

# 基于近红外光谱的预处理及组合方法

张朱珊莹<sup>1,2,3</sup>, 顾瀚文<sup>4</sup>, 谢凯文<sup>4</sup>, 江河<sup>4</sup>, 谢勤岚<sup>1,2,3\*</sup>, 撒继铭<sup>3,4\*\*</sup>

<sup>1</sup>中南民族大学生物医学工程学院, 湖北 武汉 430074;

<sup>2</sup>中南民族大学认知科学国家民委重点实验室, 湖北 武汉 430074;

<sup>3</sup>医学信息分析及肿瘤诊疗湖北省重点实验室, 湖北 武汉 430074;

<sup>4</sup>武汉理工大学信息工程学院, 湖北 武汉 430070

**摘要** 针对复杂样品光谱信号存在的杂散光、噪声、基线漂移等因素对定量分析结果的影响,提出了一种基于近红外光谱的预处理及组合方法。首先,对选取的 2 组数据分别进行无预处理和单一预处理。然后,将 9 种预处理方法按照效果分为四类,包括尺度缩放、基线校正、散射校正和平滑处理。最后,选出每类预处理方法中的最优预处理方法进行组合研究,并根据建模后的交互验证均方根误差选出最优的预处理方法。实验结果表明,针对不同数据集采用合适的预处理组合方法能提高建模效果,但不同数据集信息与复杂性间的差异会导致不同的最优预处理方法,且最优预处理方法与预测组分和原始光谱有关。因此,将预处理方法按照效果进行分类并组合可得到最佳预处理效果。

**关键词** 医用光学; 预处理方法; 复杂样品; 方法选择; 参数优化; 偏最小二乘法

中图分类号 O433.4

文献标志码 A

doi: 10.3788/LOP202158.1617001

## Pretreatment and Combined Method Based on Near Infrared Spectroscopy

Zhang Zhushanying<sup>1,2,3</sup>, Gu Hanwen<sup>4</sup>, Xie Kaiwen<sup>4</sup>, Jiang He<sup>4</sup>, Xie Qinlan<sup>1,2,3\*</sup>,  
Sa Jiming<sup>3,4\*\*</sup>

<sup>1</sup> College of Biomedical Engineering, South-Central University for Nationalities, Wuhan, Hubei 430074, China;

<sup>2</sup> Key Laboratory of Cognitive Science, State Ethnic Affairs Commission, South-Central University for Nationalities, Wuhan, Hubei 430074, China;

<sup>3</sup> Hubei Key Laboratory of Medical Information Analysis and Tumor Diagnosis & Treatment, Wuhan, Hubei 430074, China;

<sup>4</sup> School of Information Engineering, Wuhan University of Technology, Wuhan, Hubei 430070, China

**Abstract** Aiming at the influence of stray light, noise, baseline drift and other factors in the spectral signal of complex samples on the quantitative analysis results, this paper proposes a pretreatment and combined method based on near-infrared spectroscopy. First, no pretreatment and single pretreatment on 2 selected datasets is performed. Then, 9 pretreatment methods are divided into four categories according to their effects, including scale scaling, baseline correction, scattering correction and smoothing. Finally, the optimal pretreatment method of each type of pretreatment method is selected for combined research, and the optimal pretreatment method is selected according to the root mean square error cross-validation after modeling. Experimental results show that the use of appropriate pretreatment combination methods for different data sets can improve the modeling effect, while the difference between the information and complexity of different data sets will lead to different optimal pretreatment methods, and the optimal pretreatment method is related to the predicted components and the original spectra. Therefore, the best pretreatment effect can be obtained by classifying and combining the pretreatment methods

收稿日期: 2020-10-11; 修回日期: 2020-11-16; 录用日期: 2020-12-10

基金项目: 国家自然科学基金(61501526, 61178087)、中南民族大学中央高校基本科研业务费专项资金(CZQ18014)

通信作者: \*xieqinlan@126.com; \*\*jimingsa@whut.edu.cn

according to their effects.

