

doi: 10.3788/gzxb20154406.0630001

小波变换与高斯拟合在光谱重叠峰解析中的应用

冯飞, 王府北, 谢非, 吴琼水, 曾立波

(武汉大学 电子信息学院, 武汉 430072)

摘 要: 利用小波变换对小波低频系数置零、高频系数阈值量化, 实现了光谱信号的基线校正和谱线去噪; 对光谱信号进行多尺度小波变换, 搜寻各层小波系数模极值所构成的脊线, 并对其中复合脊线进行校正, 脊线中小波尺度参量最大时所对应的位置即为峰位; 根据得到的峰位值, 在最小二乘意义下寻找由多个单峰高斯函数叠加而成的最佳拟合光谱, 得到谱峰峰强以及峰宽信息. 利用该算法对含有基线漂移和随机噪声的光谱重叠峰进行解析, 结果表明该算法能够较好地分离重叠峰, 其中利用多尺度小波变换求解得到的峰位值偏差在 ± 1.3 以内, 通过高斯拟合得到的峰强值偏差不超过 8.5%. 与现有算法求解得到的谱峰信息对比可知, 本文所设计的光谱重叠峰解析算法具有一定优势.

关键词: 小波变换; 重叠峰解析; 基线漂移校正; 重叠光谱; 随机噪声; 高斯拟合

中图分类号: TH744.1

文献标识码: A

文章编号: 1004-4213(2015)06-0630001-6

Implementation of Spectral Overlap Resolution Based on Wavelet Transforms and Gaussian Fitting

FENG Fei, WANG Fu-bei, XIE Fei, WU Qiong-shui, ZENG Li-bo

(Electronic Information School, Wuhan University, Wuhan 430072, China)

Abstract: Aiming at the problems of spectral overlap peaks, wavelet transforms was used, by setting the low-frequency wavelet coefficients to zero and thresholding the high-frequency coefficients, baseline-drift correction and spectral denoising were completed simultaneously. The ridge lines posed by modulus maxima of wavelet coefficients were searched by multi-scale wavelet transforms, and the composite ridge lines were corrected. The peak position was corresponding to the position of the maximum scale parameter in the wavelet ridge lines. According to the obtained peak values, the least squares rule was used to find out the best-fit spectra which was superimposed by multiple unimodal Gaussian functions, thus, the intensity and width information can be carried out. Finally, method was applied to resolve overlapping spectrum containing composite baseline-drift and random noise, the results showed that the algorithm can separate these overlapping peaks very well, the deviation of peak position calculated by multi-scale wavelet transforms was within ± 1.3 , and the deviation of peak intensity fitted by Gaussian functions was no more than 8.5%. Comparing with the peak information obtained by existing mature algorithm, to some extent, the proposed spectral overlap resolving algorithm is superior.

Key words: Wavelet transforms; Spectral overlap resolution; Baseline-drift removal; Spectral overlap; Random noise; Gaussian fitting

OCIS Codes: 300.6340; 350.5730; 350.6980; 120.4640

0 引言

在光谱分析中, 由于原子发射光谱存在大量谱线, 峰位相近且峰宽较大的不同谱峰可致谱带间产生光谱

重叠, 对后续分析产生不利影响^[1-2]. 现阶段, 重叠峰解析主要从两方面展开, 一是不断提高仪器的分辨率、改进实验方法和条件; 二是通过数值方法对光谱信号加以处理^[3]. 在采集光谱数据时, 信号中存在由于各种原

基金项目: 国家科技支撑计划课题(No. 2011BAF02B02)资助

第一作者: 冯飞(1990—), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为光谱信号处理. Email: fungphei@whu.edu.cn

