

用于光谱重叠峰和太赫兹波时域曲线的高斯拟合算法

杨家懿, 熊永前*

华中科技大学电气与电子工程学院强电磁工程与新技术国家重点实验室, 湖北 武汉 430074

摘要 为了拟合光谱重叠峰及太赫兹时域曲线,设计了一种动态增加高斯函数的高斯拟合算法。首先,利用去噪光谱数据的一阶导数粗略搜寻各高斯峰的位置,再根据高斯峰位置初始化多高斯函数。然后,将光谱数据与多高斯函数的均方差作为损失函数,用梯度下降法找到损失函数最小时的多高斯函数。最后,针对没有明显峰尖的光谱重叠峰和存在负值的太赫兹时域曲线,用动态多高斯函数模型解析重叠高斯峰或拟合曲线。计算结果表明,本算法可以根据拟合精度的要求,动态增加多个高斯函数,自动搜寻高斯峰的位置,且对光谱重叠峰和太赫兹时域曲线的拟合效果较好。

关键词 光谱学; 太赫兹时域曲线; 高斯曲线拟合; 自动寻峰算法; 梯度下降法

中图分类号 TN911.74

文献标志码 A

doi: 10.3788/LOP202158.0407002

Gaussian Fitting Algorithm for Spectral Overlapping Peaks and Terahertz Time-Domain Curves

Yang Jiayi, Xiong Yongqian*

State Key Laboratory of Advanced Electromagnetic Engineering and Technology, School of Electrical and Electronic Engineering, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, Hubei 430074, China

Abstract In order to fit the spectral overlapping peaks and terahertz time-domain curves, a Gaussian fitting algorithm that dynamically increases the Gaussian function is designed in this paper. First, use the first derivative of the denoising spectral data to roughly search the position of each Gaussian peak, and then initialize the multi-Gaussian function according to the position of the Gaussian peak. Then, the mean square error between the spectral data and the multi-Gaussian function is used as the loss function, and the gradient descent method is used to find the multi-Gaussian function when the loss function is the smallest. Finally, for the spectral overlapping peaks without obvious peaks and the terahertz time-domain curves with negative values, the dynamic multi-Gaussian function model is used to analyze overlapping Gaussian peaks or fitting curves. Calculation results show that the algorithm can dynamically add multi-Gaussian functions according to the requirements of fitting accuracy, and automatically search for the position of Gaussian peaks, and the effect of fitting spectral overlapping peaks and terahertz time-domain curves is better.

Key words spectroscopy; terahertz time-domain curve; Gaussian curve fitting; automatic peak finding algorithm; gradient descent method

OCIS codes 070.4790; 300.6495; 000.4430

1 引言

光信号、电子束流脉冲信号通常为高斯分布,容易出现峰位相互叠加形成的高斯重叠峰现象。为了

分析单个高斯峰的作用或形成原因,需要将重叠的高斯峰分解为独立的高斯峰。溶液的液相色谱^[1]、红外吸收光谱^[2-3]与太赫兹吸收光谱^[4]中的吸收峰也可以用高斯函数拟合,从而实现吸收峰的峰位识

收稿日期: 2020-08-31; 修回日期: 2020-10-19; 录用日期: 2020-11-05

* E-mail: yqxiong@hust.edu.cn

别。因此高斯重叠峰的分离在光谱学研究^[5]、电化学分析^[6]等领域备受关注。

在太赫兹时域光谱技术中,检测很薄的固体样品时要考虑太赫兹波在样品内部的多次反射效应,即法布里-珀罗效应。用多高斯函数曲线模拟太赫兹波的时域曲线,可对法布里-珀罗效应进行仿真分析,为太赫兹波的时域分析提供理论依据^[7]。