**Key words** medical optics; pretreatment method; complex sample; method selection; parameter optimization; partial least squares

**OCIS codes** 170.1470; 300.6340; 170.1580

## 1 引言

红外光谱技术具有无损、快速、无污染等突出优点,在食品、生物、农业、医药等领域取得了一定的成果<sup>[1]</sup>。环境背景噪声和仪器误差会导致光谱数据产生基线漂移、基线噪声以及高重叠度,使光谱数据的解释性不强,进而影响建模精度<sup>[2-3]</sup>。因此,有必要针对光谱数据的特点对已获取的光谱信息进行多项预处理操作。

根据预处理效果可以将预处理方法分为尺度缩放、基线校正、散射校正和平滑处理四类<sup>[3-6]</sup>。其中,基线校正通过一阶导数、二阶导数和连续小波变换(CWT)消除仪器背景或漂移对信号的影响。散射校正通过多元散射校正(MSC)和标准正态变量(SNV)校正消除样品颗粒分布不均或颗粒大小不同导致的散射。平滑处理通过 Savitzky-Golay(SG)平滑、移动窗口平滑(MWA)、傅里叶变换、小波变换消除光谱中的随机噪声。此外,为了客观分析处理后的数据,尺度缩放通过中心化、尺度化以及归一化消除因光谱数据尺度差异过大带来的不良影响<sup>[7]</sup>。由于每种预处理方法都存在不足,如平滑处理相当于低通滤波器,在消除光谱数据随机噪声的同时会降低光谱的分辨率,且无法处理光谱的端点。因此,需要探讨如何科学合理地选择预处理方法。

第五鹏瑶等<sup>[7]</sup>选用了 9 组数据后用组合后的预处理方法对原始光谱进行预处理,进而根据光谱与预测组分的建模效果选择更准确的最佳预处理方法。Zhu 等<sup>[8]</sup>提出了一种动态消除光谱中噪声的方法,能有效消除由光程差引起的噪声;同时,通过二阶导数对光谱数据进行预处理,实现了一种活体蝇性别的快速鉴定方法。Qiao 等<sup>[9]</sup>对原始光谱进行了 6 种方法组合预处理,通过建立偏最小二乘(PLS)模型评估了土壤有机质的潜力。Li 等<sup>[10]</sup>基于一致性建模原理,提出了一种用于近红外光谱(NIR)标定的一致性最小二乘支持向量回归方法,通过离散小波变换对原始光谱进行预处理,得到了精度较高的植物样品还原糖含量预测模型。朱红求等<sup>[11]</sup>针对锌溶液中痕量离子检测灵敏度低、光谱谱带重叠的问题,提出了一种多目标优化分数阶微分

预处理方法。

上述大部分处理方法并未考虑将预处理方法组合后用于对原始光谱数据的预处理。尽管文献<sup>[7]</sup>通过 10 种预处理方法的 120 种组合对预处理的必要性及预处理方法的选择进行了探讨,但该方法的组合数过多,无法快速得到最佳的预处理方法。因此,本文研究了红外光谱的预处理及其组合方法。首先,采用马氏距离法剔除异常样本,并将 9 种预处理方法按预处理效果分为四类;然后,选出每类预处理方法中的最优预处理方法并进行组合预处理研究;最后,根据建模后的交互验证均方根误差(RMSECV)选出最优的预处理组合方法,并通过无预处理、9 种单一预处理以及 11 种组合预处理进行最优预处理方法的选择研究。

## 2 实验光谱数据集

### 2.1 光谱数据集

#### 2.1.1 血液数据集

血液样本数据集由 Karl Norris 提供,数据下载网址为 <http://www.idrc-chambersburg.org/shoutout2010.html>。光谱数据用 NIRSystems 6500 光谱仪得到,血液样本中包含了血红蛋白、葡萄糖、胆固醇含量的数据,选取 190 组样本的透射光谱数据作为血红蛋白含量的分析样本。

#### 2.1.2 仿体溶液数据集

使用母液配置法配置了 150 个不同质量浓度的血红蛋白仿体溶液,实验原料的具体信息如表 1 所示。牛血清红蛋白的质量浓度范围为 1~150 g/L,间隔为 1 g/L,配置得到的血红蛋白仿体溶液如图 1 所示。仿体溶液的光谱数据用日本岛津公司生产的 UV-VIS-NIR 分光光度计采集,其型号为 SolidSpec-3700。

表 1 血红蛋白仿体溶液的原料

Table 1 Raw material of the hemoglobin mimetic solution

Order	Solution	Manufacturer
1	ultrapure water	Thermo
2	bovine blood hemoglobin	Biosharp
3	intralipid	FRESENIUS KABI SSPC



图 1 血红蛋白仿体溶液的实物图

Fig. 1 Physical image of the hemoglobin mimetic solution

## 2.2 数据集的划分

合理划分数据集能显著提升 NIR 定量分析的精度。数据集的划分应尽可能保证校正集与验证集的随机性与代表性,即校正集与验证集的均值和标

准差应与总体数据集相近。实验采用等间隔窗口法划分校正集和验证集,校正集和验证集的比例为 3:1。具体划分步骤:1)定义窗口大小为 4(可根据样本数量进行调整),将数据集划分为若干个连续的窗口;2)取出步骤 1)中的一个窗口,将前 3 个数据集划分为校正集,最后 1 个数据集划分为验证集,其他窗口类似。