导师(通讯作者): 吴琼水(1977—), 男, 副教授, 博士, 主要研究方向为光谱与成像分析仪器开发. Email: qswu@whu.edu.cn

收稿日期: 2014-12-22; 录用日期: 2015-03-05

<http://www.photon.ac.cn>

因所产生的噪声信号^[4],受仪器背景、样品颗粒度等因素的影响,谱线会出现基线漂移^[1],噪声和基线漂移都会影响重叠峰的解析.重叠峰解析主要分为谱线去噪、基线校正和谱峰解析.利用时频域进行信号分析的小波变换^[5]是近年来谱峰解析领域中的研究热点.薛泽春等人利用小波变换对光谱信号进行去噪^[6];蔡涛等人利用小波变换实现了光谱谱峰的基线校正^[7];陈鹏飞等人建立了以小波变换为基础的激光诱导击穿光谱(Laser-induced Breakdown Spectroscopy, LIBS)自动寻峰算法,算法中阐述了复合脊线的校正^[8];张磊等人利用小波变换对重叠化学信号进行解析^[9].利用小波变换可以极大地减小或去除所提取的不同特征之间的相关性^[3],对光谱信号的噪声和基线漂移进行同时去除和校正,提高光谱信号的处理效果.利用通过改变小波变换的伸缩因子可以进行信号局部化分析的优点^[5],对光谱信号进行多尺度变换,寻找小波系数的模极值及对应尺度参量,连接各尺度模极值的位置形成脊线,并对复合脊线进行校正,根据脊线的位置得到谱线的谱峰数及峰位值.

作为重叠峰解析的一个重要手段,曲线拟合是在最小二乘意义下寻求由多个单峰叠加而成的最佳拟合谱.通常用单峰高斯函数、双峰高斯函数及他们的组合函数来拟合光谱谱峰^[3].胡耀埃等人利用高斯拟合实现光谱重叠峰的解析^[3],其中谱峰数量和峰位值取决于参量可分离最小峰——峰间距的设定.张建华等人利用 Origin 软件进行高斯多峰拟合测定物质浓度时,重叠峰的解析准确度依赖于谱峰峰数这一参量^[10].参量的选取影响着这些方法^[3,10]对重叠峰解析的准确度.本文利用高斯函数并结合通过小波变换得到的峰位数及峰位值对谱峰进行拟合,求解谱峰的峰强、峰宽等信息.

1 含有噪声和基线漂移的光谱模拟

一般光谱曲线按照高斯函数规律成型^[11-12],因此本文模拟 6 个高斯峰、随机噪声以及基线漂移所叠加的光谱信号 $F(k)$.

$$F(k) = f(k) + g(k) + e(k) \quad (k=1, 2, \dots, 300) \quad (1)$$

式中, $f(k)$ 为纯光谱仿真信号, $g(k)$ 为基线, $e(k)$ 为噪声信号, 记 $N_G(k)$ 为随机噪声, 则有

$$\begin{cases} f(k) = 5e^{-(k-50)^2/2 \times 3^2} + e^{-(k-100)^2/2 \times 2^2} + 2e^{-(k-150)^2/2 \times 6^2} + \\ 2e^{-(k-160)^2/2 \times 6^2} + e^{-(k-230)^2/2 \times 6^2} + 1.5e^{-(k-250)^2/2 \times 8^2} \\ g(k) = 0.005 + 0.005k + (0.001k)^2 \\ e(k) = 0.05 \times N_G(k) \end{cases} \quad (2)$$

含有噪声和基线漂移的光谱信号如图 1. 从图 1 可以看出, 所得到的光谱信号含有二个完全独立峰(峰 1 和峰 2, 峰位分别为 50 和 100)、二个完全重叠峰(峰 3 和峰 4, 峰位分别为 150 和 160)、二个部分重叠峰(峰 5

和峰 6, 峰位分别为 230 和 250).

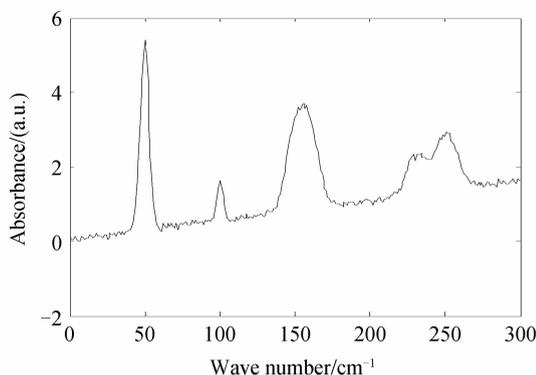


图 1 模拟光谱

Fig. 1 Simulated spectrum

2 原理与实证分析

为了验证本文提出的利用小波变换与高斯拟合相结合进行谱峰解析算法的有效性, 对模拟光谱进行实证分析. 所有程序均在 MATLAB 2012B (Wavelet Toolbox 4.10) 上自行开发完成.

