

En español

Filtrado de señales en espectrofotometría de absorción mediante *wavelets* invariantes a la traslación

Rubiel Vargas Cañas¹, Humberto Loaiza Correa²

RESUMEN

Enfermedades como cáncer, hepatitis y sida, entre otras, ocasionan que la concentración y cantidad de algunas sustancias en fluidos corporales se modifique, por lo que su medición puede servir como técnica diagnóstica. Entre las técnicas más utilizadas para la detección y cuantificación de sustancias biológicas se encuentra la espectroscopía. El principal factor que limita la sensibilidad y calidad en la medida es la presencia de señales indeseadas, denominadas ruido. El ruido tiene diferentes orígenes, los cuales van desde los supuestos físicos hasta la influencia ambiental. Eliminar o reducir el ruido en espectroscopía ha sido objeto de estudio durante muchos años y en los últimos lustros se ha demostrado la aplicabilidad de la transformada *wavelet* con dicho propósito. Este trabajo presenta una transformada *wavelet* invariante a la traslación como una alternativa para aumentar la relación señal a ruido en señales provenientes de espectrofotómetros y por ende mejorar la calidad del análisis espectrofotométrico y la cuantificación de sustancias biológicas. La técnica propuesta se aplicó a señales generadas artificialmente y provenientes de dos espectrofotómetros, uno con fuente de radiación continua y otro con fuente de radiación láser. Los resultados obtenidos con esa técnica se compararon con los obtenidos a partir de filtros tradicionales: gaussianos, Wiener y *wavelets* ortogonales. Las principales ventajas derivadas de la aplicación de esta técnica son: un sustancial aumento de la relación señal a ruido y la preservación de la ubicación y el ancho de los picos espectrales. Estas ventajas incrementan la calidad y veracidad en el proceso de detección y cuantificación de sustancias biológicas y posibilitan un análisis automático del espectro. Además, conducirán a comprender las limitaciones experimentales y permitirán un estudio cuantitativo sobre la influencia de los cambios en la concentración de una sustancia determinada en enfermedades relacionadas.

Palabras clave: espectrofotometría de absorción, filtrado de señales, *wavelets* invariantes a la traslación, detección de sustancias biológicas.

In English

Absorption spectrophotometry signal de-noising using invariant *wavelets*

Rubiel Vargas Cañas³, Humberto Loaiza Correa⁴

ABSTRACT

Diseases such as cancer, hepatitis and AIDS cause body fluid concentration and amount to become modified; their measurement can thus be useful as a diagnostic technique. Spectroscopy is one of the most widely used techniques for biological substance detection and quantification. The presence of unwanted signals is the main limiting factor for sensitivity and quality; this is called noise. Noise has different backgrounds which range from physical assumptions to environmental influence. Eliminating or reducing noise in spectroscopy has thus been studied for many years and the applicability of wavelet transform has been demonstrated in recent decades. This paper presents invariant wavelet transform for increasing signal to noise ratio in spectrophotometer signals and thus improve the quality of spectrophotometric analysis and biological substance quantification. The proposed technique was applied to artificially-generated signals and signals from two spectrometers, one having a continuum source and another with a laser radiation source. The results obtained with this technique were compared to those obtained from traditional filters: Gaussian, Wiener and orthogonal wavelets. This technique's main advantages are a substantial increase in signal to noise ratio and preservation of spectral peak location and width. These advantages increase biological substance detection and quantification quality and accuracy and allow automatic analysis of the spectrum. They can also lead to better understanding of experimental limitations and allow a quantitative study of the influence of changes in substance concentration in related diseases.

Keywords: absorption spectrophotometry, signal filtering, invariant wavelet, biological substance detection.

¹Ingeniero de Sistemas, Universidad Industrial de Santander. Especialista en Electrónica industrial, Universidad del Cauca. Magíster en Ingeniería con énfasis en electrónica, Universidad del Valle. Candidato a doctor en Ingeniería Biomédica, City University, Reino Unido. Afiliación actual, Universidad del Cauca. rubiel@unicauca.edu.co

²Ingeniero Electricista, Magíster en Automática, Universidad del Valle. Doctor en Robótica, Université D'evry Val D'essonne, Francia. Humberto.loaiza@correounivalle.edu.co

³Systems Engineer, Universidad Industrial de Santander. Specialist in Industrial Electronics, Universidad del Cauca. Magíster Master in Engineering with emphasis in electronics, Universidad del Valle. PhD candidate in Biomedical Engineering, City University, Reino Unido. Current affiliation, Universidad del Cauca. rubiel@unicauca.edu.co

⁴Electrical Engineer, Master in Automation, Universidad del Valle. PhD in Robotics, Université D'evry Val D'essonne, Francia. Humberto.loaiza@correounivalle.edu.co

En español

In English

Recibido: mayo 20 de 2010
Aceptado: noviembre 24 de 2011

Introducción

Existen diferentes maneras de detectar y cuantificar sustancias biológicas y especies químicas. Dentro de estas técnicas la espectroscopía es especialmente atractiva dado que es altamente sensible, muy rápida, robusta, extensible y su complejidad en la implementación es media. En espectrofotometría de absorción la ley de Bourguer-Lamber-Beer, o ley general de la espectrofotometría, brinda los fundamentos físico-matemáticos para encontrar la concentración de una sustancia a partir de la medida de absorción de esta (Valea y Girón, 1998). Esto es, si se conoce la potencia media radiante que incide sobre una muestra y la potencia transmitida, se puede calcular la cantidad de luz absorbida, la cual se expresa como:

$$A = abc \quad (1)$$

Esta proporción representa la relación de la radiación con una muestra de concentración c en un camino óptico b dado en centímetros, donde A es la absorbancia y a es el coeficiente de absorción (o de extinción) dado en litros por gramo-centímetro. La ecuación 1 está definida para un haz de radiación monocromático y paralelo y suele también escribirse como:

$$A = -\log_{10}(T) \quad (2)$$

donde T es la transmitancia y expresa la razón entre la intensidad incidente y la transmitida (Valea Pérez y Giron, 1998) según la ecuación 3.

$$T = \frac{I}{I_0} \quad (3)$$

En este procedimiento de medición de concentración mediante espectrofotometría existe un grado de incertidumbre debido a ciertas desviaciones o la aleatoriedad del ruido, las cuales se pueden clasificar como desviaciones propias de la ley de la espectrofotometría, desviaciones químicas y desviaciones instrumentales (portal virtual Unal, 2007; Valea y Girón, 1998). El ruido debido a la fundamentación física está relacionado con las discrepancias entre las circunstancias reales y aquellas ideales contempladas en la definición de la ley general de la espectroscopía: longitud de onda constante, paso óptico fijo, haz de radiación monocromático y linealidad. Las desviaciones químicas son producto de las reacciones llevadas a cabo durante el proceso de medición y las desviaciones instrumentales tienen su fuente en radiaciones parásitas o en ruido debido a la instrumentación, apareciendo durante la adquisición y digitalización de la señal o en la transmisión de esta (Oppenheim y Willsky, 1998; Van y Haykin, 2002).

En espectroscopía es muy importante remover o disminuir los niveles de ruido con el fin de obtener datos con mayor veracidad, permitir el análisis automático del espectro y comprender algunas limitaciones experimentales (Werner y Kjell-Arild, 2005). Una alternativa para disminuir las desviaciones instrumentales y por ende aumentar la calidad en la medición es la de procesar digitalmente las señales entregadas por el equipo de medición. La energía radiante es transformada en señal eléctrica, digitalizada en algunos casos, filtrada, amplificada, compensada, manipulada matemáticamente y, finalmente, presentada como absor-

Received: May 20th 2010
Accepted: November 24th 2011

Introduction

There are different ways for detecting and quantifying biological and chemical species; spectroscopy is particularly attractive since it is highly sensitive, very fast, robust, extensible and its implementation involves medium complexity. The Lambert-Beer-Bourguer law or general law of spectrophotometry provide the physical-mathematical fundamentals for quantifying substance concentration from measured absorption in absorption spectrophotometry (Valea and Girón, 1998). This involves knowing the average power affecting a sample and transmitted power; the amount of light absorbed by a sample can be calculated by using:

$$A = abc \quad (1)$$

where A is absorbance, a is absorption coefficient (or extinction coefficient) given in litres per gram-centimetre, b is the length of the optic path given in centimetres and c is the concentration. Equation (1) is defined for a monochromatic and parallel radiation beam. It is often also written as:

$$A = -\log_{10}(T) \quad (2)$$

where T is transmittance, showing the ratio between incident and transmitted radiation (Valea Pérez and Giron, 1998) according to:

$$T = \frac{I}{I_0} \quad (3)$$

There is a degree of uncertainty here due to some deviation produced by the noise or randomness. Such deviations can be classified as deviations typical of the so-called law of spectrophotometry, deviations produced by instrumentation and deviations produced by chemical reactions (Portal Unal virtual, 2007; Valea and Girón, 1998). Deviations produced by physical fundamentals are related to discrepancies between actual conditions and ideal conditions assumed by definition, i.e. constant wavelength, constant optical path, monochromatic radiation beam and linearity. Chemical deviations are produced by reactions occurring during measurement and instrumental deviations are due to radiation or parasitic noise due to instrumentation, appearing during signal acquisition and digitisation and/or its transmission (Oppenheim and Willsky, 1998; Van and Haykin, 2002).