146 个(采集 150 个,剔除异常样本 4 个)仿体溶液样本和 185 个(共 190 个,剔除异常样本 5 个)血液样本数据集的划分结果如表 2 所示。可以发现,两种样本的校正集、验证集及总体数据集的均值与标准差相近,这表明样本集的划分正常,覆盖范围分布均匀。

表 2 不同数据集的血红蛋白含量

Table 2 Hemoglobin contents of different data sets

Sample	Data set	Number of samples	Maximum	Minimum	Average	Standard deviation
Blood	raw set	185	173	103	137.08	16.49
	calibration set	139	173	103	137.95	16.40
	validation set	46	173	106	134.46	16.66
Hemoglobin mimetic solution	raw set	146	150	5	77.50	42.29
	calibration set	110	150	5	77.34	42.53
	validation set	36	148	8	78.00	42.14

## 2.3 预处理组合方法

复杂样品的光谱存在多种干扰信息,可通过组合不同的预处理方法,消除光谱信号中不同种类的干扰信息,实现对不同预处理方法的互补融合。实验采用的 9 种单一预处理方法如表 3 所示,预处理组合方法的设计步骤如下。

表 3 预处理方法的分类

Table 3 Classification of pretreatment methods

Scale scaling	Baseline correction	Scatter correction	Smoothing
mean centering	1 <sup>st</sup> derivative	MSC	MWA
Pareto scaling	2 <sup>nd</sup> derivative	SNV	SG
normalization			

1) 分别用 9 种预处理方法处理 2.2 节中的光谱数据。

2) 首先,对经过预处理后的光谱数据进行 PLS 建模;然后,分析 9 个模型的 RMSECV,并从 4 类预处理方法中选择出每类的最优预处理方法。

3) 对 4 种每类最优预处理方法进行组合,得到 11 种预处理组合方法。包括 6 种两类预处理组合、4 种三类预处理组合以及 1 种四类预处理

组合。

## 3 实验结果与讨论

用无预处理、单一预处理及组合预处理方法处理 2.2 节中的光谱数据。首先,对光谱数据进行预处理;然后,对预处理后的数据进行 PLS 定量分析;最后,对比不同预处理方法的 RNSECV,并选择出最优的预处理方法。将实验分成 2 组:第 1 组为血液样本预处理;第 2 组为仿体溶液样本预处理。此外,每组实验包括数据集的光谱特征、参数优化及预处理后 PLS 建模的效果。

### 3.1 血液样本预处理

#### 3.1.1 光谱特征

血液样本的原始光谱如图 2 所示,剔除 49、66、81、131、190 号异常样本(吸光度较低)后得到的光谱如图 3 所示。由于血液样本的组分比较复杂,分别在 1450 nm 和 1950 nm 处存在两个吸收波峰。可以发现,血液样本的光谱图比较平滑,噪声较小,有利于后续的定量分析。

将血液样本的原始光谱数据进行中心化、尺度化、归一化、一阶导数、二阶导数、MSC、SNV、MWA



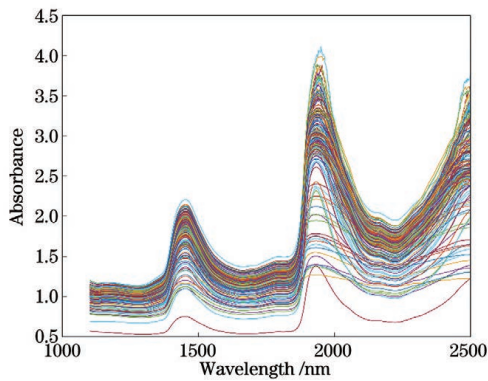


图 2 血液样本的原始光谱

Fig. 2 Raw spectra of the blood samples

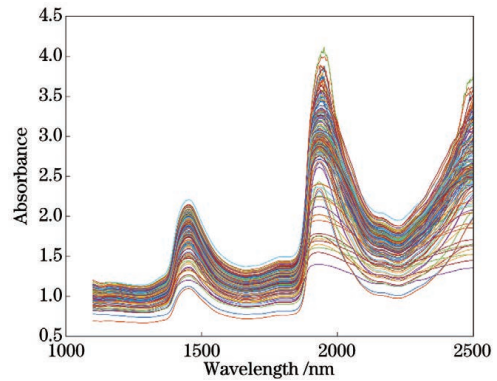


图 3 剔除奇异样本后血液的光谱

Fig. 3 Spectra of blood after removing singular samples

平滑、SG 平滑 9 种单一预处理, 处理后的光谱如图 4 所示。从图 4(a)和图 4(c)可以发现, 经过尺度缩放后, 数据集中在一定范围内, 保留了原始光谱两个吸收波峰的结构信息; 图 4(d)和图 4(e)是经过基线校正消除背景干扰的光谱图, 可以发现, 1100~