2.1 小波变换及小波系数描述

与傅里叶变换相似, 小波变换将信号分解成一系列小波函数的叠加. 法国学者 S. Mallat 提出的快速离散小波变换算法描述为

$$f(t) = \sum_{k \in Z} c_{J,k} \varphi_{J,k}(t) + \sum_{j=1}^J \sum_{k \in Z} d_{j,k} \psi_{j,k}(t) \quad (3)$$

其中高频部分 $d_{j,k}$ 表示 $f(t)$ 在第 j 个频段上的第 k 个

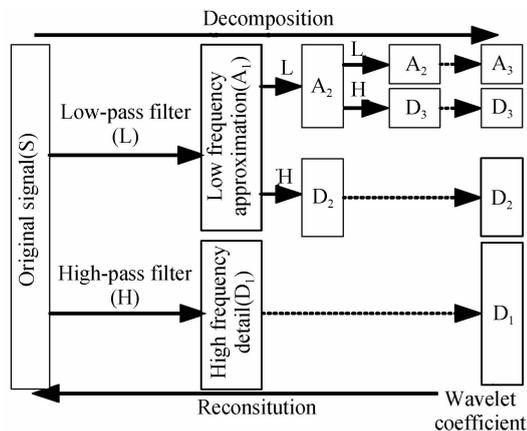


图 2 小波变换 Mallat 算法(以分解三层为例)

Fig. 2 Mallat wave transform algorithm (three layers)

时段的分量 ($1 \leq j \leq J$), 而低频部分 $c_{J,k}$ 表示 $f(t)$ 在 $J+1$ 个频段上的第 k 个时段的分量^[5,13]. 小波变换的 Mallat 算法示意图如图 2 所示.

2.2 小波变换实现谱线光滑与基线校正

现阶段小波消噪算法包括模极大值小波消噪、小波低频系数重构法以及 Donoho 提出的基于阈值的消噪方法^[4]. 由于小波模极大值消噪算法比较复杂, 而小波低频系数重构法将高频系数全部滤除, 容易丢失信号的有用成份^[4,13], 因此本文采用基于阈值的消噪

方法.

利用基于阈值的去噪^[6]一般分为三个步骤

1)信号的小波分解:选择一个小波并确定分解层数,然后进行分解运算;

2)小波分解高频系数的阈值化处理:对各个分解尺度下的高频系数选择一个阈值进行量化处理;

3)小波重构:根据小波分解的最底层低频系数和各层高频系数进行小波重构.

基于阈值的小波去噪法参量的选取主要包括小波基与分解层数的选取以及高频系数阈值处理.最为关键的是高频系数的阈值消噪处理,某种程度上,它关系到信号去噪的质量.

基线漂移干扰主要集中在小波分解的低频系数中,而光谱信号则分布在高频系数中.因此可以利用二者分布的频段不同将低频系数置零^[13],实现基线校正.此过程参量的选取主要包括小波函数和分解层数的选取.

在进行谱线去噪与基线校正时,小波分解层数越大,噪声去除越多,基线保留也越多.此过程需要达到的目标为保障重构信号与纯谱线整体上逼近以及特征峰处局部逼近,即谱线中噪声残留少且有用部分损失少.

2.2.1 小波函数的选取

基于阈值的小波去噪是对高频小波系数进行处理,而利用小波变换进行基线校正是对小波系数的低频系数进行处理,对于谱线噪声消除以及基线校正应选取相同的母小波函数,以便二者的小波分解与小波重构可以同步进行.

Daubechies 小波具有紧支、正交、连续等优点^[4], Symlets 小波的构造类似于 Daubechies 小波,二者的差别在于 Symlets 小波具有更好的对称性,能够减少重构时的相移,因此本文选取 Symlets 小波族.

图 3 为在相同的分解层数(8层)下不同的 Symlets 小波系(sym6~sym9)对光谱信号进行噪声去除和基线校正后的重构信号.采用 sym6 和 sym7 小波函数进行噪声去除和基线校正后的重构信号扣除了较

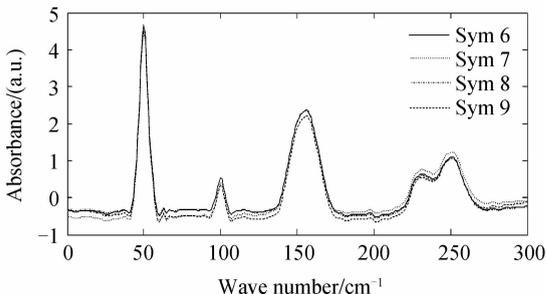


图 3 光谱信号在分解层数为 8 时经不同小波处理后的重构信号
Fig. 3 Reconstructed signal processed by different wavelets with the decomposition level of 8

多的谱峰信息,导致重构信号谱峰峰强比实际值小, sym9 小波对噪声的去除和基线校正不够,保留了较多的背景信息.因此,本文选择既能有效保留光谱信号中的有用信息,又能较好去除噪声和基线的 sym8 小波.