Removing or deducing noise levels is a very important task in spectroscopy for obtaining highly accurate data, allowing automatic analysis of the spectrum and understanding some experimental limitations (Werner and Kjell-Arild, 2005). An alternative for reducing instrumental drift and increasing quality measurement is to digitally process signals delivered by the measuring equipment. Radiant energy is converted into an electrical signal (digitised in some cases) which is filtered, amplified, mathematically compensated for, manipulated and presented as absorbance or transmittance on a digital measurement scale on a

bancia o transmitancia en una escala de medida digital en una pantalla o un medidor. Los métodos tradicionales están basados en: absorción diferencial, filtros digitales (gaussianos o Wiener), y recientemente wavelets ortogonales (Schuck *et al.*, 2010).

En este trabajo se presenta una propuesta para eliminar o minimizar las señales espúreas o de fondo contenidas en una señal de luz proveniente de un espectrofotómetro utilizado para cuantificar la concentración de sustancias biológicas. El propósito final es el de mejorar la relación señal a ruido, aumentar la sensibilidad del instrumento, mejorar el tiempo de medida e incrementar el rango de precisión en la medición. Para esto se hace uso de la transformada wavelet invariante a traslaciones y la evaluación de la técnica se aplica a señales creadas artificialmente y a las provenientes de espectrofotómetros con fuentes de luz continua y láser, luego se cuantifica la relación señal a ruido.

En la sección 2 se presentan los fundamentos básicos del filtrado de señales y los tipos de filtros más utilizados con este propósito. En la sección 3 se describe de manera general la técnica propuesta y el procedimiento seguido en su implementación. Los resultados obtenidos a partir de señales simuladas y reales provenientes de espectrofotómetros de radiación visible con fuente de luz continua y láser se exponen en la sección 4. Las conclusiones son presentadas en la sección 5 y, finalmente, en la sección 6, se suministran las referencias a documentos utilizados como soporte del trabajo descrito.

Filtrado de las señales espectroscópicas

Motivación

El principal factor limitante en la precisión y sensibilidad de cualquier método analítico instrumental es la presencia de señales no deseadas que se superponen a la señal generada por la sustancia que se desea analizar (Werner y Kjell-Arild, 2005). En la mayoría de los casos este tipo de señales son inevitables y deterioran la calidad del análisis o degenera en errores en el análisis de resultados si la información útil no puede ser extraída de manera efectiva. El análisis de espectros está basado en la variación de los datos, específicamente ubicación, intensidad y ancho de los picos; por lo tanto, es sensitivo al ruido, incluso en pequeñas cantidades. Por lo tanto, es evidente la necesidad de aplicar una metodología que remueva las señales adicionales manteniendo los detalles de las características de la señal original, dado que incluso las más pequeñas variaciones pueden estar relacionadas con atributos biofísicos de la sustancia de estudio. A esta metodología se la conoce como filtrado y consiste en la eliminación o atenuación del ruido mediante arreglos electrónicos o digitales.

Generalmente las señales se ven afectadas por dos tipos de ruido: aleatorio y periódico (Oppenheim y Willsky, 1998; Van V. y Haykin, 2002). El ruido aleatorio presenta un comportamiento que se puede caracterizar a partir de la función de densidad de probabilidad, mientras que los parámetros del ruido periódico típicamente son estimados por inspección del espectro de la señal porque producen picos en el dominio de la frecuencia. Los parámetros del ruido periódico también pueden estimarse con el conocimiento previo sobre la ubicación de los componentes frecuenciales de la interferencia o de las especificaciones del sensor (Oppenheim y Willsky, 1998). Algunas de las técnicas tradicionales, tales como filtros gaussianos y Wiener explotan el

screen or meter. Traditional de-noising methods are based on differential absorption, digital filters (Gaussian or Wiener) and orthogonal wavelets (Schuck *et al.*, 2010).

This paper presents a novel approach to eliminating or minimising spurious signals contained in a light signal from a spectrophotometer which is used for quantifying biological substances' concentrations. The ultimate goal was to improve signal to noise ratio, to increase instrument sensitivity, improve measurement time and increase measurement accuracy; translation invariant wavelet transform was thus used.

To facilitate evaluating the technique, it was applied to artificially created signals and signals from two spectrophotometers, one in which the light source was continuous and the other in which the light source was a laser. The signal to noise ratio was quantified and compared against traditional approaches in both cases.

Filtering spectroscopic signals

Motivation

The main limiting factor regarding any instrumental analytical method's accuracy and sensitivity is the presence of unwanted signals superimposed on the signal being generated by the substance to be analysed (Werner and Kjell-Arild, 2005). Such signals are inevitable in most cases and they reduce the quality of analysis, leading to errors if useless information cannot be effectively removed. Spectrum analysis is based on signal variation, specifically peak location, amplitude and width. Hence, such analysis is sensitive to noise, even in small quantities. The need for a methodology removing additional signals whilst keeping the characteristics of the original signal thus becomes evident, since even small variations can be related to biophysical attributes of the substance being studied. This methodology is known as filtering and involves the removal or attenuation of noise by electronic or digital arrays.

Signals are usually affected by two types of noise: random and periodic noise (Oppenheim and Willsky, 1998; Van V and Haykin, 2002). Random noise presents a pattern which can be characterised from the probability density function, whilst periodic noise parameters are typically estimated by inspecting signals' spectra due to them being appreciated as peaks in the frequency domain. Periodic noise parameters can also be estimated using prior knowledge regarding the location of the interference frequency components or sensor specifications (Oppenheim and Willsky, 1998). Some traditional techniques such as Gaussian and Wiener filters exploit prior knowledge of parameters characterising the noise, specifically the mean and variance.

conocimiento previo de los parámetros que caracterizan el ruido, específicamente la media y la varianza, para llevar a buen término su cometido.

Principales técnicas

La técnica más utilizada para suprimir el ruido en espectrofotometría de absorción es la de absorción diferencial (Barnard, 2009), la cual consiste en dividir la señal de luz en una de prueba y una de referencia; esta técnica asume que el ruido afecta por igual las dos señales; luego, al restar o dividir las dos señales, se elimina el exceso de ruido. En la práctica esta suposición no siempre es correcta y por ende la implementación de un restador o divisor no provee los resultados esperados. Por otra parte, el método más común para incrementar la relación señal a ruido en espectrofotometría láser de absorción es cortar — "chopear"— el láser y amplificar la corriente en el detector con un amplificador *look-in*. Esta técnica presenta algunas fallas debido a la frecuencia del *chopper*, o cuando la señal de fondo es de baja frecuencia. Otra aproximación consiste en modular en frecuencia la señal y promediar un conjunto de barridos espectrales (Hong *et al.*, 2009). Esta técnica provee muy buenos resultados pero su implementación requiere de un diseño óptico-electrónico muy sofisticado.

Otras aproximaciones sacan ventaja del conocimiento previo de las características del ruido, particularmente de su varianza (Hong *et al.*, 2009), entre ellas, las de los filtros gaussianos, que disminuyen el ruido periódico y aleatorio y muestran un buen comportamiento en señales afectadas por ruido con distribuciones *erlang* (Gonzalez y Eddins, 2004; Van V. y Haykin, 2002), comunes en sistemas láser (portal virtual Unal, 2007). Estos filtros asumen la varianza constante durante toda la señal y en ocasiones (Barnard, 2009) fraccionan la señal en diferentes segmentos y estiman la varianza para cada uno de ellos.

Cada técnica posee ventajas y desventajas, y el precio a pagar por la eliminación del ruido es la distorsión en parte de la señal original. Por ejemplo, los filtros Notch no trasladan los picos en tiempo porque tienen una respuesta en fase nula. Sin embargo, la respuesta al impulso no es lo suficientemente corta, lo que degenera en un ensanchamiento de los picos espectrales (Werner y Kjell-Arild, 2005). De acuerdo con la literatura revisada, existe tendencia a utilizar filtros *wavelets* (Arizmendi *et al.*, 2010; García y Ramírez, 2007; Posú y Landrove, 2008; Werner y Kjell-Arild, 2005) en el filtrado de señales espectroscópicas dado que ellos preservan las características de los picos. A continuación se presenta un resumen de algunos trabajos relevantes en este campo.