1800 nm 范围内的光谱信息丢失比较严重; 经过散射校正后的光谱重叠度较高, 能有效削弱散射带来的影响, 如图 4(f)和图 4(g)所示; 而平滑处理可在不影响原始光谱有效信息的同时滤除噪声, 如图 4(h)和图 4(i)所示。

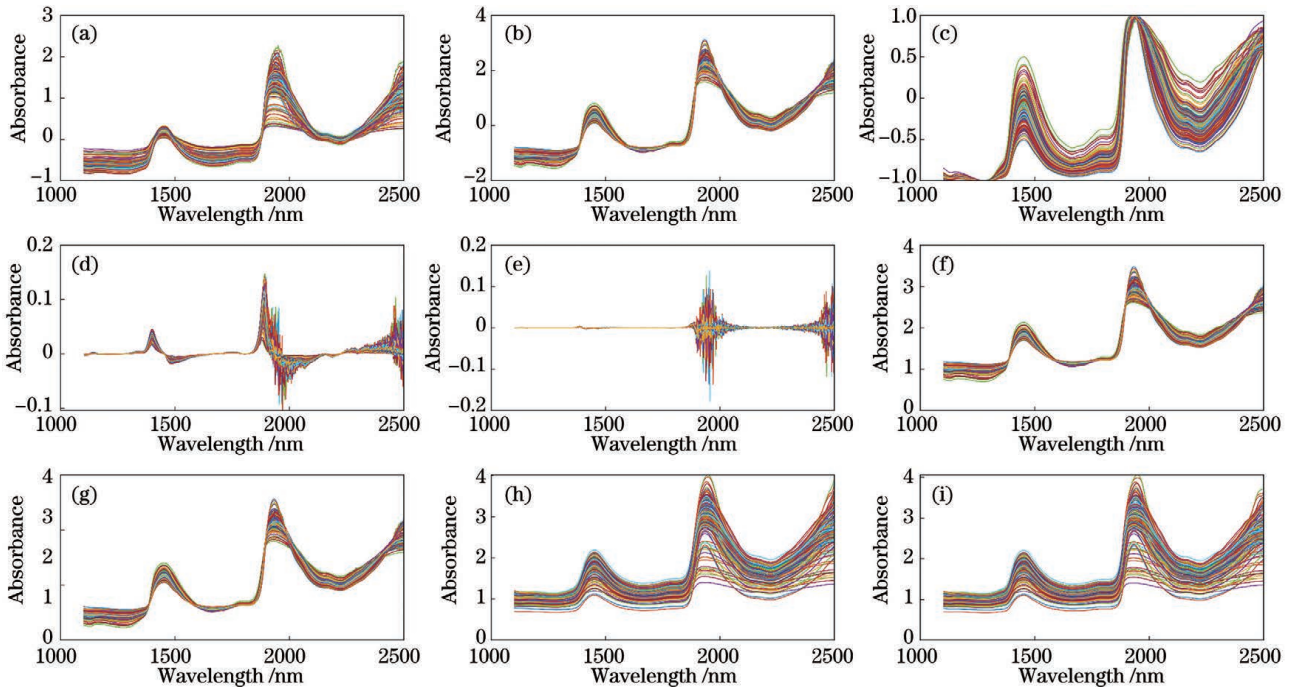


图 4 单一预处理方法得到的 NIR。(a)中心化;(b)尺度化;(c)归一化;(d)一阶导数;(e)二阶导数;(f) MSC;(g) SNV;(h) MWA 平滑;(i) SG 平滑

Fig. 4 NIR obtained by single pretreatment method. (a) Mean centering; (b) scaling; (c) normalization; (d) first derivative; (e) second derivative; (f) MSC; (g) SNV; (h) MWA smoothing; (i) SG smoothing