通过数学分析分离光谱重叠峰的方法主要有高斯曲线拟合分析^[8]、多元回归分析^[9]、神经网络解析、小波变换法^[10]、傅里叶去卷积法^[11]等。李敏等^[5]用遗传算法和神经网络实现了重叠光谱解析,且解析光谱重叠峰的收敛速度较快。胡耀垓等^[8]讨论了曲线拟合的非唯一性,并用求导迭代方法实现了光谱重叠峰的解析。Lu 等^[12]通过导数分析用一种优化后的反卷积算法实现了对蛋白质电离质谱的重叠峰分析。徐喜荣等^[13]将小波变换与连续 Hopfield 神经网络相结合^[13],详细分析了寻找峰值和解析参数的过程,可以很好地解析光谱重叠峰。于坤等^[14]使用正弦余弦算法确定光谱特征峰峰位并得到对应峰强,可以解析不同线型的吸收谱线。上述将重叠峰视为高斯函数的算法常用于数据全部为正值的光谱重叠峰,且依赖起始高斯峰的寻找,迭代计算之前就确定了函数模型,因此在迭代期间不会动态增加高斯峰。对于复杂的光谱数据,如果起始高斯峰位置搜寻不准确,且后续计算不会动态增加高斯峰,其拟合效果可能较差。

针对上述问题,本文设计了一种在计算过程中可以动态增加高斯峰的算法,用可变的多高斯函数模型解析光谱谱线,为复杂光谱数据的分析提供了解决方案。该算法以光谱数据和多高斯函数的均方差作为损失函数,用梯度下降法求解损失函数的最小值,在迭代过程中可根据精度需求用多个高斯函数分解光谱数据中的重叠高斯峰。

2 算法的基本原理

2.1 计算流程

每个高斯函数可作为一个高斯峰(Gaussian peak),将多高斯函数的第 j 个高斯函数表示为

$$y_j = f_j(x) = a_j \exp\left[-\frac{(x - b_j)^2}{c_j^2}\right], \quad (1)$$

式中, x 为自变量, a_j 为高斯峰的峰高(Peak intensity),取值范围为 R 。大多数情况下,拟合的谱线全为正值,即 a_j 大于等于 0;拟合存在负值的曲线时,存在 a_j 小于 0 的情况。 b_j 为高斯峰的峰位(Peak

position),大于 0; c_j 为高斯峰的峰宽(Peak width),大于 0。多个高斯峰重叠的曲线可表示为多高斯函数

$$y = f(x) = \sum_{j=1}^m a_j \exp\left[-\frac{(x - b_j)^2}{c_j^2}\right], \quad (2)$$

式中, m 为高斯峰的总数。

光谱数据可表示为横坐标及对应纵坐标的有序集合 $\mathbf{x} = \{x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_n\}$ 和 $\mathbf{z} = \{z_1, z_2, \dots, z_i, \dots, z_n\}$, n 为数据点的总数。用多高斯函数解析重叠峰或拟合曲线的目标就是找到拟合的光谱数据 $\mathbf{y} = f(\mathbf{x})$ 中的各个参数,使拟合误差即均方差 E 最小, E 可表示为

$$E = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n [z_i - f(x_i)]^2 = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n (z_i - y_i)^2. \quad (3)$$

可将(3)式看成最小二乘拟合,为了在求导时约掉平方导数的系数,计算均方差时除以 2。 E 是关于 $a_j, b_j, c_j, j = 1, 2, \dots, m$ 的多元非线性函数,一般可以用数值迭代的方法求解。一种是用求偏导的方法,如梯度下降法;另一种方法是直接搜索函数的极值点的方法,如 Nelder-Mead 单纯形法。

本算法借鉴 BP(Back propagation)神经网络的思想,用梯度下降法将 E 反向传递给待求参数 a_j, b_j, c_j ,优化待求参数后重新计算误差,经过多次迭代,就能得到 E 的极小值或最小值。本算法的计算流程图如图 1 所示,其中, \mathbf{x} 为光谱数据,一般为频率、波长等,纵坐标 z 为信号强度, s 为迭代次数,迭

