

DOI:10.3969/j.issn.1000-1298.2010.09.037

基于 EMD 的土壤有机质含量近红外光谱检测*

蔡剑华 王先春 胡惟文

(湖南文理学院信息研究所, 常德 415000)

【摘要】 以检测土壤有机质含量为例,探讨经验模态分解在土壤近红外光谱检测中的应用,提出了应用的原理和步骤。用处理后的光谱计算了土壤中的有机质含量,并与九点平滑和小波变换方法的处理结果进行了对比分析。结果表明:与传统的九点平滑处理结果相比, SNR 从3 dB左右提高到10 dB左右,原始信号与消噪信号之间的标准差由2.972降到0.901;预测集的决定系数 r^2 由0.9410提高到0.9803,预测均方根误差 $RMSEP$ 由0.6702降为0.3011。证明了经验模态分解方法在光谱处理过程中的可靠性,提高了土壤有机质含量近红外光谱的定量分析精度。

关键词: 土壤有机质 检测 经验模态分解 近红外光谱 信噪比 去噪

中图分类号: O657.3 文献标识码: A 文章编号: 1000-1298(2010)09-0182-05

Near-infrared Spectrum Detection of Soil Organic Matter Content Based on Empirical Mode Decomposition

Cai Jianhua Wang Xianchun Hu Weiwen

(Information Institute, Hunan University of Arts and Science, Changde 415000, China)

Abstract

Taking detection of soil organic matter content as an example, this paper discussed the application method of empirical mode decomposition (EMD) for processing soil near-infrared (NIR) differential spectrum using empirical mode decomposition. And the principles and steps of processing were proposed. Then the soil organic matter content was calculated based on the de-noised spectrum, and it was compared with the result from the nine-point smoothing method and wavelet method. Experimental results showed that the SNR was improved from 3 dB to 10 dB, and the root mean square error of between raw signal and de-noised signal were reduced to 0.901 from 2.972. The correlation ratio of the prediction set was improved to 0.9803 from 0.9410, and the $RMSEP$ was reduced to 0.3011 from 0.6702. This improved that EMD is effective to get the pretreatment of NIR spectrum, and the EMD method improves the accuracy of near-infrared spectrum detection of soil organic matter content.

Key words Soil organic matter, Detection, Empirical mode decomposition, Near-infrared spectrum, Signal-to-noise, De-noising

引言

为了解决土壤取样化验速度慢、效率低、成本高等问题,国内外许多学者积极开展土壤养分快速检测技术的研究工作,近红外光谱(NIRS)法因其快

速、低成本和多组分同时测定等优点受到人们的重视^[1]。近年来,随着近红外光谱技术不断推广和应用,采用近红外光谱技术预测土壤中的有机质含量已成为国内外学者研究的重点。而在近红外分析中,原始光谱常含有与样品组成无关的信息(如背

收稿日期: 2009-09-25 修回日期: 2009-12-11

* 湖南省“十一五”重点建设学科基金资助项目和湖南文理学院优秀青年项目(YXQN0904)

作者简介: 蔡剑华, 讲师, 主要从事信息处理技术研究, E-mail: cjh1021cjh@163.com

景干扰等), 光谱的一阶微分可以去除部分线性或接近线性的背景和噪声光谱对目标光谱的影响^[2]。但是, 原始光谱经微分后, 噪声增大, 所以更需要有效的消噪处理^[2-7]。本文经验模态分解方法引入到土壤近红外光谱数据处理中, 从多方面探讨经验模态分解 (empirical mode decomposition, 简称 EMD) 在光谱数据处理中的适用性和去除光谱噪声的能力。

1 基本理论

经验模态分解将信号分解为含有不同尺度且满足以下两个条件的一组本征模态函数 (intrinsic mode function, 简称 IMF): ① 对于一系列数据, 极值点和过零点数目必须相等或至多相差一点。② 在任意点, 由局部极大点和极小点构成的两条包络线的平均值为零。每个 IMF 可以被认为信号中固有的一个模态函数, 其分解过程见文献[8]。根据 EMD 分解, 原始数据序列 $x(t)$ 可表示为 IMF 分量和一个残余项之和