### 3.1.2 参数优化

为了提高 PLS 建模的精度, 需对 PLS 因子数、MWA 平滑的窗口大小和 SG 平滑的参数进行优化。分别对单一预处理方法与组合预处理方法进行 PLS 回归, 从 1~20 遍历 PLS 因子数, 找出最优的因子数。如果平滑处理的窗口尺寸过大, 会导致过度平滑而丧失有用的光谱信息; 如果窗口尺寸过小,

则无法有效消除噪声, 从而影响预测精度。因此, 使用 MWA 对原始光谱进行预处理后再进行 PLS 回归, 以得到 MWA 的最佳窗口尺寸。RMSECV 与 MWA 窗口尺寸的关系如图 5 所示, 可以发现, MWA 平滑遍历窗口尺寸 3~21 后, 在窗口尺寸为 19 时的测量效果最优, 此时, RMSECV 为 3.8769。同理, 用 SG 平滑对原始光谱进行预处理并建立

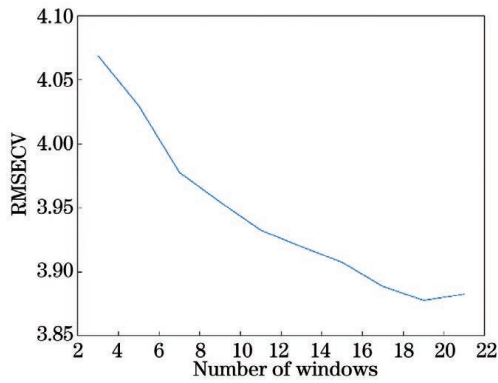


图 5 血液样本 MWA 参数的优化

Fig. 5 Optimization of MWA parameters of blood samples  
 PLS 回归模型,以寻找 SG 平滑的最优参数。经过 SG 平滑遍历二次多项式和三次多项式后发现,设置三次多项式、窗口尺寸为 19 时的测量效果最优,此时, RMSECV 为 3.9389。

3.1.3 预处理后 PLS 建模的效果

用 PLS 分别对无预处理、经过 9 种单一方式预

处理的血液光谱数据进行定量分析,根据 RMSECV 选出每类中的最优预处理方式分别为尺度化、一阶导数、MSC、MWA 平滑。利用这 4 种预处理方法进行组合预处理,具体组合方式如表 4 所示。图 6 为血液样本经过无预处理(方法 1)、单一预处理(方法 2~方法 10)、11 种选择性组合预处理方法(方法 11~方法 21)后 PLS 建模的效果。其中,单一预处理中 MSC 方法(方法 7)的去噪效果最好, MSC 与 MWA 平滑组合预处理方法(方法 13)的 RMSECV 最低,为 2.6713,比原始光谱的 RMSECV(4.1657)降低了 35.9%。经预处理后,尺度缩放中的尺度化和归一化以及散射校正方法的优化效果比较明显,但基线校正处理方法的效果不理想,且经过二阶导数处理后的效果较差。同时,大部分选择性组合预处理方法的效果优于原始光谱,这也验证了选择预处理方式的优越性。

表 4 组合预处理方法(血液)

Table 4 Combination of pretreatment methods (blood)

Method	Combination method	Method	Combination method	Method	Combination method
1	unpretreated	8	SNV	15	1 <sup>st</sup> derivative and MSC
2	mean centering	9	MWA	16	Pareto scaling and 1 <sup>st</sup> derivative
3	Pareto scaling	10	SG	17	1 <sup>st</sup> derivative, MSC and MWA
4	normalization	11	Pareto scaling and MWA	18	Pareto scaling, MSC and MWA
5	1 <sup>st</sup> derivative	12	1 <sup>st</sup> derivative and MWA	19	Pareto scaling, 1 <sup>st</sup> derivative and MWA
6	2 <sup>nd</sup> derivative	13	MSC and MWA	20	Pareto scaling, 1 <sup>st</sup> derivative and MSC
7	MSC	14	Pareto scaling and MSC	21	Pareto scaling, 1 <sup>st</sup> derivative, MSC and MWA

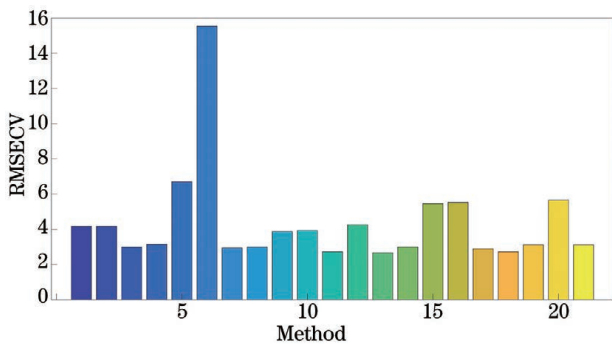


图 6 不同预处理方法的 RMSECV(血液)

