points), c) after FFT low-pass filtering, d) after multi-resolution analysis treatment

#### 3.2 结果及讨论

图 2 表明, 各去噪声方法的效果不一样, 小波多分辨率分析去噪声处理后的 X 射线能谱中的小峰比较明显, 更有利于定性识别谱峰。处理前后的信噪比、平均峰面积、本底计数和峰位计数的计算结果列于表 1。

比较处理前后的谱形, 可看出: (1) 三种方法均可减小噪声, 但多分辨率分析处理的效果较显著。(2) 处理后峰位计数均比处理前减少, 傅立叶滤波的处理损失最大, 多分辨率分析处理后损失最少。(3) 多分

辨分析处理前后峰位并未偏移, 且弱峰较为突出。

由表 1, (1)多分辨率分析处理后峰面积比处理前增加。而五点一次平滑和傅立叶滤波处理后峰面积均较处理前减小, 说明用这两种方法处理丢失了峰的信息。(2)三种方法处理后的本底谱数据有所减少, 说明多分辨率分析处理和另外两种方法均能起到减少统计涨落影响的作用。(3)经过多分辨率分析处理后, 较其它两种方法更能保持特征峰的原有信息, 不但提高了谱的信噪比, 减小了峰计数的统计误差, 还明显地提高了峰本比, 增强了弱峰检测的能力。

表 1 铁地质矿样的 Fe 峰定量分析结果  
Table 1 Quantitative analysis of X-ray spectra from the Fe mineral samples before and after different treatments

|                | 处理前能谱<br>The collected data | 5 点平滑处理<br>5-point smoothing | 低通滤波处理<br>FFT low-pass filtering | 多分辨率分析处理<br>Multi-resolution analysis |
|----------------|-----------------------------|------------------------------|----------------------------------|---------------------------------------|
| 信噪比 SNR        | 8.156                       | 8.049                        | 8.229                            | 8.898                                 |
| 峰面积 Peak area  | 11469.4                     | 11963.8                      | 11213.5                          | 12047.9                               |
| 本底 Background  | 1537.5                      | 1509.1                       | 1336.4                           | 1357.025                              |
| 峰高 Peak counts | 611.7                       | 583.6                        | 547.8                            | 587.7                                 |
| 峰本比 Peak ratio | 7.46                        | 7.92                         | 8.391                            | 8.878                                 |

4 结束语

上述结果表明, 五点一次平滑、傅立叶滤波、多分辨分析中的自适应阈值方法均可消除谱中的噪声。但平滑处理和傅立叶滤波处理后, 其信噪比均降低, 因为传统的傅立叶变换对非平稳的噪声消除无能为力, 不能将有用信号的高频部分和由噪声引起的高频干扰加以有效区分。而经过多分辨分析处理之后提高了信号的信噪比, 比前两种的效果要明显, 很好的保持了特征峰的信息成分。由于多分辨分析能同时在时域和频域中对信号进行分析, 有自动变焦的功能, 所以它能在不同的分解层上有效地区分信号中的噪声, 从而较好的实现信号消噪。

参考文献

1 章晔. X 射线荧光探矿技术. 第 1 版. 北京: 地质出版社, 1984. 17-36

2 王经瑾. 核电子学. 第 1 版. 北京: 原子能出版社, 1983. 73-88

3 Hampton C V, Lian B. Nucl Instrum Methods in Phys Res, 1994, A353: 280-284

4 Mallat S. IEEE Trans, 1989, PAMI-11(7): 674-693

5 Bury F, Ennodeb N, Petit J M, *et al.* Nucl Instrum Meth-ods in Phys Res, 1996, A383: 527-588

6 胡昌华, 张军波, 夏军, 等. 基于 MATLAB 的系统分析与设计——小波分析. 西安: 西安电子科技大学出版社, 1999. 217-225

7 Daubechies I. IEEE Trans, 1990, IT-36(5): 961-1005

ZHANG Ye. X-ray fluorescence Prospecting Technology. 1st ed. Beijing: Geological Press. 1984. 17-36

WANG Jingjin. Nuclear Electronics. 1st ed. Beijing: Atomic Energy Press, 1983. 73-88

HU Changhua, ZHANG Junbo, XIA Jun, *et al.* Based on MATLAB System Analysis and Design——Wavelet Analysis. Xi'an: Xi'an University of Electronic Science and Technology, 1999. 217-225

Multi-resolution analysis for noise reduction and weak peak detection  
in X-ray fluorescence spectra

ZOU Yongxiang<sup>1,2</sup> WU Jianping<sup>1</sup>

1 (The College of Nuclear Technology and Automation Engineering, Chengdu University of Technology, Chengdu 650009, China)

2 (Yibin University, Yibin 644007, China)

**Abstract** Based on analysis of X-ray spectra noise, basic theories of multi-resolution analysis are introduced, and applied to denoise for X-ray fluorecence (XRF) spectra. The maxima of the noise and signal wavelet transform increase with the signal amplitude, hence significant difference, and the multi-resolution analysis is better than other treatments in noise reduction, as was conf. Experiments show that the method computes rapidly, with desirable results in determination of low content elements.

**Key words** Multiresolution analysis, Energy dispersive X-ray spectra, Noise elimination, Weak peak detection

CLC O657.62, TP 391