Espectroscopia de resonancia magnética y magnética nuclear. Cancino-De-Greiff *et al.* (2002) analizan, por medio de simulaciones, la potencialidad de *wavelet Shrinkage* en el filtrado del ruido en espectroscopía de resonancia magnética. En su trabajo también posibilitan la combinación con el algoritmo de Cadzow. Por su parte, Posú y Landrove (2008) presentan una metodología para el procesamiento de los datos obtenidos por espectroscopía de resonancia magnética en la elaboración de mapas metabólicos. Luego de obtener el espectro de potencias este es filtrado con la finalidad de eliminar ruido haciendo uso de *wavelets* de Haar y su línea base es aproximada mediante un polinomio de tercer orden. Trbovica *et al.* (2005) aplican una serie de filtros a datos obtenidos experimentalmente de un proceso de espectros-

The main techniques

Differential absorption is the most common technique for suppressing noise in absorption spectrophotometry (Barnard, 2009); it involves splitting the light signal into a test signal and a reference signal. This technique assumes that the noise equally affects both signals; subtracting or dividing the two signals then removes excess noise. Such assumption is not always correct in practice and therefore using a receiver or divider does not provide the expected results. Moreover, the most common method for increasing the signal to noise ratio in laser absorption spectrophotometry is to chop (cut) and amplify the laser and current in the detector with a look-in amplifier. This technique has some issues due to "chopper" frequency or when the background signal is low frequency. Another approach is to modulate the signal frequency and average a set of spectral scans (Hong *et al.*, 2009). This technique provides very good results but its implementation requires a very sophisticated electro-optical design.

Other approaches take advantage of prior knowledge regarding the characteristics of noise, particularly its variance (Hong *et al.*, 2009). Gaussian filters reduce random and periodic noise, whilst demonstrating good performance signals affected by noise with Erlang distributions (Gonzalez and Eddins, 2004; Van V and Haykin, 2002) which are common in laser systems (virtual Portal Unal, 2007). These filters assume constant variance throughout the signal and sometimes (Barnard, 2009) divide the signal into different segments and estimate the variance for each of them.

Each aforementioned technique has advantages and disadvantages and the price to pay for eliminating noise is the distortion of the original signal. For example, Notch filters do not shift peaks in time because they have a zero phase response; however, the impulse response is not sufficiently short, which becomes degenerated into a broadening spectral peak (Werner and Kjell-Arild, 2005). According to the pertinent literature, there is a tendency to use wavelet filters (Arizmendi *et al.*, 2010; García and Ramírez, 2007; Posú and Landrove, 2008; Werner and Kjell-Arild, 2005) to filtrate spectroscopic signals as they preserve the characteristics of the peaks. A summary of some relevant work in this field is given below.

Nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy: Cancino-De-Greiff *et al.*, 2002, used simulation for analysing potential wavelet shrinkage in filtering noise in magnetic resonance spectroscopy; combining Cadzow's algorithm in their work. Posú and Landrove, 2008, presented a methodology for processing data obtained by NMR spectroscopy for metabolic mapping. Once a power spectrum has been obtained it is filtered to remove noise using Haar wavelets and its baseline is approximated by a third order polynomial. Trbovica *et al.*, 2005, applied a series of filters to experimentally obtained NMR spectroscopy data to optimise computational efficiency and minimise the weight of small chemical translations. The best results were obtained when applying principal component analysis to the wavelet coefficients.

copía magnética nuclear con el propósito de optimizar la eficiencia computacional y minimizar el peso de pequeñas traslaciones químicas. Los mejores resultados fueron obtenidos cuando se aplicaron análisis de componentes principales a los coeficientes de la *wavelet*.

Espectroscopía de absorción. García y Ramírez (2007) emplearon redes neuronales *wavelet* en tareas de reducción de ruido en espectros estelares. Para su validación simulaban espectros estelares y descubrieron que el resultado obtenido con la red neuronal *wavelet* es aproximadamente igual a la salida deseada, es decir, al espectro estelar sin ruido. Xiaoguo y Dahai (2009) describieron un método de determinación espectrofotométrica simultánea para cobre, zinc, níquel y cobalto en agua. El espectro de absorbancia fue procesado con la transformada *wavelet* con la finalidad de remover interferencias.

Espectroscopía infrarroja. Zhu et al. (2007) investigaron la influencia de la forma de la *wavelet*, el número de niveles utilizados y el tipo de umbralización en el filtrado de señales provenientes de un espectroscopio de infrarrojo cercano. Los mejores resultados fueron obtenidos con una *wavelet* bior3.3, dos niveles de descomposición y umbralización suave. Berry y Ozaki (2002) compararon el filtrado de ruido en espectroscopía infrarroja utilizando difusión, reconstrucción por vectores propios y *wavelets*, demostrando que el uso de *wavelets* es mejor que las otras técnicas mencionadas. Zhan et al. (2004), por su parte, aplicaron *wavelet* al análisis y filtrado del ruido en espectroscopía de correlación infrarroja de medicina tradicional china. Esta técnica les permitió separar picos espectrales que se encontraban sobrepuestos antes del análisis.

Espectroscopía Raman y Terahertz. Gao et al. (2004) discutieron el filtrado de ruido en espectroscopía Raman haciendo uso de una *wavelet* de Haar estacionaria. La varianza del ruido es estimada para cada nivel *wavelet* y se utiliza un umbral fijo equivalente a la raíz cuadrada de dos veces el logaritmo natural del número de muestras presentes en la señal. Li-Yinglang y Na Cai (2009) presentaron una *wavelet* con forma de sombrero mexicano aplicado al análisis de datos de espectroscopía Terahertz en el dominio del tiempo. Los resultados de las simulaciones mostraron su habilidad para remover ruido en señales de baja y alta frecuencia.

Procedimiento

Wavelets

La teoría de *wavelets* es una rama de las matemáticas cuyo estudio se centra en la construcción de un modelo de sistemas o procesos utilizando un tipo especial de señales conocidas como *wavelets*. Una *wavelet* es una onda de duración efectiva limitada que tiene un valor promedio cero y puede representar una señal en términos de versiones trasladadas y dilatadas de dicha onda (Rioul O. y Vetterli M., 1991; Cuesta F. D. et al., 2000). Las *wavelets* son familias de funciones del tipo:

$$\Psi_{a,b}(x) = \frac{1}{\sqrt{|a|}} \Psi\left(\frac{x-b}{a}\right) \tag{4}$$

donde *a* es el parámetro de dilatación y *b* el de traslación. La transformada *wavelet* de una señal viene dada por la expresión:

Absorption spectroscopy: Garcia and Ramirez, 2007, used wavelet neural networks to reduce noise in stellar spectra. To validate the technique, they simulated stellar spectra and found that the result obtained with the wavelet neural network was almost equal to the desired output, i.e. the stellar spectrum without noise. Xiaoguan and Dahai, 2009, described a method for simultaneous spectrophotometric determination of copper, zinc, nickel and cobalt in water. The absorbance spectrum was processed with wavelet transform to remove interference.

Infrared Spectroscopy: Zhu et al., 2007, investigated the influence of the shape of the wavelet, the number of levels used and the type of thresholding in filtering signals from near-infrared spectroscopy. The best results were obtained with a wavelet bior3.3, using two levels of decomposition and soft thresholding. Berry and Ozaki, 2002, compared noise filtering by using infrared spectroscopy, diffusion eigenvectors and reconstruction wavelets, demonstrating that using wavelets was better than the aforementioned techniques. Zhan et al., 2004, applied wavelet analysis and noise filter correlation infrared spectroscopy to traditional Chinese medicine. This technique allowed them to separate spectral peaks which were superimposed prior to analysis.

Terahertz and Raman spectroscopy: Gao et al., 2004, discussed noise filtering in Raman spectroscopy using a stationary Haar wavelet. Noise variance was estimated for each wavelet level and fixed threshold, being equal to the square root of twice the natural logarithm of the number of samples present in the signal. Li-Na Yinglang and Cai, 2009, presented Mexican hat-shaped wavelets which were applied to the analysis of terahertz spectroscopic data in the time domain. The results of the simulations showed their ability to remove noise in low and high frequency signals.