2.2.2 小波分解层数的选取

在确定小波函数之后,需要对小波分解层数加以优化,过多的分解层数导致重构信号中含有较多的噪声信号和基线等背景信息,过少的分解层数使得小波低频部分含有较多的光谱信息,重构信号被过多的消除.

图 4 给出了利用 sym8 小波函数、分解层数为 6~9 对光谱信号进行噪声去除和基线校正后得到的重构信号.从图 4 中可以直观地看出,分解层数为 6 时在 70~100 范围出现伪峰,分解层数为 9 时,重构信号仍然存在一定的基线漂移.因此,最为合适的分解层数为 7 层或者 8 层.本文选取小波分解层数为 8 层.

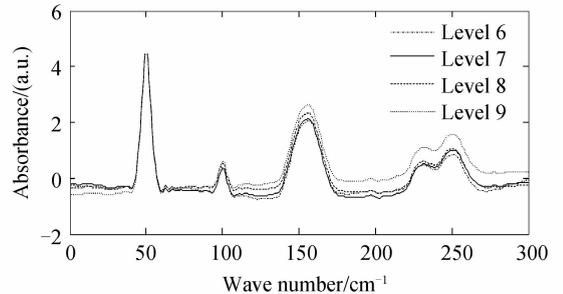


图 4 信号在同一小波下经不同分解层数处理的重构信号
Fig. 4 Reconstructed signal processed by same wavelet with different decomposition level

2.2.3 阈值的选取

小波变换用于光谱消噪的关键步骤在于如何对每层小波系数选择阈值处理得到消噪后系数.确定阈值的方法主要有:基于 Stein 无偏似然估计(SURE)的软阈值估计(Rigrsure)、长度对数阈值(Sqtwolog)、启发式 SURE 阈值(Heursure)以及最小极大方差阈值(Minimaxi)等.

当信号中的噪声较小时常采用 Minimaxi 和 Rigrsure 法进行阈值估计,能够有效保留信号中的有用部分,相比之下 Heursure 和 Sqtwolog 法则能够更有效地去除噪声^[13]. Heursure 法是 Rigrsure 与 Sqtwolog 的综合形式,当利用基于 SURE 产生的阈值在高信噪比情况下抑制噪声的效果不明显时,Heursure 法将在 Rigrsure 法和 Sqtwolog 法中选择其中一个.本文采用 Heursure 法确定阈值进而对小波高频系数进行阈值化消噪处理.

2.2.4 重构信号

在小波函数为 sym8、分解层数为 8 层、高频系数阈值化方法为 Heursure 条件下,去除噪声和基线漂移后的光谱信号如图 5.

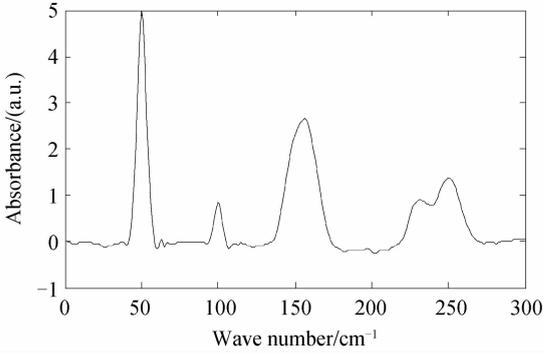


图5 利用小波变换得到的去除噪声和基线校正后的光谱信号
Fig.5 Spectra signal after denoising and baseline correction

从图5中可以看出,含有随机噪声和基线漂移的光谱信号经过 sym8 小波 8 水平分解,将小波低频系数置零高频系数阈值化并重构,重构的光谱信号较好地实现了基线校正和谱线去噪.算法具有一定的通用性,适合多类型的基线校正和噪声去除.

2.3 多尺度小波变换实现谱峰检测

在信号进行小波变换时,小波系数矩阵 C 的每一行与原始光谱信号存在着对应关系,即小波系数中的峰位相对位置不变,因此,经过连续小波变换之后,时域内谱线寻峰转换为对小波系数矩阵的寻峰.