Fig. 6 RMSECV obtained by different pretreatment methods(blood)

3.2 仿体溶液预处理

3.2.1 光谱特征

仿体溶液的原始光谱如图 7 所示,可以发现,仿体溶液光谱的吸收值在 880 nm 和 1800 nm 波长附

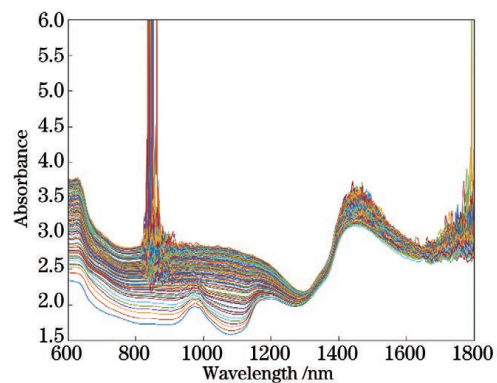


图 7 仿体溶液的原始光谱

Fig. 7 Raw spectra of the phantom solution

近出现了明显的吸收饱和情况。因此,选择 900~1750 nm 范围的波长数据进行预处理。仿体溶液样本经过波长初步筛选和奇异样本剔除后的光谱如图 8 所示,可以发现,仿体溶液样本的光谱在

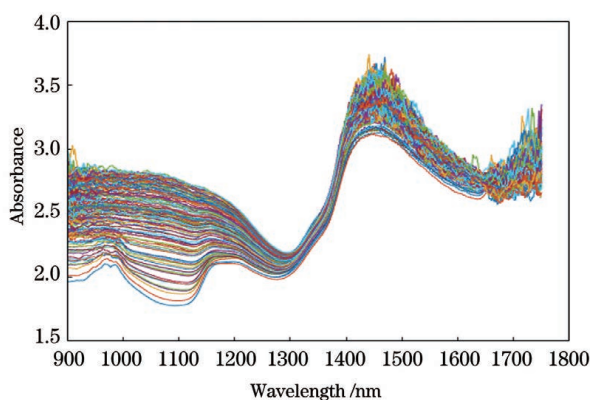


图 8 剔除奇异样本后仿体溶液的光谱

Fig. 8 Spectra of the phantom solution after removing singular samples

1300 nm 处存在波谷, 在 1450 nm 处存在波峰, 但在 900, 1500, 1700 nm 附近有比较明显的噪声。这

表明在这 3 个波段测量时, 存在比较严重的外界干扰。此外, 在 1350~1450 nm 范围内光谱的重叠度很高, 会给后续定量分析带来较大的挑战。

仿体溶液样本光谱数据经过中心化、尺度化、归一化、一阶导数、二阶导数、MSC、SNV、MWA 平滑、SG 平滑方法预处理后的光谱图如图 9 所示。从图 9(a)、图 9(c) 可以发现, 经尺度缩放后, 数据集中在一定的范围内, 能加强尺度较小信号的建模效果; 从图 9(d)、图 9(e) 可以发现, 基线校正方法可消除背景和基线漂移的干扰, 但在 1350 nm 附近的光谱信息丢失严重; 从图 9(f)、图 9(g) 可以发现, 经散射校正后数据的集中度变高, 有效削弱了散射影响; 从图 9(h)、图 9(i) 可以发现, 平滑处理可以较好地保留原始光谱的信息, 且 1500~1750 nm 的毛刺信号变得更加平滑。