Methodology

Wavelets

The wavelet theory is a branch of mathematics whose research focuses on building a model of systems or processes using a special type of signal known as a wavelet. A wavelet is a wave having limited effective duration which has a zero average value and may represent a signal in terms of translated and dilated versions of the wave (Rioul O. and Vetterli M., 1991; Cuesta FD et al., 2000). Wavelets are families having the following function:

$$\Psi_{a,b}(x) = \frac{1}{\sqrt{|a|}} \Psi\left(\frac{x-b}{a}\right) \tag{4}$$

where *a* and *b* are the expansion and translation parameters, respectively. The wavelet transform of a signal is then given by:

$$WT(f(x)) = f(x) * \Psi(x) = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \Psi\left(\frac{x-t}{a}\right) dt \quad (5)$$

Esta técnica matemática ha cobrado gran importancia en los últimos años en aplicaciones de todo tipo relacionadas con el procesamiento de señales no estacionarias. Su análisis consiste en descomponer una señal en versiones escaladas móviles de la wavelet original ("madre"). Esta descomposición permite observar una correspondencia entre la escala de las wavelets y la frecuencia, por tanto están relacionadas con el análisis armónico de la señal. Las gráficas de los coeficientes de la transformada wavelet son precisamente una representación tiempo-escala, mucho más natural, de la señal. Dicha representación muestra patrones que antes no eran visibles y preserva el aspecto temporal de la señal. La más grande ventaja es su habilidad para realizar análisis local, es decir, analizar un área específica de una señal más grande no estacionaria y de rápida transitoriedad.

El proceso se realiza en dos etapas: análisis y reconstrucción. El análisis de wavelets involucra filtraje y submuestreo, mientras que la reconstrucción involucra sobremuestreo (*upsampling*) y filtraje. Para hacer su cálculo rápidamente se fija el parámetro de

dilatación $a = 2^j$ con $j \in \mathbb{Z}$, denominándola en este caso wavelet diádica (Cuesta F. D. et al., 2000), y se utiliza un algoritmo rápido similar al de la FFT para su cálculo computacional.

Filtrado de señales utilizando wavelets

El efecto de la transformada wavelet es el de filtrar la señal mediante filtros de dos tipos: pasa altas, que preservan los detalles; y pasa bajas, que realizan una aproximación de la señal. La elección de los filtros determina la forma de la wavelet a usar para hacer una mejor reconstrucción. La ventaja de este procedimiento respecto de un filtrado por bandas de frecuencia reside en que se obtiene una señal casi libre de ruido, con pequeñas modificaciones de las características de la señal (presencia de picos de alta frecuencia, etcétera). Su resultado es diferente al obtenido con los métodos tradicionales de suavizado, los cuales consiguen eliminar el ruido a costa de suavizar o distorsionar también algunos de los componentes de la señal (Rioul O. y Vetterli M., 1991).

En primer lugar, para la reducción del ruido blanco gaussiano se considera la señal adquirida y_n como:

$$y_n = x_n + \eta_n + S_n \quad n = 1 \dots N \quad (6)$$

donde x_n es la señal sin ruido, η_n representa ruido blanco gaussiano con media nula y varianza unitaria, n es su nivel y S_n la línea base aproximada por componentes de bajas frecuencias.

Para filtrar el ruido presente en la señal se sigue un procedimiento similar al llevado a cabo en el dominio de la frecuencia usando la transformada de Fourier, esto es, se calcula la transformada wavelet para cambiar el dominio de la señal y en este nuevo dominio se llevan a cabo una serie de operaciones sobre los coeficientes. Estas operaciones, en muchos casos, son no lineales y consisten normalmente en una umbralización. La idea básica es la de eliminar los componentes que están por debajo de un cierto umbral (umbral fijo), o multiplicarlos por un cierto factor

$$WT(f(x)) = f(x) * \Psi(x) = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \Psi\left(\frac{x-t}{a}\right) dt \quad (5)$$

This mathematical technique has become very important recently in applications of all kinds related to non-stationary signal processing. Wavelet analysis consists of decomposing a signal into scaled and shifted versions of the mother (original) wavelet. Such decomposition allows observing a correspondence between wavelet scale and frequency; therefore, wavelets are related to a signal's harmonic analysis. The graphs of wavelet transform coefficients are a much more natural time-scale representation of the signal. This representation reveals patterns which were not previously visible, preserving the signal's temporal aspect. The major advantage lies in performing local analysis, in other words to analyse a specific area of a large non-stationary and fast transience signal.

The process involves analysis and reconstruction. Wavelet analysis involves filtering and down sampling while reconstruction involves oversampling (up sampling) and filtering. The expansion

parameter is set to $a = 2^j$ with $j \in \mathbb{Z}$ (called dyadic wavelet) (Cuesta FD et al., 2000) to make the calculation quickly. A fast algorithm similar to the FFT is used for automatic computation.

Filtering signals using wavelets

The effect of wavelet transform is to filter the signal through high pass filtering which preserves fine details and low pass filtering which provides a rough approximation of the signal. The choice of filter determines the shape of the wavelet to be used to make a better reconstruction. The advantage of this procedure for filtering by frequency bands is that it results in an almost noise-free signal with small changes in its characteristics (presence of high frequency peaks, etc.). These results are different from those obtained with traditional smoothing methods which get rid of the noise at the expense of smoothing or distorting some of the signal components (Rioul O. and Vetterli M., 1991).

To reduce white Gaussian noise, acquired signal y_n was considered as:

$$y_n = x_n + \eta_n + S_n \quad n = 1 \dots N \quad (6)$$

where x_n was a free-noise signal, η_n represented white Gaussian noise with zero mean and unitary variance, n represented the level and S_n was the base-line approximated by low frequency components.

The procedure for filtering noise was similar to that carried out in the frequency domain by means of Fourier transform, i.e. the wavelet transform was calculated to change the signal domain and a series of operations was carried out on the coefficients in this new domain. These operations are often nonlinear and usually consist of a thresholding. The basic idea is to remove components below a certain threshold (fixed threshold), or multiplied by a weighting factor (flexible threshold). The filtered signal was returned to the time domain after performing the thresholding to

En español

In English

de ponderación (umbral flexible). Luego de realizar la umbralización se calcula la transformada inversa a los objetos de devolver la señal filtrada al dominio del tiempo.

Las diferencias más significativas entre la mayoría de métodos propuestos en trabajos relacionados con esta aplicación radican en el tipo de umbral utilizado o el peso ponderado dado a los coeficientes (Cuesta F. D. et al., 2000). La especificación del umbral depende de la aplicación y la calidad de los datos. Ling y Ren (2008) combinaron análisis de componentes principales y wavelets en el análisis de señales espectrofotométricas traslapadas y propusieron un método basado en optimización para seleccionar el nivel de umbralización. Gao et al. (2004b) discutieron un método basado en el principio de maximización de la entropía. Este método demostró buena selectividad en señales simuladas y su desempeño fue menos sensible a los cambios en la relación señal a ruido. Gao et al. (2004) utilizaron un umbral fijo equivalente a la raíz cuadrada de dos veces el logaritmo natural del número de muestras presentes en la señal.

Invariancia a la traslación

La invariancia a la traslación de un operador L significa que si la entrada es trasladada por τ : $f_{\tau}(t) = f(t - \tau)$ entonces la salida también es trasladada por el mismo factor:

$$g(t) = Lf(t) \Rightarrow g(t - \tau) = Lf_{\tau}(t) \tag{7}$$

Wavelet continua: Sea $f_{\tau}(t) = f(t - \tau)$ una traslación de $f(t)$ por τ . La transformada wavelet puede ser escrita como una convolución:

$$Wf(u, s) = \int f(t) \frac{1}{\sqrt{s}} \psi\left(\frac{t-u}{s}\right) dt = f * \bar{\Psi}_s(u) \tag{8}$$

con $\bar{\Psi}_s(t) = s^{-1/2} \psi(-t/s)$. Es, por lo tanto, invariante a la traslación:

$$Wf_{\tau}(u, s) = f_{\tau} * \bar{\Psi}_s(u) = Wf(u - \tau, s) \tag{9}$$

Wavelet discreta: Reescribiendo (5) como:

$$W f(u, s) = \langle f, \Psi_{u,s} \rangle \tag{10}$$

La traslación u es muestreada uniformemente a intervalos proporcionales a la $u_0 a^j$ así:

$$\psi_{j,n}(t) = \frac{1}{\sqrt{a^j}} \psi\left(\frac{t - nu_0 a^j}{a^j}\right) \tag{11}$$

Este muestreo destruye la invariancia a la traslación.

$$\langle f, \psi_{j,n} \rangle = f * \bar{\Psi}_{a^j}(na^j u_0) = Wf(na^j u_0, a^j) \tag{12}$$

Traslación

dando f por τ se llega a que:

calculate the inverse transform.