$$x(t) = \sum_{i=1}^n C_i(t) + R_n(t) \quad (1)$$

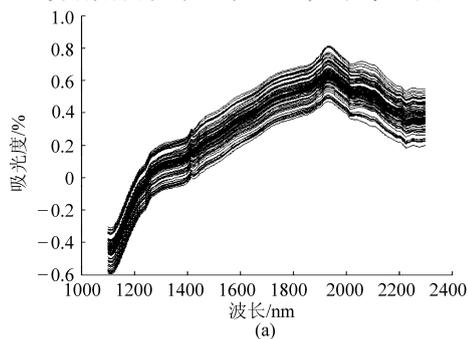
EMD 分解出的 IMF 序列是多通带滤波的结果, 信号经过 EMD 分解后的各阶模态函数能够完全重构, 几乎没有能量损失。这样 EMD 就可用来减少和消除信号中混杂的噪声。当噪声为一个或多个 IMF 分量时, 直接利用时空滤波器进行消噪^[9-11], 如一个包含 n 个 IMF 的低通时空滤波器可表示为

$$x_{lk}(t) = \sum_{i=k}^n C_i(t) + R_n(t) \quad (2)$$

高通时空滤波器为

$$x_{hk}(t) = \sum_{i=1}^k C_i(t) \quad (3)$$

若噪声和信号混叠, 可设置硬 (或软) 门限去噪, 其过程类似小波变换中的方法^[4-5]。给定信号 $x(t)$ 经 EMD 分解后得到 n 个 IMF, 对每一层 IMF



选取一合适的阈值, 并用此阈值对 C_i 进行截断为 \hat{C}_i , 然后再进行 EMD 的重构

$$x(t) = \sum_{i=1}^n \hat{C}_i(t) + R_n(t) \quad (4)$$

根据 Donoho 等的理论^[4,10-11], 去噪中给出的消除噪声的阈值为

$$\tau_i = \sigma_i \sqrt{2 \lg n} \quad (5)$$

$$\sigma_i = MAD_i / 0.6745 \quad (6)$$

式中 σ_i ——第 i 层 IMF 的噪声水平

MAD_i ——第 i 层 IMF 的绝对中值偏差

2 光谱数据采集

使用美国 BRIMROSE 公司产的 Luminar 5030 型便携式 AOTF 技术近红外光谱仪。仪器波长范围为 1 100 ~ 2 300 nm, 2 nm 的波长增量, 扫描次数为 300, 采用 InGaAs 检测器。光谱预处理在 Matlab 软件平台上实现。

以湖南地区土壤有机质含量为研究对象, 样品为土壤粉末样品 80 个, 过 60 目筛。将样品放置于样品盒的槽中, 用盒盖将样品刮平, 连同盒盖一起放置于支架上, 光谱仪的探头卡在样品盒盖的圆孔中, 垂直卡紧, 采用漫反射的测样方式采集光谱。将经验模态分解应用到光谱的预处理中, 以消除微分光谱带来的噪声, 然后再采用偏最小二乘算法建立定量分析模型, 进行土壤有机质含量的测定。

3 土壤微分光谱去噪

80 个土壤样品原始光谱图和其对应的一阶导数光谱如图 1 所示。从图中可以看出, 原始光谱图比较光滑, 噪声很低, 但是背景光谱非常强, 基线漂移较严重, 因此分析偏差大 (图 1a), 光谱预处理中常用一阶微分来扣除原始谱图的背景光谱, 消除基线漂移, 但求导使随机误差也被放大, 微分谱图光滑性较原始光谱差, 使信噪比显著降低 (图 1b)。需要

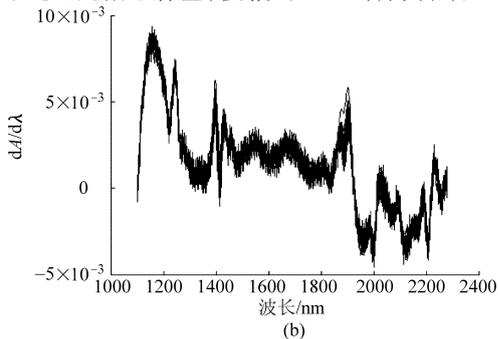


图 1 土壤样品的近红外光谱

Fig. 1 NIR spectrum of soils

(a) 原始光谱 (b) 一阶导数光谱

对一阶导数光谱进行去噪处理。

为了对 EMD 消噪效果进行比较,本文对全光谱进行消噪实验,传统的处理方法是取多点平滑。平滑对去除高频噪声十分有效,但平滑对光谱的谱形产生影响,随着选取平滑点数的增多,谱带的半宽度增加,导致光谱分辨率下降^[1,9]。目前广泛采用小波变换方法对光谱信号进行消噪处理,小波最大的特点是可以区分高频信号成分和噪声成分,在去除大部分噪声的同时对光谱的峰形没有太大影响,但小波变换存在选择母小波的困难^[3-4]。

