分形理论在光谱识别中的应用

熊宇虹，温志渝，张流强，温中泉，梁玉前

重庆大学光电工程学院，重庆　400044

摘　要　分形理论是研究一类不规则、混乱复杂，但其局部和整体具有相似性体系的科学。分形维数是分形理论中用于描述对象的不规则度和自相似性的基本度量。文章以符合朗伯-比尔定律的光谱信号为研究对象，在概述分形几何基本原理的基础上，提出了以分形维数作为光谱识别特征的方法，运用相空间重构得出了光谱信号的分形维数，通过对光谱信号的分形维数进行比较，达到识别不同光谱的目的，最后举例对该方法进行了说明。

主题词　分形；分形维数；光谱分析；光谱识别

中图分类号：TP39　　**文献标识码**：A　　**文章编号**：1000-0593(2006)04-0772-03

引　言

分形理论是数学家曼德布罗特创立的，主要研究一类不规则、混乱复杂，但其局部和整体具有相似性体系的科学[1]。由于其在描述复杂现象方面的独特作用，从而在自然科学和社会科学的众多领域得到了广泛应用，为人们研究复杂问题提供了新方法，开辟了新视野[2]。

光谱识别技术是光谱定性分析的基础。随着光谱学和计算机技术的发展，光谱识别已成为光谱分析技术的重要组成部分。本文以符合朗伯-比尔定律的光谱信号为研究对象，探讨了分形理论在光谱识别中的应用。在概述分形几何基本原理的基础上，提出了以分形维数作为光谱识别特征的方法，运用相空间重构得出了光谱信号的分形维数，通过对光谱信号的分形维数进行比较，达到识别不同光谱的目的，最后以常见的中药材党参及其伪品夜关门为例对该方法进行了说明。

1　分形和分形维数[3-5]

分形理论经过了许多年的发展，在不同的时期人们对分形下过不同的定义，但迄今为止还没有一个确切、简明、令人满意的定义，一般而言，把分形看作具有如下典型性质的集合 F，

(1) F 具有精细结构，即有任意小比例的细节；

(2) F 是如此不规则，以致它的局部和整体都不能用传统的几何语言来描述；

(3) F 通常有某种自相似的形式，可以是近似的或是统计的；

(4) 一般地，F 的“分形维数”大于它的“拓扑维数”；

(5) 在大多数情况下，F 可以用非常简单的方法定义，可以由迭代产生。

一般而言，如果所研究的对象满足上述性质中的全部或大部，即使有某个性质例外，也并不影响把其称为分形。

分形维数是分形理论中用于描述对象的不规则度和自相似性的基本度量，在一定区间内具有标度不变性。数学家以 Hausdorrf 维数为基础，定义了多种维数，如盒维数、信息维数、关联维数、广义维数和自相似维数等。这些维数从不同的方面刻画了分形集的分形特征。其中关联维数计算简单，可以由一维时间序列利用相空间重构的方法直接计算得出，因而应用较普遍，其基本计算过程如下，

假设$\{x_k\}$为观测得到的时间序列，其中 $k=1，2，\cdots，h$。对该时间序列采用时间差法进行相空间重构，重构结果记为 $y_n(m,p)=(x_n,x_{n+p},\cdots,x_{n+(m-1)p})$，其中 $n=1,2,\cdots,h-m+1$，$p=a\Delta t$ 为时间延迟，Δt 为数据采样的时间间隔，a 为任意整数，m 为嵌入维数。

在 y_n 中，凡是距离小于给定正数 r 的矢量称为关联矢量，计算一下有多少对关联矢量，它在一切可能的配对中所占的比例称为关联积分，

收稿日期：2005-01-28，**修订日期**：2005-06-28

基金项目：国家自然科学基金重点项目(69476023)和国家“863”项目(2004AA4040，2004AA404023)，国家自然科学基金(60308007)和重庆市“十五”攻关项目(7341；8149)资助

作者简介：熊宇虹，1971年生，重庆大学光电工程学院博士研究生

$$C(r) = \frac{1}{N^2}\sum_{i,j=1}^{N}\theta(r - \| y_i - y_j \|) \quad i \neq j \tag{1}$$