The most significant differences between most methods proposed in work related to this application lie in the type of threshold used or given to the weighted coefficients (Cuesta FD et al., 2000). Threshold specification depends on data application and quality. Ling and Ren, 2008, combined principal component analysis and wavelets in analysing overlapping spectrophotometric signals and proposed a method based on optimisation to select the thresholding level. Gao et al., 2004b, discussed a method based on the principle of entropy maximisation; this method had good selectivity on simulated signals and its performance was less sensitive to changes in the signal to noise ratio. Gao et al., 2004, used a fixed threshold equal to the square root of twice the natural logarithm of the number of samples present in the signal.

Invariance to translation

The translational invariance of operator L meant that if the input was shifted by τ : $f_{\tau}(t) = f(t - \tau)$ then the output would also be shifted by the same factor:

$$g(t) = Lf(t) \Rightarrow g(t - \tau) = Lf_{\tau}(t) \tag{7}$$

Continuous wavelet: $f_{\tau}(t) = f(t - \tau)$ was a replica of $f(t)$ shifted by τ so wavelet transform could be written as:

$$Wf(u, s) = \int f(t) \frac{1}{\sqrt{s}} \psi\left(\frac{t-u}{s}\right) dt = f * \bar{\Psi}_s(u) \tag{8}$$

where $\bar{\Psi}_s(t) = s^{-1/2} \psi(-t/s)$ was invariant to translations:

$$Wf_{\tau}(u, s) = f_{\tau} * \bar{\Psi}_s(u) = Wf(u - \tau, s) \tag{9}$$

Discrete wavelet: rewriting (5) as,

$$W f(u, s) = \langle f, \Psi_{u,s} \rangle \tag{10}$$

translation u was uniformly sampled at time intervals that proportional to $u_0 a^j$ as,

$$\psi_{j,n}(t) = \frac{1}{\sqrt{a^j}} \psi\left(\frac{t - nu_0 a^j}{a^j}\right) \tag{11}$$

This sample procedure destroyed translation invariance.

$$\langle f, \psi_{j,n} \rangle = f * \bar{\Psi}_{a^j}(na^j u_0) = Wf(na^j u_0, a^j) \tag{12}$$

Shifting f for τ gave,

En español

$$\langle f_{\tau}, \psi_{j,n} \rangle = f * \bar{\psi}_{a^j}(na^j u_o - \tau, a^j) \quad (13)$$

Si el intervalo de muestreo es relativamente grande, entonces los coeficientes $\langle f, \psi_{j,n} \rangle$ y $\langle f_{\tau}, \psi_{j,n} \rangle$ pueden tomar diferentes valores que no están trasladados uno respecto del otro. Por esto es muy bien sabido que la transformada wavelet ortogonal es variante a la traslación (García y Ramírez, 2007; Cuesta et al., 2000), lo cual significa que la transformada de una señal desplazada es diferente a la transformada desplazada de la señal original.

La transformada wavelet mantiene la invariancia a la traslación muestreando únicamente la escala de una transformada wavelet continua. Sin embargo, existen otras estrategias para mantener la invariancia a la traslación, siendo una de ellas la de mantener el intervalo de muestreo lo suficientemente pequeño, entonces las muestras de $f * \psi_{a^j}(t)$ serán aproximadamente trasladadas cuando f sea trasladada. Otra alternativa es aproximar la señal mediante traslaciones cíclicas (Rioul y Vetterli, 1991) y promediando los resultados. En otras palabras, desplazar la señal i muestras, y las i muestras al final de la señal son trasladadas al comienzo, por esto se le conoce como cíclico. La idea es obtener una mejor estimación de la señal promediando estimaciones dadas por cada desplazamiento que se realice. En total se pueden hacer $N-1$ desplazamientos, para lo cual se necesitarían $O(N^2)$ operaciones.

Otra manera consiste en implementar la transformación sin realizar el submuestreo, esto es equivalente a descomponer la señal en una familia de $N*(j+1)$ coeficientes redundantes, donde N es la duración de la señal y j el número de escalas. Sea $f(t)$ una señal continua caracterizada por N muestras a distancia N^{-1} . Para simplificar su notación el intervalo de muestreo de la señal original es normalizado a 1. La transformada wavelet diádica de la señal discreta normalizada $a_o[n]$ puede ser calculada únicamente a escalas $1 \geq 2^{-j} \geq N^{-1}$, o lo que es lo mismo, $2 \leq 2^j \leq N$. Las muestras $a_o[n]$ son escritas como:

$$a_o[n] = \langle f(t), \phi(t-n) \rangle \quad (14)$$

para cualquier $j \geq 0$

$$a_j[n] = \langle f(t), \phi_{2^j}(t-n) \rangle \quad (15)$$

con

$$\phi_{2^j}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \phi\left(\frac{t}{2^j}\right) \quad (16)$$

Los coeficientes de la transformada diádica para $j > 0$ están dados por,

$$dj[n] = Wf(n, 2^j) = \langle f(t), \psi_{2^j}(t-n) \rangle \quad (17)$$

In English

$$\langle f_{\tau}, \psi_{j,n} \rangle = f * \bar{\psi}_{a^j}(na^j u_o - \tau, a^j) \quad (13)$$

If the sampling interval were relatively large, then coefficients $\langle f, \psi_{j,n} \rangle$ and $\langle f_{\tau}, \psi_{j,n} \rangle$ could take on different values that were not shifted relative to one another. It is well known that orthogonal wavelet transforms are variant to translation (Garcia and Ramirez, 2007; Cuesta et al., 2000), meaning that the wavelet transform of a shifted signal is different from the wavelet transform shifted from the original signal.

Wavelet transform maintains translational invariance only by sampling the scale of a continuous wavelet transform. However, other strategies maintain translation invariance; one of them is to keep the sampling interval small enough and then samples of $f * \psi_{a^j}(t)$ will be shifted when f is also shifted. Another approach the signal by cyclic translations (Rioul and Vetterli, 1991), averaging the results; i.e. shifting the signal i samples, and then i samples at the end of the signal are taken to the beginning, which is why this procedure is known as cyclical. The idea is to obtain a better estimate of the signal averaging estimates given for each movement made; total $N-1$ can travel, for which it would take $O(N^2)$ operations.

Another way is to implement the transformation without sub-sampling, this is equivalent to decomposing the signal into a family of $N * (j + 1)$ redundant coefficients, where N is signal length and j the number of scales. Let $f(t)$ be a continuous signal characterised by N samples sampled at N^{-1} distance. To simplify notation, original signal sampling interval was normalised to 1. Dyadic wavelet transform of normalised discrete signal $a_o[n]$ may be calculated only at scales $1 \geq 2^{-j} \geq N^{-1}$ or the same as $2 \leq 2^j \leq N$. The samples $a_o[n]$ were written as:

$$a_o[n] = \langle f(t), \phi(t-n) \rangle \quad (14)$$

for any $j \geq 0$

$$a_j[n] = \langle f(t), \phi_{2^j}(t-n) \rangle \quad (15)$$

with

$$\phi_{2^j}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \phi\left(\frac{t}{2^j}\right) \quad (16)$$

The coefficients for the dyadic wavelet transform for $j > 0$ were given by,

$$dj[n] = Wf(n, 2^j) = \langle f(t), \psi_{2^j}(t-n) \rangle \quad (17)$$

así:

$$a_{j+1}[n] = a_j * \bar{h}_j[n] \quad d_{j+1}[n] = a_j * \bar{g}_j[n]$$

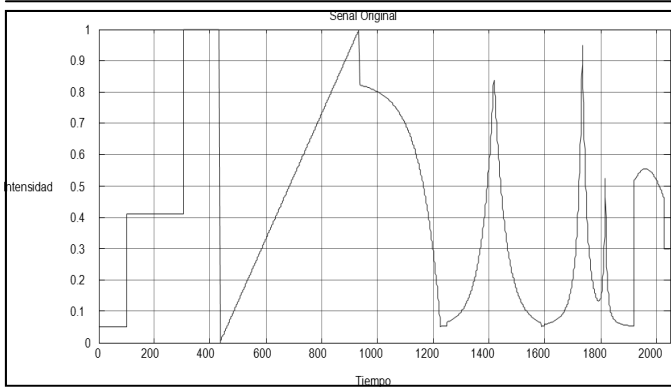
$$a_j[n] = \frac{1}{2}(a_{j+1} * \tilde{h}_j[n] + d_{j+1} * \tilde{g}_j[n]) \quad (18)$$

donde \tilde{g}_j , \tilde{h}_j , \bar{g}_j y \bar{h}_j son las bases o filtros utilizados en el cálculo de la wavelet. Para una derivación más detallada y ver su prueba, el lector interesado se puede referir a Mallat (2009) y Holshnecker et al. (1989).