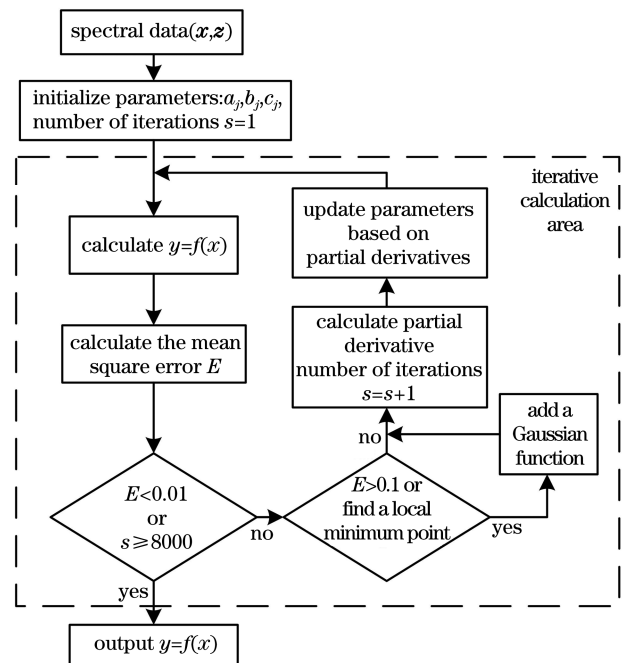


图 1 迭代计算的流程图

Fig. 1 Flow chart of the iterative calculation

代次数最大值设为 8000。首先用光谱数据初始化各个高斯峰的峰高、峰位和峰宽,然后进行迭代计算,当计算陷入极小值点或 E 较大时增加一个高斯函数继续进行迭代计算,直至 E 或迭代次数满足条件时输出拟合结果。

2.2 初始化计算模型

迭代算法中初始值的选择对算法的收敛速度、计算精度、计算准确度有很大的影响。本算法初步搜寻到每个高斯峰大致的峰位和峰高后,通过多次迭代能很快降低 E ,初始化高斯峰的峰位取光谱曲线的极大值点。为了减小噪声的影响,本算法用去噪后的数据初始化计算模型的参数,迭代计算时采用原始光谱数据。用于光谱去噪的算法包括小波去噪法^[15-17]、移动平均平滑、卷积平滑^[18]、主成分分析法^[19]等,本算法采用移动平均去噪法。初始化计算模型的步骤如下。

1) 对光谱数据 z 进行去噪处理,计算去噪数据的一阶导数,本算法用一阶梯度代替一阶导数。

2) 设置导数零点搜寻半径 r ,查找导数由正变负的零点。如 $r=5$ 表示搜寻 x_i 前 5 个点与后 4 个点(共 10 个点)的导数值,不对边界点进行搜寻。如果符合“正正正正负负负负”,则将 x_i 作为高斯峰的峰位候选值。

3) 根据噪声大小设定一个阈值 T ,如果步骤 2) 候选的 x_i 对应的 $z_i > T$,则将 x_i 确定为高斯峰的峰位初始值。如果搜寻到 m 个满足条件的高斯峰,则第 j 个高斯函数参数的初始值可表示为

$$a_{j(1)} = z_i, b_{j(1)} = x_i, c_{j(1)} = 1, \quad (4)$$

式中, $a_{j(1)}$ 、 $b_{j(1)}$ 、 $c_{j(1)}$ 分别为第 j 个高斯函数第 1 次迭代计算时的峰高、峰位、峰宽。初始化 $c_{j(1)}$ 时可以

在 0.5~2 之间随机选取一个值,也可根据实际数据自定义。

以模拟的含噪声光谱数据 z 为例说明上述初始化方法,含噪声的光谱数据如图 2(a)所示,由光谱信号和噪声信号组成,其信噪比为 100。光谱信号由 6 个高斯函数组成,其参数如表 1 所示,最大值为 20,其中第 2 组数据不满足要求,可忽略。噪声信号为 0.2 乘以一个正态分布的随机序列,在 Python 中用函数 `0.2*tensorflow.random_normal()` 生成。移动平均去噪时取相邻 4 个点的平均值,去噪后的信号曲线如图 2(b)所示,图 2(c)为去噪后曲线对应的一阶梯度曲线。图中左右两个峰对应的导数不符合搜索条件的步骤 2),因此,图 2(c)中符合搜索条件的有 4 个点,分别位于图中虚线交点附近,对应图 2(b)中的 4 个高斯峰。每个高斯峰有 3 个参数,共初始化 12 个参数。