用尺度参量 s 对 $\psi(t)$ 作伸缩得到函数 $\psi_s(t) = s^{-1}\psi(x/s)$,与信号 $f(t)$ 作小波变换,其卷积形式为

$$C(s, t) = f(t) * \psi_s(t) = \frac{1}{s} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \psi\left(\frac{t-x}{s}\right) dx \quad (4)$$

可以证明^[14],若 $\psi(t)$ 具有 n 阶消失矩且是紧支的,则 $\psi(t) = (-1)^n d^n \theta(t)/dt^n$, $\theta(t)$ 为紧支集函数,且 $\int_{-\infty}^{+\infty} \theta(t) dt \neq 0$.由此光谱信号 $f(t)$ 的小波变换可以表示为

$$\begin{cases} C(s, t) = f(t) * \psi_s(t) = s^n \frac{d^n [f(t) * \bar{\theta}_s(t)]}{dt^n} \\ \bar{\theta}_s(t) = \frac{1}{s} \theta\left(\frac{-t}{s}\right) \end{cases} \quad (5)$$

从式(5)可以看出,具有 n 阶消失矩的小波,其对应小波变换相当于 n 阶多尺度微分算子,当 $n=1$ 时,对信号 $f(t)$ 进行小波变换的模极大值点或者零点即是信号 $f(t)$ 经 $\bar{\theta}_s(t)$ “光滑”后的一阶导数极大值点或零点^[14].搜寻小波变换系数的模极大值点或过零点,可以检测出信号中的突变点及其性质.在光谱分析技术中,信号的突变点对应着谱线中的顶点、谷点以及拐点等特征点位置.

2.3.1 参量选取与优化

为了对谱线中不同峰宽的谱峰进行检测,需要选取多个尺度参量,考虑尺度参量范围以及尺度间隔.尺度参量过小会影响准确度,过大会增加计算量,文献[7]指出尺度参量的最大值应为光谱信号中最大半峰宽的 2.5 倍~3 倍;而尺度参量的最小值则与信号中

弱峰半峰宽有关,取值越小检测到弱峰的能力就越强.当数值区间一定时,较小的尺度间隔需要较多的尺度参量,会增强弱峰和重叠峰的识别能力;较大的尺度间隔需要的尺度参量较少,能够提升运算效率.在母小波函数的选取上,需要考虑函数的对称性以及波形.对称小波能够减少重构时的相移,有效抑制谱图背景信息,同时,母小波图形要尽量与被寻峰峰形相似.本文选择 Mexh 函数作为母小波,其描述式为

$$\begin{cases} \psi(x) = \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\pi^{-1/4}\right)(1-x^2)e^{-x^2/2} \\ x = \frac{t-b}{a} \end{cases} \quad (6)$$

利用 Mexh 作为小波函数对去除噪声和基线漂移后的光谱信号进行小波变换,小波变换的尺度参量为 1 至 20,尺度间隔为 1.图6为运算得到部分小波系数.

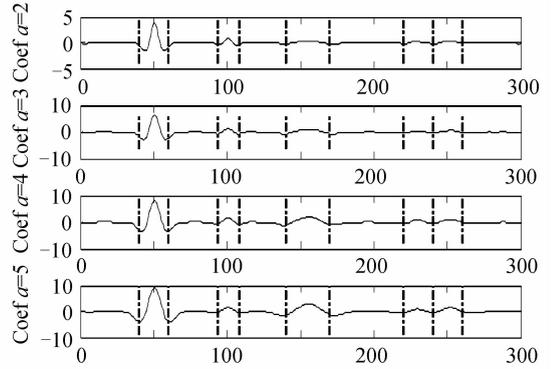


图6 各尺度小波系数在谱线突变位置存在模极大值
Fig.6 Wavelet coefficients have modulus maxima in the mutation position

从图6中可以看出,当光谱信号发生突变时,各尺度小波系数具有相应的模极大值,同尺度相邻的模极大值连接而成的脊线收敛于谱峰位置.因此可以通过搜寻各尺度小波系数模极大值的位置得到谱峰位置.

2.3.2 寻峰方法

首先定义小波系数矩阵 C 各行局部模极大值,各尺度系数模极大值应满足大于等于其前后 2 个小波系数的模值.