采用 EMD 方法对 5 号土壤样品一阶导数光谱

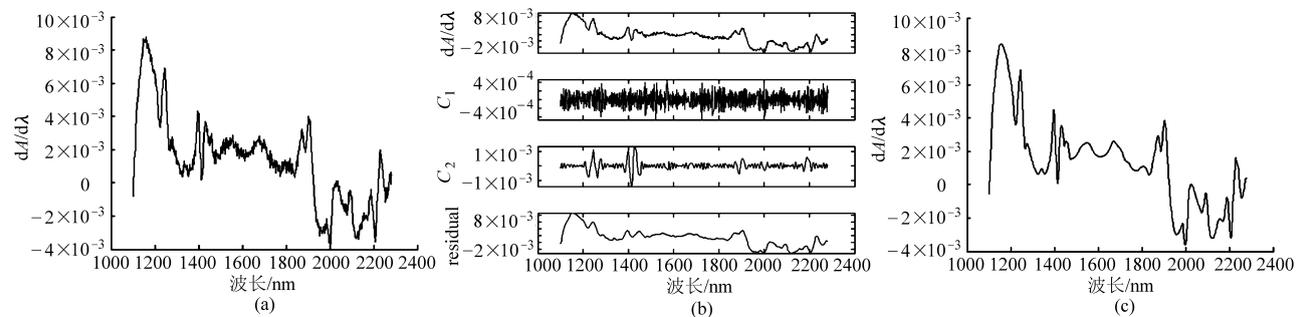


图 2 5 号土壤样品的 EMD 去噪

Fig. 2 EMD de-noising plot of No. 5 soil

(a) 一阶导数光谱 (b) 光谱的 EMD 分解 (c) 去噪后的光谱

采用相同方法对其他 79 个样品的光谱做消噪处理。为作对比,图 3 给出了 80 个土壤样品九点平滑、小波变换(选择“sym5”小波)和 EMD 3 种消噪方法的效果图。从图 3 可以看出,EMD 方法消噪效果最好,噪声几乎完全得到抑制,在去除大部分噪声的同时对光谱的峰形没有太大影响,且反

映原始信号的特征尖峰点得到很好的保留;多点平滑法对峰高的扭曲较峰面积更为严重,且去噪的信噪比较低,采用多点平滑滤波,点数的选择是该法的关键;小波方法消噪效果较好,对峰形也没有太大影响,但母小波的选择对消噪效果影响很大。

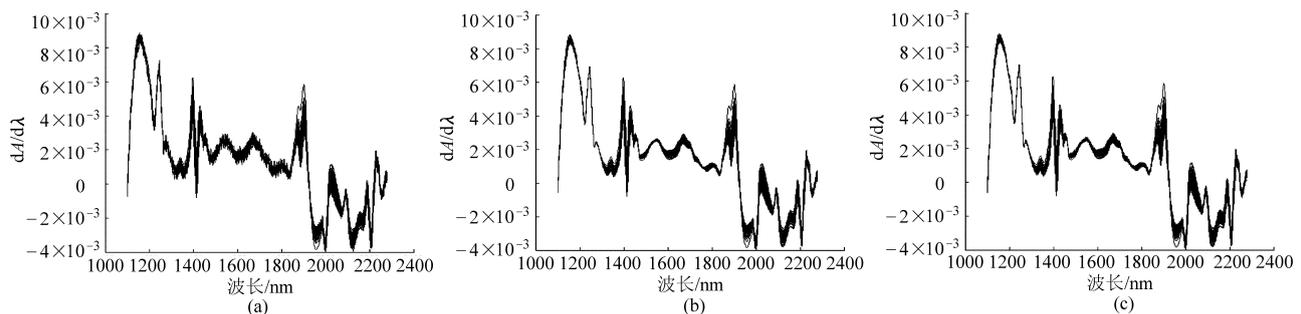


图 3 土壤样品近红外光谱去噪效果对比

Fig. 3 Comparative plot of de-noising methods for NIR spectrum of soil

(a) 九点平滑消噪后的光谱 (b) 小波变换消噪后的光谱 (c) EMD 去噪后的光谱

对于去噪效果的评定,一般采用信噪比作为标准。将一阶导数光谱信号定义为 $x(n)$,消噪后的光谱定义为 $\hat{x}(n)$,则小波消噪后估计信号的信噪比(SNR)为^[2-3]

$$SNR = 20 \lg(\text{norm}(x(n)) / \text{norm}(x(n) - \hat{x}(n))) \quad (7)$$

这里 $\text{norm}(x(n))$ 是 $x(n)$ 的欧几里德长度。原

始信号与消噪信号之间的均方根误差(RMSE)定义为

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum (x(n) - \hat{x}(n))^2} \quad (8)$$