其中 $N=h-m+1$，$\theta(x)$是 Heaviside 函数，定义为

$$\theta(x) = \begin{cases} 0 & x \leqslant 0 \\ 1 & x > 0 \end{cases} \tag{2}$$

若 r 选得太大，则任何一对矢量都发生关联，因而 $C(r)=1$，取对数后为 0，这样的 r 当然反映不了系统的内部性质；r 太小时，$C(r)=0$。故应适当选取 r，使得在 r 的某个区间内有

$$C(r) = r^D \tag{3}$$

其中 D 称为关联维数，通过变换可得

$$D = \frac{\ln C(r)}{\ln r} \tag{4}$$

在实际应用时，对某一给定的 m，画出 $\ln r-\ln C(r)$曲线，除去斜率为 0 或 m 的直线外考察其间的最佳拟合直线，该直线的斜率就是 D，为了使 m 的选择合适，可以增大 m，通常 D 也有所改变，到一定的 $m=m_{\min}$，此时 D 趋近于不变，$m_{\min}$就认为是最小嵌入维数。

2　基于分形特征的光谱识别

光谱识别的基本过程：选择并提取光谱信号的特征，运用相关算法对未知光谱信号的特征和已知光谱信号的特征进行比较，从而得出未知光谱信号的化学组成关系。从光谱识别的基本过程来看，光谱信号特征的选择和提取是光谱识别的前提。对单组分光谱信号而言，组分单一，因而信号波形也较简单，选取波形特征点就可以方便地达到比较识别的目的；对于复杂组分的光谱信号而言，成分复杂，因而信号波形也较复杂，选取适当的特征也就成了正确识别的关键。

复杂组分光谱信号的基本特点：连续、极其不规则的，由许多个波峰波谷相连形成山峦一样的形状。根据分形的特征和复杂组分光谱信号的特点，可以认为复杂组分的光谱信号是具有一定自相似结构的分形体。作为分形体的基本度量，分形维数较好地反映了分形体本身具有的不规则度及自相似性。因而在光谱信号的识别过程中，可以提取信号的分形维数作为光谱的识别特征，根据分形维数的相同与否，进行光谱信号的鉴定识别。

3　实例分析

下面以常见的中药材党参及其伪品夜关门为例，进行实例分析。

图 1、图 2 分别是经过归一化处理后的党参和夜关门的红外光谱图。对光谱数据分别取嵌入维数 m 等于 3，4，5，6，7，8，10，12，14 等进行计算，再画出相应 $\ln r-\ln C(r)$的曲线，为了方便起见，只画出了 m 等于 3，6，8，14 等四条曲线，如图 3、图 4 所示。

从图 3、图 4 可以看出，对党参和夜关门而言，$\ln r$ 在[−1.660 7，−0.994 3]的范围内(即 r 在[0.19，0.37]之间)，曲线近似成一条直线，其相应斜率的具体数值如表 1 所示。从表 1 可以看出，党参和夜关门的斜率刚开始先随着嵌入维数的增大而增大，随着增加到一定程度，斜率的数值趋于稳定。该斜率即为光谱信号的关联维数，从表中可以得出党参和夜关门的关联维数分别为 1.58 和 1.30。从而也就可以根据党参和夜关门的关联维数的不同来对二者进行鉴别了。