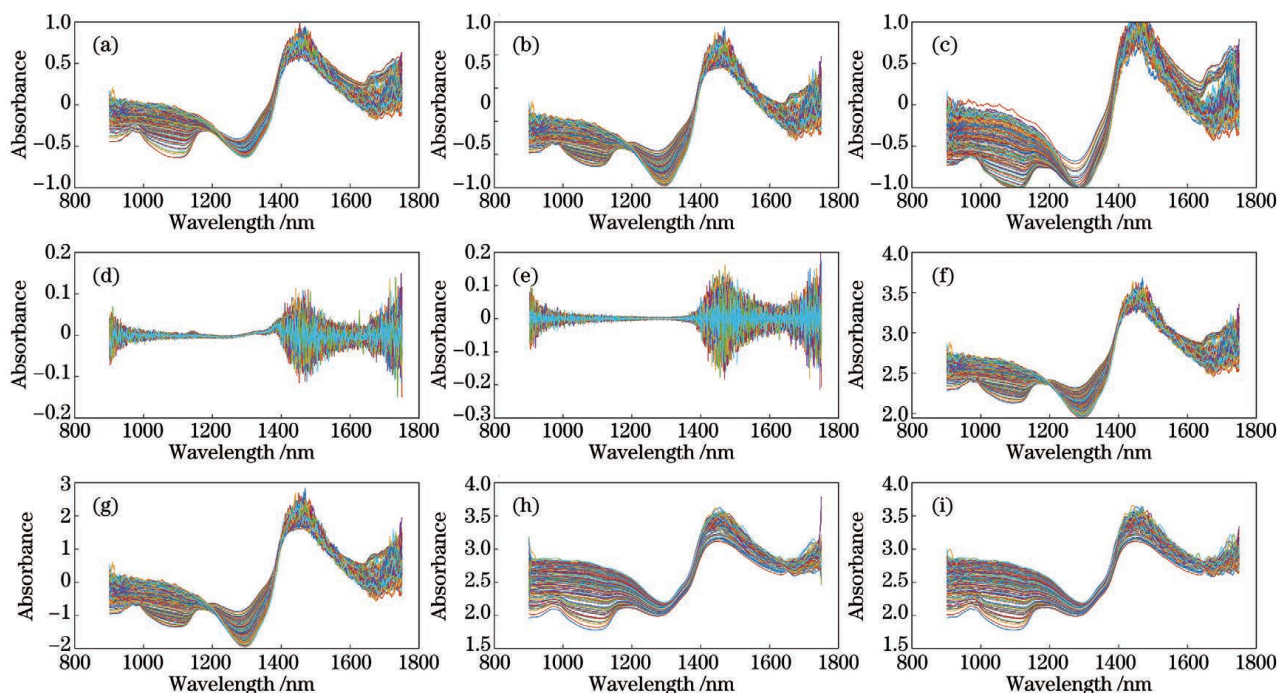


图 9 单一预处理方法得到的仿体溶液光谱。(a) 中心化; (b) 尺度化; (c) 归一化; (d) 一阶导数; (e) 二阶导数; (f) MSC; (g) SNV; (h) MWA 平滑; (i) SG 平滑

Fig. 9 Spectra of the phantom solution obtained by a single pretreatment method. (a) Mean centering; (b) scaling; (c) normalization; (d) first derivative; (e) second derivative; (f) MSC; (g) SNV; (h) MWA smoothing; (i) SG smoothing

### 3.2.2 参数优化

PLS 因子数、MWA 平滑和 SG 平滑参数的优化方法与血液样本一致, 实验结果表明, MWA 平滑遍历窗口尺寸 3~21 后, 窗口尺寸为 19 时 RMSECV 最小, 测量效果也最佳。此外, 对 SG 平滑遍历二次多项式和三次多项式、不同窗口数后发现, 随着窗口数的增加, RMSECV 呈下降趋势。为

防止过度平滑丢失有用信息, SG 平滑设置为三次多项式、窗口尺寸为 17, 此时, RMSECV 为 2.7833。

### 3.2.3 预处理后 PLS 建模的效果

用表 3 中的预处理方法对仿体溶液样本进行单一预处理, 根据 PLS 定量分析后的 RMSECV 得出每类预处理中的最优方法分别为中心化、一阶导数、



SNV、MWA 平滑。表 5 为方法 1~方法 21 的具体组合,图 10 为仿体溶液光谱数据经过无预处理(方法 1)、单一预处理(方法 2~方法 10)、11 种组合预处理(方法 11~方法 21)后进行 PLS 定量分析得到的 RMSECV。由于原始光谱在无预处理下的

定量分析效果较好,导致部分预处理效果不够明显。可以发现,基线校正的预处理效果相对较差。效果最好的是 MWA 平滑单一预处理(方法 9),其 RMSECV 最低,为 2.4833,比原始光谱的 RMSECV(3.5547)降低了 30.1%。

表 5 组合预处理方法(仿体溶液)

Table 5 Combination of pretreatment methods (phantom solution)

Method	Combination method	Method	Combination method	Method	Combination method
1	unpretreated	8	SNV	15	1 <sup>st</sup> derivative and SNV
2	mean centering	9	MWA	16	mean centering and 1 <sup>st</sup> derivative
3	Pareto scaling	10	SG	17	1 <sup>st</sup> derivative, SNV and MWA
4	normalization	11	mean centering and MWA	18	mean centering, SNV and MWA
5	1 <sup>st</sup> derivative	12	1 <sup>st</sup> derivative and MWA	19	mean centering, 1 <sup>st</sup> derivative and MWA
6	2 <sup>nd</sup> derivative	13	SNV and MWA	20	mean centering, 1 <sup>st</sup> derivative and SNV
7	MSC	14	mean centering and SNV	21	mean centering, 1 <sup>st</sup> derivative, SNV and MWA