Así que la representación de a_o se puede calcular con una cascada de convoluciones de complejidad computacional $O(N \log_2(N))$ equivalente a la complejidad de la transformada rápida de Fourier. Por esto el método descrito es conocido como transformada wavelet discreta rápida (Mallat, 2009).

Resultados y discusión

Para evaluar el desempeño de la técnica propuesta se generó una señal artificial con diferentes componentes temporales y frecuenciales. Esta señal se distorsionó agregando una señal con densidad de probabilidad de tipo gaussiano con media nula y varianza unitaria, como se puede apreciar en la figura 1.



then

$$a_{j+1}[n] = a_j * \bar{h}_j[n] \quad d_{j+1}[n] = a_j * \bar{g}_j[n]$$

$$a_j[n] = \frac{1}{2}(a_{j+1} * \tilde{h}_j[n] + d_{j+1} * \tilde{g}_j[n]) \quad (18)$$

where \tilde{g}_j , \tilde{h}_j , \bar{g}_j and \bar{h}_j were the basis or filters used to compute the wavelet transform. An interested reader can refer to Mallat, 2009, and Holshnecker et al., 1989, for a more detailed derivation and the proof of this.

A representation of a_o can be calculated with a convolution cascade whose computational complexity is equivalent to the complexity of FFT, i.e. $O(N \log_2(N))$. The method described is thus known as fast discrete wavelet transform (Mallat, 2009).

Results and Discussion

An artificial signal having different time and frequency components was generated to evaluate the proposed technique's performance. This signal was distorted by adding Gaussian noise with zero mean and unit variance, as shown in Figure 1.

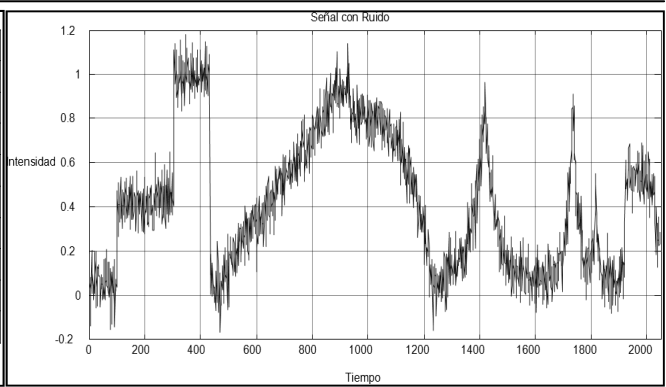


Figura 1. Señal original y ruidosa luego de agregar ruido blanco gaussiano.

Figure 1. Original signal and the same signal after adding white Gaussian noise

A esta señal se le aplicaron los filtros gaussiano, Wiener y wavelet ortogonal (Haar) usando umbral fijo. Los resultados obtenidos con los diversos filtros se ilustran en la figura 2.

This signal was filtered using Gaussian, Wiener and orthogonal wavelets (Haar) using a fixed threshold. The results obtained with these filters are shown in Figure 2.

Como se puede apreciar en la figura 2, la mejor relación señal a ruido es obtenida con el filtro Wiener. Además se observa que el resultado obtenido con la wavelet presenta mejores resultados que el filtro gaussiano, el cual fue implementado utilizando la transformada de Fourier con una ventana de ancho igual a 4, la cual aproxima la varianza unitaria. Un análisis más detallado de esta figura revela que en los resultados alcanzados con el filtro gaussiano los picos afilados aparecen ligeramente trasladados a la izquierda, mientras que Wiener y wavelet preservan su ubicación. En cuanto a la apariencia de la señal, la recuperada a partir de la wavelet es más suave; entre tanto, la que aparece con mayor variación es la obtenida con el filtro Wiener.

As shown in Figure 2, the best signal to noise ratio was obtained with the Wiener filter. The results obtained with the wavelet were better than those obtained with the Gaussian filter which was implemented using the Fourier transform with a window width equal to 4, approximating unit variance. A more detailed analysis of this figure revealed that sharp peaks were slightly shifted to the left in the results achieved with the Gaussian filter, while Wiener and fixed threshold wavelet preserved their location. Regarding signal appearance, the signal recovered from the wavelet was smoother while most variation was obtained with the Wiener filter.

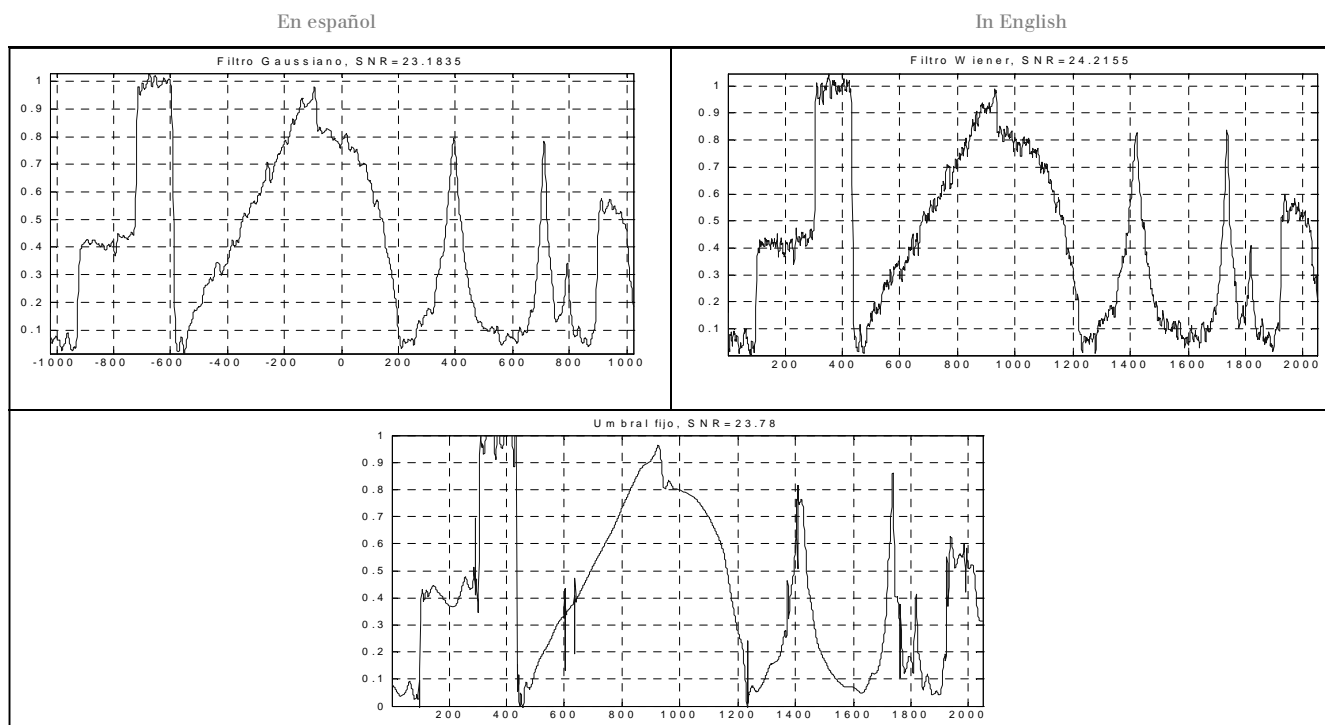


Figura 2. Resultados de filtrar la señal mostrada en la figura 1 con un filtro gaussiano (arriba, izquierda), su relación señal a ruido es de 23,1835; un filtro Wiener (arriba, derecha), su relación señal a ruido es de 24,2155; y una wavelet con umbral fijo (abajo), relación señal a ruido 23,78. Las unidades de los ejes son tiempo en s ante intensidad.

Figure 2. Results of filtering the signal shown in Figure 1 with a Gaussian filter (top-left) where the signal to noise ratio was 23.1835, a Wiener filter (top-right) where the signal to noise ratio was 24.2155 and a wavelet with fixed threshold (bottom) where the signal to noise ratio was 23.78. The units on the axes were time in s plotted against intensity.

La señal de la figura 1 también fue filtrada con una wavelet cíclica invariante a la traslación. La umbralización utilizada fue umbral fijo y el número de escalas 4.

The signal in Figure 1 was also filtered with a translation invariant cyclic wavelet. Fixed threshold was used and 4 scales.