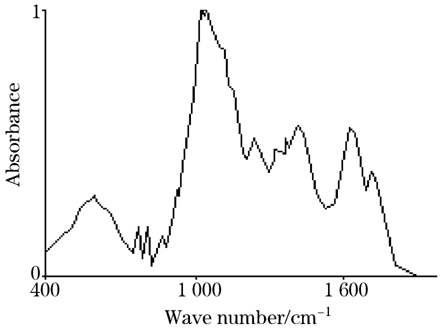

Fig. 1　The infrared spectrum of Dangshen

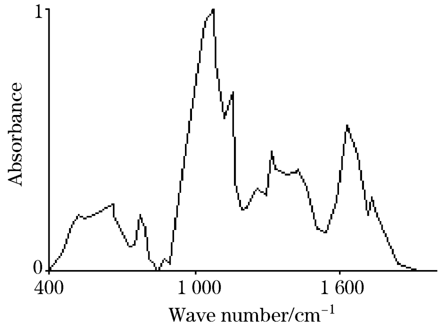

Fig. 2　The infrared spectrum of Yeguanmen

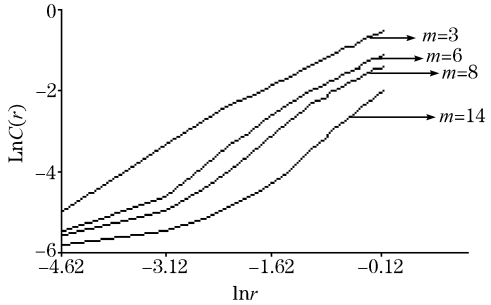

Fig. 3　Lnr-lnC(r) curves of Dangshen

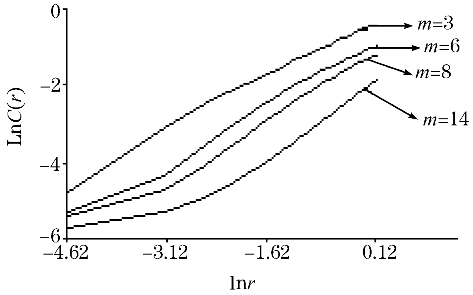

Fig. 4　Lnr-lnC(r) curves of Yeguanmen

Table 1 Correlation dimension of Dangshen and Yeguanmen

嵌入维数	党参的维数	夜关门的维数
3	0.88	0.84
4	0.82	0.86
5	0.88	0.90
6	1.01	1.01
7	1.15	1.12
8	1.29	1.20
10	1.45	1.31
12	1.57	1.30
14	1.58	1.30

在实际应用中，由于(1)式中涉及平方和开方，计算量大，可用其等价的拓扑距离来替代，另外在识别的过程中可以结合其他特征采用数据融合的方法以获得更好的识别效果。

4 结束语

分形几何是非线性科学中的一门重要的数学分支，其分形和分形维数的思想为解决现实问题提供新的工具。本文以符合朗伯-比尔定律的光谱信号为研究对象，探讨了分形理论在光谱识别中的应用，提出了提取分形维数作为光谱识别特征的方法，并通过实例对该方法进行了验证，是分形理论在光谱识别方法应用中的有益尝试。

参 考 文 献

[1] CHEN Guo-an，ZHANG Xiao-yun，GE Shi-rong(陈国安，张晓云，葛世荣). Construction Machinery(建筑机械)，1999，(1)：47.
[2] JIANG Dong-xiang，HUANG Wen-hu，XU Shi-chang(蒋东翔，黄文虎，徐世昌). Journal of Harbin Engineering University(哈尔滨工业大学学报)，1996，17(2)：27.
[3] XU Yu-xiu，YUAN Pei-xin，YANG Wen-ping(徐玉秀，原培新，杨文平). Fractal and Wavelet Method of Complicated Machinery Fault Diagnosis(复杂机械故障诊断的分形与小波方法). Beijing：The Publishing Company of Machinery Industry(北京：机械工业出版社)，2003. 104.
[4] CHEN Shi-hua，LU Jun-an(陈士华，陆君安). The Foundation of Chaos Dynamics(混沌动力学初步). Wuhan：The Publishing Company of Wuhan Hydraulic and Electric Engineering University(武汉：武汉水利电力大学出版社)，1998. 96.
[5] LIU Shi-da(刘式达). An Introduction of Fractal and Fractal Dimension(分形和分维引论). Beijing：The Meteorologic Publishing Company (北京：气象出版社)，1993. 90.

Application of Fractal Theory to Spectral Signal Recognition

XIONG Yu-hong，WEN Zhi-yu，ZHANG Liu-qiang，WEN Zhong-quan，LIANG Yu-qian
College of Optoelectronic Engineering，Chongqing University，Chongqing 400044，China

Abstract The fractal theory is a discipline that studies a kind of irregular and chaotic object with similarity of its part and whole. The fractal dimension is a basic index mark of irregularity and self-similarity in the fractal theory. The present paper takes the spectral signal according with Lambert-beer' law as the object，introduces the basic theory of fractal geometry in brief，puts forward the method of fractal dimension as the feature of spectral signal recognition，makes use of reconstructing phase space to gain the fractal dimension of spectral signal，compares different values of the fractal dimension to recognize different spectral signal，and gives an example for explanation.

Keywords Fractal；Fractal dimension；Spectral analysis；Spectral signal recognition

(Received Jan. 28，2005；accepted Jun. 28，2005)