信号的信噪比越高,原始信号与消噪信号的均方根误差越小,则消噪信号就越接近于原始信号,消噪效果越好。表 1 列出了 6 个土壤样品有机质含量

3 种消噪方法的 SNR 和 $RMSE$ 值,从表中可以看到小波和 EMD 两种处理方式分析精度都很高,EMD 方法略高于小波处理,信噪比明显优于传统的九点

平滑法, SNR 从 3 dB 左右提高到 10 dB 左右,原始信号与消噪信号之间的均方根误差由 2.972 降到 0.901,说明消噪效果比较理想。

表 1 3 种消噪方法 SNR 和 $RMSE$ 的对比

Tab.1 Comparison of three de-noising methods for SNR and $RMSE$

样品序号	九点平滑法		小波阈值法		EMD 阈值法	
	SNR	$RMSE$	SNR	$RMSE$	SNR	$RMSE$
1	3.056	2.7903×10^{-3}	9.721	0.827×10^{-3}	9.727	0.819×10^{-3}
2	2.917	2.8127×10^{-3}	9.619	0.895×10^{-3}	9.617	0.895×10^{-3}
3	2.673	3.0198×10^{-3}	9.610	0.917×10^{-3}	9.612	0.915×10^{-3}
4	2.564	3.0821×10^{-3}	9.605	0.936×10^{-3}	9.610	0.928×10^{-3}
5	2.406	3.1168×10^{-3}	9.592	0.943×10^{-3}	9.592	0.942×10^{-3}
6	2.724	3.0114×10^{-3}	9.615	0.906×10^{-3}	9.618	0.904×10^{-3}
平均值	2.723	2.972	9.627	0.904	9.629	0.901
标准差	0.2147	0.1260	0.0428	0.0381	0.0425	0.0380

4 土壤有机质含量检测

将经过预处理后的光谱数据与土壤中的有机质等化学成分的基础数据进行关联,采用偏最小二乘法(PLS1),交叉-验证法(cross-validation),用 The Unscrambler 定量分析软件建立模型。表 2 列出了 3 种预处理方式土壤近红外分析有机质结果与化学值的比较(限于篇幅仅取 11 个样品)。结果表明,

经 EMD 去噪后,光谱分析的准确性明显得到改善,预测集的決定系数 r^2 由原来 0.9410 提高到 0.9803,预测均方根误差 $RMSEP$ 由原来的 0.6702 降为 0.3011,有效地提高了光谱的分析精度和模型的稳健性。与小波去噪的分析精度比较结果表明,两种预处理方式分析精度都很高,EMD 方法略高。可见,EMD 用于土壤近红外光谱处理是有效的,提高了土壤有机质含量检测的精度。

表 2 3 种预处理方法土壤近红外有机质测定结果与化学值的比较

Tab.2 Comparison of three de-noising method for the prediction results of organic compound

样品序号	标准值	九点平滑法		小波阈值法		EMD 阈值法	
		预测值	偏差	预测值	偏差	预测值	偏差
1	2.24	2.62	0.38	2.12	-0.12	2.31	0.07
2	3.13	3.56	0.43	3.37	0.24	3.28	0.15
3	2.44	2.29	-0.15	2.44	0	2.30	-0.14
4	2.76	2.53	-0.23	2.44	-0.32	2.55	-0.21
5	2.49	3.13	0.64	2.01	-0.48	2.68	0.19
6	1.50	0.95	-0.55	1.12	-0.38	1.21	-0.29
7	2.87	2.51	-0.36	3.09	0.22	2.79	-0.08
8	0.97	0.71	-0.26	1.14	0.17	0.97	0
9	3.28	3.70	0.42	3.57	0.29	3.53	0.25
10	3.29	3.55	0.26	3.11	-0.18	3.46	0.17
11	1.13	0.95	-0.18	0.90	-0.23	0.91	-0.22
r^2		0.9410		0.9730		0.9803	
$RMSEP$		0.6702		0.3875		0.3011	