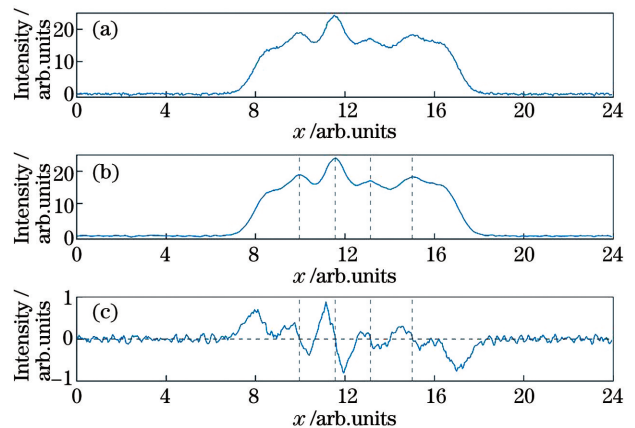


图 2 光谱重叠峰曲线。(a)含噪声的光谱数据;(b)去噪后的光谱数据;(c)一阶梯度曲线

Fig. 2 Curve of the spectral overlapping peaks. (a) Spectral data with noise; (b) spectral data after de-noising; (c) curve with first gradient

表 1 分峰不明显的重叠高斯峰拟合结果

Table 1 Fitting result of overlapped Gaussian peaks with indistinct peaks

Number j	Peak position b_j			Peak intensity a_j			Peak width c_j		
	Setting value	Fitting value	Relative error / %	Setting value	Fitting value	Relative error / %	Setting value	Fitting value	Relative error / %
1	8.50	8.44	0.71	12.00	11.02	8.16	0.85	0.82	3.53
2	-	8.47	-	-	14.82	-	-	0.0014	-
3	10.00	9.98	0.20	18.00	18.23	1.28	0.95	1.04	9.47
4	11.50	11.52	0.17	20.00	19.24	3.80	0.70	0.68	2.86
5	13.00	13.01	0.08	16.00	16.09	0.56	1.10	1.12	1.82
6	15.00	14.98	0.13	17.00	16.90	0.58	1.11	1.05	5.41
7	17.00	16.47	3.12	12.00	12.78	6.50	0.85	0.86	1.18

2.3 正向计算均方差

获得各个高斯函数的参数之后,根据(4)式计算拟合的光谱数据 \mathbf{y} 与光谱数据 \mathbf{z} 的均方差 E 。如果均方差满足误差要求或迭代次数达到设定值就停止

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial a_{j(k)}} &= \frac{\partial E}{\partial y_{j(k)}} \frac{\partial y_{j(k)}}{\partial a_{j(k)}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left\{ [z_i - y_{i(k)}] \cdot \frac{y_{j(k)}}{a_{j(k)}} \right\} \\ \frac{\partial E}{\partial b_{j(k)}} &= \frac{\partial E}{\partial y_{j(k)}} \frac{\partial y_{j(k)}}{\partial b_{j(k)}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left\{ [z_i - y_{i(k)}] \cdot y_{j(k)} \cdot \frac{2[x_i - b_{j(k)}]}{c_{j(k)}^2} \right\} \\ \frac{\partial E}{\partial c_{j(k)}} &= \frac{\partial E}{\partial y_{j(k)}} \frac{\partial y_{j(k)}}{\partial c_{j(k)}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left\{ [z_i - y_{i(k)}] \cdot y_{j(k)} \cdot \frac{2[x_i - b_{j(k)}]^2}{c_{j(k)}^3} \right\}\end{aligned}\quad (5)$$

根据偏导数更新第 $k+1$ 次计算时的参数,可表示为

$$a_{j(k+1)} = a_{j(k)} - \eta \frac{\partial E}{\partial a_{j(k)}}, b_{j(k+1)} = b_{j(k)} - \eta \frac{\partial E}{\partial b_{j(k)}}, c_{j(k+1)} = c_{j(k)} - \eta \frac{\partial E}{\partial c_{j(k)}}, \quad (6)$$