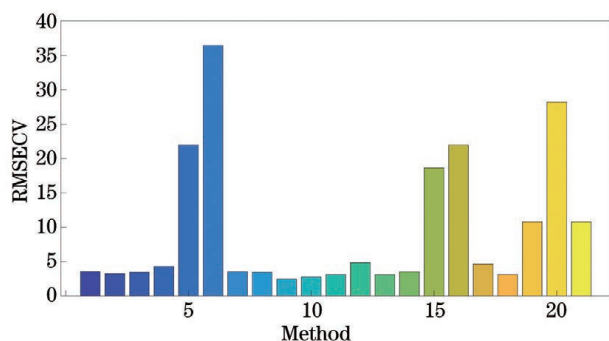


图 10 不同预处理方法的 RMSECV(仿体溶液)

Fig. 10 RMSECV obtained by different pretreatment methods (phantom solution)

## 4 结 论

采用无预处理方法、9 种单一预处理方法及 11 种预处理组合方法对不同数据集进行了预处理研究,分析了经各种预处理方法及 PLS 建模后的 RMSECV。实验结果表明,针对血液样本,预处理组合方法的效果明显优于未经过预处理及单一方法预处理后的效果。但对于仿体溶液样本,经单一预处理方法后的建模效果优于组合预处理方法。原因可能是在仿体溶液的配制过程中并未充分考虑到成分的复杂性。此外,对于复杂样品,因原始光谱相同,依据光谱特点选择的预处理方法也是相同的。依据建模效果选择的预处理方法未必相同,但这种选择方法往往是更优的。这表明并不存在普适性的最优预处理选择方法,最优预处理方法与光谱数据以及预测组分有关。

## 参 考 文 献

- [1] Li P, Du G R, Cai W S, et al. Rapid and nondestructive analysis of pharmaceutical products using near-infrared diffuse reflectance spectroscopy [J]. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 2012, 70: 288-294.
  - [2] Rinnan Å, Berg F V D, Engelsen S B. Review of the most common pre-processing techniques for near-infrared spectra [J]. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 2009, 28(10): 1201-1222.
  - [3] Gerretzen J, Szymańska E, Jansen J J, et al. Simple and effective way for data preprocessing selection based on design of experiments [J]. *Analytical Chemistry*, 2015, 87(24): 12096-12103.
  - [4] Engel J, Gerretzen J, Szymańska E, et al. Breaking with trends in pre-processing? [J]. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 2013, 50: 96-106.
  - [5] Liu Y J, de Yu Y, Zhou X G, et al. A new automatic threshold selecting criteria for spectroscopy data processing [J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2017, 161: 8-14.
  - [6] Gerretzen J, Szymańska E, Bart J, et al. Boosting model performance and interpretation by entangling preprocessing selection and variable selection [J]. *Analytica Chimica Acta*, 2016, 938: 44-52.
  - [7] Diwu P Y, Bian X H, Wang Z F, et al. Study on the selection of spectral preprocessing methods [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2019, 39(9): 2800-2806.
- 第五鹏瑶, 卞希慧, 王姿方, 等. 光谱预处理方法选

- 择研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2019, 39(9): 2800-2806.
- [8] Zhu Z Q, Yuan H F, Song C F, et al. High-speed sex identification and sorting of living silkworm pupae using near-infrared spectroscopy combined with chemometrics[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2018, 268: 299-309.
- [9] Qiao X X, Wang C, Feng M C, et al. Hyperspectral estimation of soil organic matter based on different spectral preprocessing techniques [J]. Spectroscopy Letters, 2017, 50(3): 156-163.
- [10] Li Y K, Shao X G, Cai W S. A consensus least squares support vector regression (LS-SVR) for analysis of near-infrared spectra of plant samples[J]. Talanta, 2007, 72(1): 217-222.
- [11] Zhu H Q, Chen J M, Yang C H, et al. Spectral pretreatment method for detection of trace  $\text{Cu}^{2+}$  and  $\text{Co}^{2+}$  in zinc solution[J]. Acta Optica Sinica, 2019, 39(1): 0130001.  
朱红求, 陈俊名, 阳春华, 等. 锌溶液中痕量  $\text{Cu}^{2+}$ 、 $\text{Co}^{2+}$  的检测光谱预处理方法 [J]. 光学学报, 2019, 39(1): 0130001.