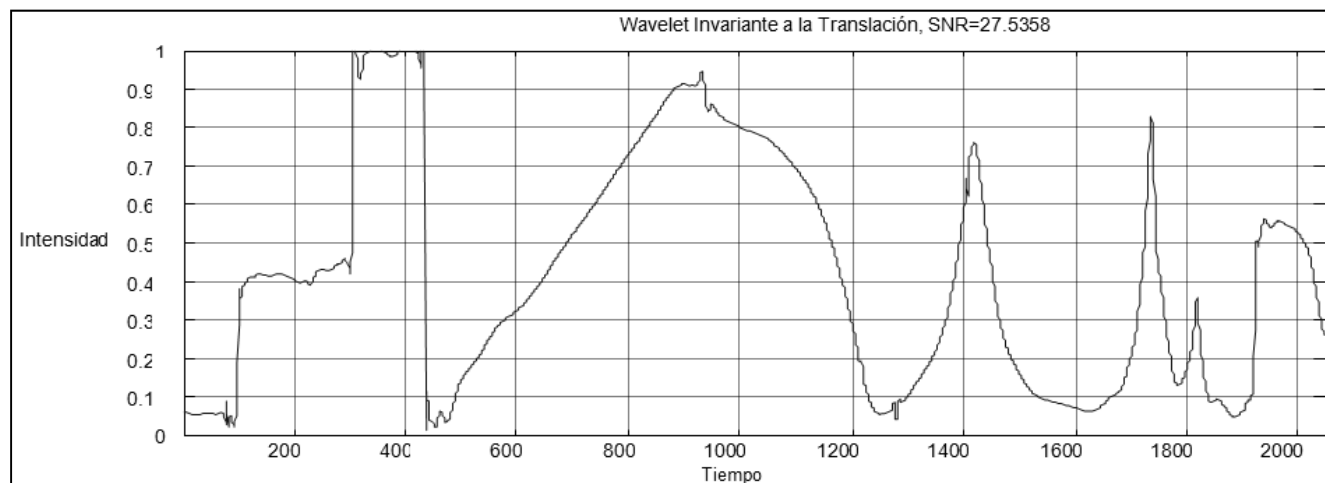


Figura 3. Resultado de filtrar la señal mostrada en la figura 1 con una wavelet invariante a la traslación, relación señal a ruido 27,5358.

Figure 3. Result of filtering the signal shown in Figure 1 with wavelet translation invariant, 27.5358 signal to noise ratio

La figura 3 muestra el resultado de filtrar la señal presentada en la figura 1 con una wavelet invariante aplicando el método descrito. Este resultado de la relación señal a ruido supera el obtenido con el filtro Wiener y la apariencia de la señal es mejor a la obtenida con la wavelet ortogonal. También se puede observar que los picos conservan su ubicación original. Para su filtrado se utilizó umbral fijo equivalente a 3σ , el cual provee excelentes resultados en el filtrado de ruido gaussiano (Mallat, 2009).

Figure 3 shows the result of filtering the signal presented in Figure 1 with an invariant wavelet by applying the described method. The resulting signal to noise ratio superseded that obtained with the Wiener filter and the appearance of the signal was better than that obtained with the orthogonal wavelet. It could also be observed that peaks retained their original location. The fixed threshold used for filtering was equivalent to 3σ which provided excellent results in filtering Gaussian noise (Mallat, 2009).

En español

In English

La tabla 1 muestra un resumen de los resultados obtenidos a partir de la señal simulada y las diferentes alternativas de filtrado. En la columna de la izquierda aparece el método empleado; en la siguiente columna, la relación señal a ruido de la señal filtrada y, finalmente, la columna de la derecha describe la apariencia de la señal filtrada.

Tabla 1. Resultados obtenidos a partir de una señal generada artificialmente y distorsionada agregando ruido blanco gaussiano.

	S/N	APARIENCIA
Gaussiano	23,1835	Rizado y picos desplazados
Wiener	24,2155	Rizado y picos en su lugar
Wavelet ortogonal	23,78	Poco rizado y picos en su sitio
Wavelet invariante	27,5358	Suave con picos en su sitio

En segundo lugar, la técnica propuesta, *wavelet* cíclica, fue probada en dos señales de luz, provenientes de un espectrofotómetro que utiliza una fuente de luz continua y otro que emplea una fuente de radiación láser. La sustancia de estudio fueron muestras de sangre previamente tratadas con marcadores que se fijan a la parte proteica, incrementando así la absorción de radiación. Los resultados se ilustran en las figuras 5 y 6, respectivamente. Como se puede apreciar, la señal filtrada preserva, en gran medida, las características de la señal original. La ubicación de los picos se puede ver mejor en la señal proveniente del espectrofotómetro con fuente de radiación continua, mientras que los componentes de baja frecuencia se observan mejor en la señal proveniente del espectrofotómetro con fuente de luz láser.

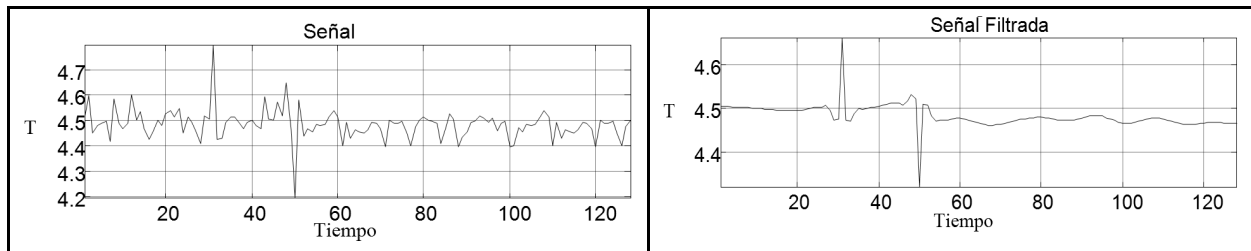


Figura 5. Señal proveniente de un espectrofotómetro que utiliza una fuente de luz continua (arriba) y la misma señal luego de ser filtrada con la *wavelet* invariante a la traslación (abajo).

Table 1 summarises the results obtained from simulated signal and filtering the different alternatives. The method used is shown in the left-hand column, the SNR of the filtered signal in the middle and the right-hand column describes the filtered signal's appearance.

Table 1. Results obtained from an artificially-generated signal and distorted by adding Gaussian white noise

	S/N	APPEARANCE
Gaussian	23.1835	Ripple and displaced peaks
Wiener	24.2155	Ripple and spikes in place
Orthogonal wavelet	23.78	Little ripple and spikes in place
Invariant wavelet	27.5358	Smooth and spiked in place

The cyclic wavelet (i.e. the proposed technique) was tested in two light signals coming from a spectrophotometer which used a continuous light source and another that used a laser radiation source; the test substance consisted of blood samples pre-processed with markers attached to a protein, thereby enhancing radiation absorption (results are illustrated in Figures 5 and 6, respectively). As can be seen, the filtered signal preserved original signal characteristics to a large extent. The location of the peaks can be seen best in the signal from the spectrophotometer having continuous radiation source, while the low frequency components were best appreciated in the signal from the spectrophotometer having a laser light source.

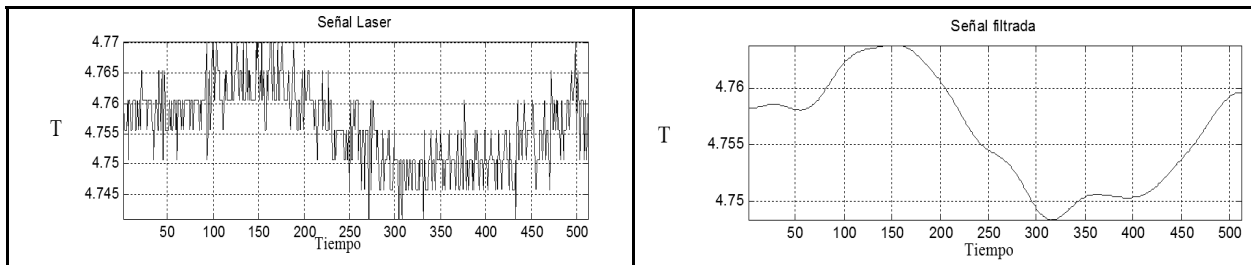


Figura 6. Señal proveniente de un espectrofotómetro láser (arriba) y la misma señal luego de ser filtrada con la *wavelet* invariante a la traslación (abajo).

Figure 5. Signal from a spectrophotometer that used a continuous light source (above) and the same signal after being filtered using the translation invariant wavelet (below)

Figure 6. Signal from a laser spectrophotometer (top) and the same signal after being filtered through the translation invariant wavelet (below).