然后在小波系数矩阵中寻找脊线,在最大尺度上,以第一个局部模极大值点所在的位置为始端进行描点,同时计空缺参量 $g=0$,连接到下一尺度小波系数模极大值点所在的位置,若下一尺度小波系数在该位置 3 个点附近不存在模极大值时, g 值加 1,当 $g>3$ 时,认为该条脊线不成立.若出现新的模极大值点则应重新描点建立新的连线.

在获取脊线时会出现复合脊线,设 C_0 尺度下获得某条脊线的位置为 P_0 ,其前一条脊线和后一条脊线的位置分别用 P_{-1} 和 P_1 表示,若

$$|P_0 - P_{-1}| \geq 2.1 \times C_0 \text{ 或 } |P_0 - P_1| \geq 2.1 \times C_0, \text{ 则 } P_0 \text{ 所在的脊线为复合脊线}^{[7]}.$$

当存在复合脊线时,得到谱峰峰位将存在偏差,因此须进行脊线校正. 校正方法如下:将 P_0 所在的复合脊线按照尺度大小依次找出极大值 P' 及其对应分解尺度 C' ,若 $|P' - P_{-1}| \geq 2.1 \times C'$ 或 $|P' - P_1| \geq 2.1 \times C'$ 不满足,则将该值剔除,否则停止迭代. 重复该过程,直到脊线和尺度不再发生变化.

最后根据脊线位置确定谱峰峰位. 搜索得到的脊线都代表一个谱峰,其位置为脊线中小波尺度参量最大时所对应的位置. 表 1 给出了利用多尺度小波变换得到峰位值与实际峰位置对比.

表 1 利用多尺度小波变换得到峰位值

Table 1 Peak position value obtained by multi-scale wavelet transform

Number	True value	Fitted value	Residual
1	50	50.014	0.014 0
2	100	100.031	0.031 0
3	150	149.067	-0.933 0
4	160	158.977	-1.023 0
5	230	230.342	0.342 0
6	250	249.617	-0.383 0

从表 1 中可以看出,利用小波变换对光谱信号进行噪声去除和基线校正后的重构信号,经多尺度小波变换寻峰得到的 6 个高斯峰峰位均非常接近实际值,这表明利用 sym8 小波在 8 水平分解下对光谱信号进行噪声去除和基线校正有效的. 同时还表明,对重构信号进行多尺度小波变换,通过搜寻小波系数模极值来确定峰位信息的算法是可行有效的.

2.4 高斯函数谱峰拟合

高斯多峰拟合是光谱解析中常用的方法之一^[15]. 单峰高斯函数的表达式为

$$g_{u,\sigma}(t) = Ae^{-2(t-u)^2/\sigma^2} \quad (7)$$

式中 u, A, σ 分表表示峰位、峰强和峰宽参量. 实际谱线 $f(t)$ 是由若干个单峰叠加而成的,其拟合谱线 $f'(t)$ 为

$$f'(t) = \int_a^b g_{u,\sigma}(t) dt = \int_a^b Ae^{-2(x-u)^2/\sigma^2} dt \quad (8)$$

根据利用多尺度小波变换得到的谱峰峰位,寻找在最小二乘意义下的最优拟合谱线,如图 7,原始谱图

与高斯拟合谱图的残差如图 8,其中最大残差为 -0.258 ,最小残差为 2.521×10^{-4} .

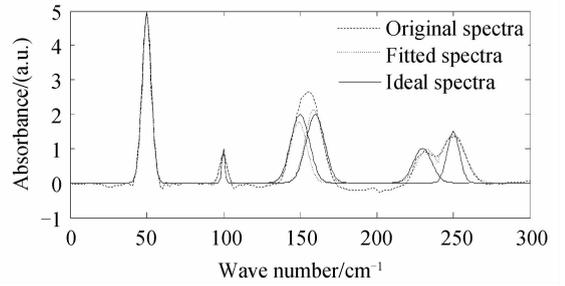


图 7 利用高斯函数对谱峰进行拟合

Fig. 7 Spectral peaks fitting with Gaussian function

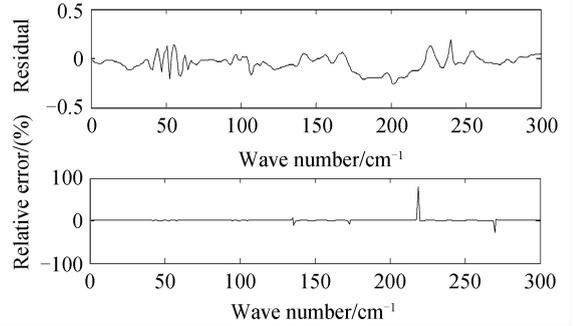


图 8 拟合光谱与原始光谱拟合误差曲线

Fig. 8 The error curve of fitting spectrum and original spectrum

3 对比分析

将仿真得到含有噪声和基线漂移的光谱信号导入到 Origin8.0 中,去除背景信息后采用高斯函数进行多峰拟合. 拟合结果如表 2,表中拟合值 #1 为利用本文所设计算法得到的结果,拟合值 #2 为利用 Origin8.0 得到的结果.