5 结束语

本文将经验模态分解作为光谱预处理方法来消

除一些噪声信号对土壤有机质含量测量的影响。显然,基于 EMD 的土壤近红外光谱预处理方法是有效的,将经验模态分解应用到光谱的预处理中来消除

一阶导数光谱带来的噪声,然后采用偏最小二乘算法建立定量分析模型,测定土壤有机质含量。预测模型的效果明显优于传统的九点平滑处理方法,提

高了模型的预测精度。由此证实,经验模态分解可明显提高土壤有机质含量定量检测的精度,也为近红外光谱预处理提供了新的途径。

参 考 文 献

- 1 李伟,张书慧,张倩,等.近红外光谱法快速测定土壤碱解氮、速效磷和速效钾含量[J].农业工程学报,2007,23(1):55~59.
Li Wei, Zhang Shuhui, Zhang Qian, et al. Rapid prediction of available N, P and K content in soil using near-infrared reflectance spectroscopy[J]. Transactions of the CSAE, 2007, 23(1):55~59. (in Chinese)
- 2 郝勇,陈斌,朱锐.近红外光谱预处理中几种小波消噪方法的分析[J].光谱学与光谱分析,2006,26(10):1838~1842.
Hao Yong, Chen Bin, Zhu Rui. Analysis of several methods for wavelet de-noising used in near infrared spectrum pretreatment[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2006,26(10):1838~1842. (in Chinese)
- 3 李素文,谢品华,李玉金,等.基于小波变换的差分吸收光谱数据处理方法[J].光学学报,2006,26(11):1601~1604.
Li Suwen, Xie Pinhua, Li Yujin, et al. Wavelet transform based differential optical absorption spectroscopy data processing [J]. Acta Optica Sinica, 2006, 26(11): 1601~1604. (in Chinese)
- 4 王强,束炯,尹球.高光谱图像光谱域噪声检测与去除的 DSGF 方法[J].红外与毫米波学报,2006,25(1):29~34.
Wang Qiang, Shu Jiong, Yin Qiu. DSGF method on detecting and removing spectral noise of hyperspectral image[J]. Journal of Infrared Millimeter Waves, 2006,25(1):29~34. (in Chinese)
- 5 张西良,杨伟玲,李萍萍,等.动态称量信号离散小波变换数字滤波处理方法[J].农业机械学报,2008,39(7):197~199.
Zhang Xiliang, Yang Weiling, Li Pingping, et al. Signal processing of dynamic weighing by wavelet transform [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2008, 39(7):197~199. (in Chinese)
- 6 Rong J, Hong Y. Studies of spectral properties of short genes using the wavelet subspace Hilbert - Huang transform (WSHHT)[J]. Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications, 2008, 387(16~17): 4223~4247.
- 7 方勇华,孔超,兰天鸽,等.应用小波变换实现光谱的噪声去除和基线校正[J].光学精密工程,2006,14(6):1083~1088.
Fang Yonghua, Kong Chao, Lan Tiange, et al. De-noising and baseline correction of spectrum by wavelet transform [J]. Optics and Precision Engineering, 2006, 14(6): 1083~1088. (in Chinese)
- 8 Huang N E. The empirical mode decomposition and the Hilbert spectrum for nonlinear and non-stationary time series analysis [J]. Procedures of the Royal Society of London A, 1998, 454: 903~995.
- 9 蔡剑华,王先春.基于经验模态分解的近红外光谱预处理方法[J].光学学报,2010,3(1):267~271.
Cai Jianhua, Wang Xianchun. Near infrared spectrum pretreatment based on empirical mode decomposition [J]. Acta Optica Sinica, 2010,3(1): 267~271. (in Chinese)
- 10 周振宇,杨宏宇,龚辉,等.基于希尔伯特-黄变换的近红外脑功能成像信号分析[J].光学学报,2007,27(2):307~312.
Zhou Zhenyu, Yang Hongyu, Gong Hui, et al. Brain signal analysis of functional near-infrared imaging based on Hilbert - Huang transform [J]. Acta Optica Sinica, 2007,27(2): 307~312. (in Chinese)
- 11 Bradley M B, Camelia K. Application of the empirical mode decomposition and Hilbert - Huang transform to reflection seismic data [J]. Geophysics, 2007,72(3):H29~H37.