Conclusiones

Se presentó y demostró en este trabajo la aplicabilidad de las transformada *wavelet* invariante a la traslación en el filtrado de señales de luz provenientes de espectrofotómetros. Esta técnica maximiza la relación señal a ruido en comparación con los filtros gaussiano, Wiener y *wavelet* ortogonal con umbral fijo, lo cual

Conclusions

This paper has shown the applicability of translation invariant wavelet transform in filtering light signals from spectrophotometers. This technique was shown to maximise the signal to noise ratio compared to Gaussian, Wiener and orthogonal wavelet filters using a fixed threshold. These improvements lead to better

permitirá y conducirá a mejorar la calidad de los resultados en las mediciones realizadas con el espectrofotómetro.

El espectro de una sustancia es como su huella dactilar, por eso preservar la ubicación, el alto y el ancho de los picos espectrales, es de suma importancia. En análisis espectrofotométrico, inevitablemente, los espectros están afectados por ruido. Las técnicas de filtrado muestran ventajas y desventajas en la remoción de este; sin embargo, una mirada de cerca a los resultados obtenidos con *wavelets* revelan un desempeño superior en el filtrado de señales provenientes de espectrofotómetros dado que preservan las características de los picos espectrales de la señal original.

Aunque la relación señal a ruido no difiere mucho entre los resultados obtenidos con el filtro gaussiano y *wavelet* ortogonal, esta última es preferida por su mayor relación señal a ruido, en comparación con el filtro gaussiano, especialmente porque no modifica la ubicación de las singularidades de la señal original, lo que hace atractivas las *wavelets* en el campo de la espectrofotometría.

El filtrado con *wavelets* invariantes a la traslación presenta la mayor relación señal a ruido y su implementación por medio de la transformada *wavelet* discreta rápida requiere $O(N \log_2(N))$ operaciones, lo que la hace más atractiva que la *wavelet* de giro cíclico, la cual demanda $O(N^2)$ operaciones. La complejidad computacional de la transformada *wavelet* invariante rápida es comparable con la transformada rápida de Fourier.

Las ventajas derivadas de la aplicación de esta técnica en espectrofotometría conducirán a un análisis automatizado del espectro, permitirán comprender las limitaciones experimentales de la técnica y llevarán a un estudio cuantitativo de la variación de la concentración de sustancias biológicas en enfermedades relacionadas. Así, el trabajo futuro se enfocará en dos direcciones: analizar la relación señal a ruido en barridos espectrales más amplios y cuantificar la concentración de sustancias presentes en las muestras.

Agradecimientos

Rubiel Vargas agradece a la Universidad del Cauca por el apoyo durante la ejecución de este trabajo.

Referencias / References

- Arizmendi, C., Hernández-Tamames, J., Romero, E., Vellido, A., del Pozo, F., Diagnosis of brain tumours from magnetic resonance spectroscopy using wavelets and Neural Networks., Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC), 2010.
- Barnard R., Modeling Background Noise for Denoising in Chemical Spectroscopy., Department of Mathematics., Louisiana State University, 2009.
- Cancino-De-Greiff H.F., Ramos-García R., Lorenzo-Ginori J.V., Signal de-noising in magnetic resonance spectroscopy using wavelet transforms., Wiley Periodicals, Inc. Vol 14, No. 6, 2002, pp 388-401.
- Cuesta F.D., Novák D., Pérez Cortés J.C., Andréu García G., Eck V., Sastre Mengual C., Llorca Alcón M., Reducción del ruido en señales electrocardiográficas mediante la transformada Wavelet., CASEIB2000., Congreso Anual de la Socie-

quality results regarding measurements made with a spectrophotometer.

A substance's spectrum is like its signature; therefore, preserving spectral peak location, height and width is of the utmost importance. Spectra are inevitably corrupted by noise in spectrophotometric analysis. Filtering techniques have advantages and disadvantages regarding the removal of such noise, but a closer look at the results obtained with wavelets revealed superior performance in filtering signals from spectrophotometers as they preserve a signal's original spectral peak characteristics.

Although the signal to noise ratio did not differ much between the results obtained with the Gaussian filter and orthogonal wavelet, the latter was preferred for its higher signal to noise ratio compared to the Gaussian filter, especially because it did not modify the location of a signal's original singularities thus making wavelets attractive in the field of spectrophotometry.

Translation invariant wavelet filtering had the highest signal to noise ratio, and its implementation through fast discrete wavelet transform required $O(N \log_2(N))$ operations, making it more attractive than the cyclically turning wavelet which required $O(N^2)$ operations. Invariant wavelet transform's computational complexity was comparable to fast Fourier transform.

The benefits of applying this technique to spectrophotometry lead to an automated analysis of the spectrum and better understanding of the technique's experimental limitations. They may also lead to a quantitative study of variation in the concentration of biological substances related diseases. Thus, future work will focus on analysing the signal to noise ratio using a wider spectrum range and quantifying the concentration of biologic substances present in a sample.

Acknowledgements

Rubiel Vargas would like to thank the Universidad del Cauca for supporting this work.

dad Española de Ingeniería Biomédica., 2000.

- Gao J.B., Yang H., Hu X.Y., Hu D.C., Maximal entropy principle wavelet denoising., Actas en Química china. Vol.21, No. 5, 2001, pp. 620-2.
- Qingwei, G. Zhaoqi, S., Zhuoliang, C., Pu C., De-noising of Raman spectrum signal based on stationary wavelet transform., Chinese Optics Letters, Vol. 2, 2004, pp. 113-115.
- Gao, L., Shouxin R., Simultaneous multicomponent analysis of overlapping spectrophotometric signals using a wavelet-based latent variable regression., Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, Volume 71, Issue 3, 1, 2008, pp. 959-964.
- García, H. A., Ramírez, J.F., Método Basado en Redes Neuronales Wavelet para Eliminar Ruido en Espectros Estelares., V Taller de Minería de Datos y Aprendizaje, (TAMIDA '07),

En español

- 2007.
- Gonzalez, R., Woods, R., Eddins S., Digital Image Processing Using Matlab., (ed.), Prentice Hall., 2004.
- Holshneeder, M., Kronland-Marlinet, R., Marlet, J., Tchamitchian, P., Wavelets, Time-Frequency Methods and Phase space, chapter A real time Algorithm for signal Analysis with the Help of the Wavelet Transform., Springer-Verlag Berlin, 1989, pp. 289-297.
- Duan, H., Gautam, A., Shaw, B.D., Cheng, H.H., Harmonic wavelet analysis of modulated tunable diode laser absorption spectroscopy signals., Applied Optics, Vol. 48, Issue 2, 2009, pp. 401-407
- Berry, R.J., Ozaki, Y., Comparison of Wavelets and Smoothing for Denoising Spectra for Two-Dimensional Correlation Spectroscopy., Applied Spectroscopy. Vol. 56, 2002, pp. 1462-1469.
- Haller, K., Hobbs, P., Double Beam Laser Absorption Spectroscopy: Shot Noise-Limited Performance at Baseband With A Novel Electronic Noise Canceller., Optical Methods for Ultrasensitive Detection and Analysis., Techniques and Applications., SPIE, Vol. 1435, 1991.
- Li-Yinglang, Na Cai, The Study on Wavelet De-noising in Terahertz Time-Domain Spectroscopy., International Conference on Information Technology and Computer Science, Vol. 1, 2009, pp. 618-621.

In English

- Mallat, S., A Wavelet Tour of Signal Processing., The sparse way, Elsevier inc, London, 2009.
- Oppenheim, A.V., Willsky, A.S., Señales y Sistemas. (ed.) Prentice Hall, 2ª ed., 1998.
- Portal virtual Universidad Nacional de Colombia, Ondas Electromagnéticas., <<http://www.virtual.unal.edu.co/cursos/>>, consultado Noviembre 2007.
- Posú, Á., Landrove, M.M., Desarrollo de mapas metabólicos mediante espectroscopia in vivo con resonancia magnética., Ciencia, Vol. 16, No. 2, Inc., 2008, pp. 210-214.
- Rioul, O., Vetterli, M., Wavelets and signal processing., IEEE SP Magazine, 1991, pp14-38.
- Schuck, A., Lemke, C., Suvichakorn, A., Antoine, J.-P., Analysis of Magnetic Resonance Spectroscopic signals with data-based autocorrelation wavelets., Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC), 2010
- Trbovica, N., Danceaa, F., Langerb, T., Güntherc, Ulrich., Using wavelet de-noised spectra in NMR screening., Journal of Magnetic Resonance, Volume 173, Issue 2, 2005, pp. 280-287.
- Valea, P.Á., Giron, A., Radiación Infrarroja y Ultravioleta., Mc Graw Hill, 1ª ed., Santa fé de Bogotá, 1998.