从表 2 可以看出,利用多尺度小波变换确定峰位,再由高斯函数进行谱峰拟合,能够较好地对重叠峰进行解析. 从结果中可以看出,在峰位、峰强和峰宽三个指标中峰位的拟合准确度最高,其次是峰强. 峰 1 和峰 2 为完全独立峰,其三个指标的拟合值误差最小,具有部分重叠的峰 5 和峰 6 次之,完全重叠的峰 3 和峰 4,

表 2 谱峰信息实际值与拟合值对比

Table 2 Peak information comparison between true values and fitted values

Number	1	2	3	4	5	6	
True value	50	100	150	160	230	250	
Peak position	Fitted value #1	50.014	100.031	149.067	158.977	230.342	249.617
	Fitted value #2	49.975	100.03	148.38	158.39	230.41	250.18
Peak intensity	True value	5	1	2	2	1	1.5
	Fitted value #1	4.9164	0.9472	1.8303	1.9674	0.9616	1.3876
	Fitted value #2	4.94171	0.91561	1.84314	2.07866	0.94169	1.45185
Peak width	True value	3	2	6	6	6	8
	Fitted value #1	2.9133	2.2204	5.4272	5.8712	5.7927	6.8973
	Fitted value #2	3.1558	2.5016	5.7256	5.8636	5.5855	7.9510

其三个指标的拟合准确度最差。

在峰位的求解中,利用本文算法得到的结果除峰6外,其余五个峰位的拟合结果均优于利用 Origin 软件求解结果;同时对于峰强的求解,除峰1和峰6外,本文算法得到的峰强结果优于 Origin 软件求解结果;同理,在峰宽信息的求解中,峰1、峰2、峰4和峰5峰宽的 Origin 求解效果差于利用本文算法的求解效果。

利用本文算法得出来的部分些谱峰信息效果虽然不如利用 Origin 软件求解的效果,但是二者的求解结果差别较小。综合分析,本文设计的算法较之现有成熟算法具有一定优势。

4 结论

本文详细阐述了利用小波变换与高斯函数拟合进行光谱重叠峰解析的算法。首先利用小波变换同时去除谱线噪声和基线漂移,完成光谱信号的预处理;然后建立光谱信号的多尺度分解,进行谱峰检测,得到峰位值;最后利用得到的峰位值结合高斯函数对谱峰进行解析,得到峰宽、峰强等信息。该算法能够对完全独立峰、部分重叠峰以及完全重叠峰进行正确解析。该算法的优点在于不过分依赖待测样品的成分以及含量等信息,该算法可以推广运用到其他谱图重叠峰的解析。同时基于小波变换的信号去噪与基线校正算法,不仅可以运用在平稳信号中,还可以推广于非平稳信号。

参考文献

- [1] ZHU Zhong-liang. Overlapping peaks resolve based RBF neural network[D]. Anhui University, Hefei, 2014.
朱仲梁. 基于 RBF 神经网络的重叠峰解析[D]. 安徽大学, 合肥, 2014.
- [2] YAN Cai-juan. Resolution of overlapping chromatographs by vertically iterative transition and modified vertically iterative transitio[D]. Tianjin University, Tianjin, 2008.
纵向迭代法及其改进方法分离重叠色谱峰[D]. 天津大学, 天津, 2008.
- [3] TAN Kun, YE Yuan-yuan, DU Pei-jun. Identification and classification of near-infrared spectrum of adulterated wine based on support vector machine[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2013, **42**(1): 69-73.
谭坤, 叶元元, 杜培军. 基于支持向量机的假酒近红外光谱识别分类研究[J]. *光子学报*, 2013, **42**(1): 69-73.
- [4] 张德丰. MATLAB 小波分析[M]. 北京: 机械工业出版社, 2009, 49-51.
- [5] LI Jin-rong. Mathematical representation of raman spectra and applications in quantitative analysis [D]. Zhengjiang University, Hangzhou, 2013.
李津蓉. 拉曼光谱的数学解析及其在定量分析中的应用[D]. 浙江大学: 杭州, 2013.
- [6] XUE Ze-chun, CHEN Xiao-dong, LI Lian-zhi, et al. Study on overlapping spectrum separation using "dmey" wavelet transform and genetic algorithm[J]. *Journal of Chongqing University of Arts and Sciences*, 2014, **33**(5): 104-106.
薛泽春, 陈晓东, 李连之, 等. 应用"dmey"小波变换及遗传算法对重叠光谱分离研究[J]. *重庆文理学院学报*, 2014, **33**

- (5): 104-106.
- [7] CAI Tao, WANG Xian-pei, DU Shuang-yu, et al. IR peak recognition algorithm based on multiscale wavelet transform [J]. *Chinese Journal of Analytical Chemistry*. 2011, **39**(6): 911-914.
蔡涛, 王先培, 杜双育, 等. 基于多尺度小波变换的红外光谱谱峰识别算法[J]. *分析化学研究简报*, 2011, **39**(6): 911-914.
- [8] CHEN Peng-fei, TIAN Di, QIAO Shu-jun, et al. A method of LIBS automatic peak search based on continuous wavelet transform[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2014, **34**(7): 1969-1972.
陈鹏飞, 田地, 乔淑君, 等. 一种基于连续小波变换的 LIBS 自动寻峰方法[J]. *光谱学与光谱分析*, 2014, **34**(7): 1969-1972.
- [9] ZHANG Lei, JIANG Hai-he, ZHU Yan-nan, et al. Application of wavelet transformation to the resolution of overlapped chemical signal[J]. *Physical Testing and Chemical Analyse Part B: Chemical Analyse*, 2008, **44**(3): 212-215.
张磊, 江海河, 储焰南, 等. 小波变换在重叠化学信号解析中的应用[J]. *理化检验-化学分册*. 2008, **44**(3): 212-215.
- [10] ZHANG Jian-hua, KONG Kai-qing, HE Zheng-ling, et al. Micelle critical concentration measurements of alkyl glucosides based on multimodal Gaussian fitting [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2007, **27**(7): 1412-1415.
张建华, 孔凯清, 何争玲, 等. 高斯多峰拟合用于烷基葡萄糖苷临界胶束浓度测量[J]. *光谱学与光谱分析*, 2007, **27**(7): 1412-1415.
- [11] ZENG Guo-qiang, LUO Yao-yao, GE Liang-quan, et al. Stocks algorithm application on overlapping spectral fitting of energy dispersive X-ray fluorescence[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2014, **34**(2): 562-564.
曾国强, 罗耀耀, 葛良全, 等. 种群算法在能量色散 X 荧光重叠谱拟合中的应用[J]. *光谱学与光谱分析*, 2014, **34**(2): 562-564.
- [12] WANG Chong-jie, LI Zhuang, WANG Xian-min, et al. NMR spectroscopy overlapping peaks resolve by simulated annealing algorithm [J]. *Chinese Journal of Spectroscopy Laboratory*, 2012, **29**(6): 3730-3733.
王崇杰, 李壮, 王献敏, 等. 基于模拟退火算法的 NMR 波谱重叠峰解析[J]. *光谱实验室*, 2012, **29**(6): 3730-3733.
- [13] FANG Yong-hua, KONG Chao, LAN Tian-ge, et al. Wavelet transform application on spectrum denoising and baseline correction [J]. *Optics and Precision Engineering*, 2006, **14**(6): 1089-1091.
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): 1089-1091.
- [14] XIONG Zhi-xin, LU Wen-chu, HU Shang-xu. Use wavelet transform and RBF network for decomposing overlapping peaks[J]. *Journal of Zhejiang University*, 2005, **39**(4): 517-520.
熊智新, 路文初, 胡上序. 小波变换和 RBF 网络用于模式法分解重叠测谱峰[J]. *浙江大学学报(工学版)*, 2005, **39**(4): 517-520.
- [15] LI Min, SHENG Yi. Research on application of Gaussian fitting in spectral modeling [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2008, **28**(10): 2352-2355.
李敏, 盛毅. 高斯拟合算法在光谱建模中的应用研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2008, **28**(10): 2352-2355.