式中, η 为学习率。迭代 1000 次以内学习率可设置较大的数值,如 0.05;迭代次数变多或接近最优值时,学习率可设置为较小的数值,如 0.01。学习率也可以根据光谱数据选合适的数值,更新参数后,再重新计算拟合的多高斯函数 \mathbf{y} 及均方差 E 。

2.5 动态增加高斯函数

实际光谱拟合时可能出现两个高斯峰相隔较近或噪声信号较大的情况,通过去噪寻峰方法无法找到全部的高斯峰。即使曲线拟合效果不佳,迭代算法也能找到均方差的一个局部极小值。此时可增加一个高斯函数,重新迭代优化,从而更好地拟合曲线。

判断是否需要增加高斯函数的依据:1)迭代计算多次,均方差 E 的变化很小,这表明计算可能找

计算,输出拟合的多高斯函数。

2.4 反向传递误差

用 E 对 a_j 、 b_j 、 c_j 分别求偏导,迭代 k 次后的偏导可表示为

到一个极小值点;2) E 较大,不满足要求;3)计算前设置在迭代一定次数时,增加高斯函数。当拟合效果较好时, E 满足循环输出条件,算法输出多高斯函数。如果算法增加了多余的高斯函数,则最后输出的多高斯函数中有一些高斯峰的峰高或峰宽会趋近于 0,这些高斯峰极低或极窄,可以删除。初始化一个新增高斯函数 y_{new} 的方法如下:

1)找到有序集合 $|z_j - y_j|$ 中的最大值,然后找到有序集合 \mathbf{x} 中对应的横坐标 x_{max} ;

2)给新增高斯函数 y_{new} 的参数赋初始值,可表示为

$$a_{\text{new}} = (\mathbf{z} - \mathbf{y}) \Big|_{x=x_{\text{max}}}, b_{\text{new}} = x_{\text{max}}, c_{\text{new}} = 1; \quad (7)$$

3)结合(2)式,将新增高斯函数添加到原来的多高斯函数中,可表示为

$$y = a_{\text{new}} \exp \left[-\left(\frac{x - b_{\text{new}}}{c_{\text{new}}} \right)^2 \right] + \sum_{j=1}^m a_j \exp \left[-\left(\frac{x - b_j}{c_j} \right)^2 \right]. \quad (8)$$

(7)式中初始化 a_{new} 的方法也可以表示为

$$a_{\text{new}} = \mathbf{z} \Big|_{x=x_{\text{max}}}, \quad (9)$$

$$a_{\text{new}} = \left| (\mathbf{z} - \mathbf{y}) \Big|_{x=x_{\text{max}}} \right|. \quad (10)$$

用(7)式和(10)式计算的收敛速度比用(9)式快,原因是(10)式对(7)式取绝对值,只能拟合谱线全部为正值的情况。(7)式中初始化 c_{new} 也可以根据不同光谱数据设定不同的值。增加一个高斯函数后再通过偏导数反向传递误差,继续进行迭代计算。

3 光谱重叠峰解析的仿真计算

本算法用 Python 编程实现,为了验证本算法

的效果,用 Python 生成分峰不明显重叠高斯峰以模拟光谱重叠峰,然后进行仿真计算。分峰不明显的重叠高斯峰表现为部分高斯峰相隔很近,对应的峰尖不是极大值点,用求导方法找不到对应高斯峰位置。图 2 中光谱信号最左边和最右边的两个高斯峰没有明显的峰尖,用求导搜寻高斯峰的方法只找到 4 个高斯峰,因此迭代 10 次后的拟合曲线只有 4 个高斯峰,如图 3 所示,此时需要增加高斯峰。

计算参数:用 4 个点移动平均去噪,导数零点搜寻半径为 5,去噪阈值 $T = 0.3 \max(|\mathbf{z}|)$,学习率 $\eta = 0.05$,迭代次数为 8000;在迭代 1500 次、3000 次

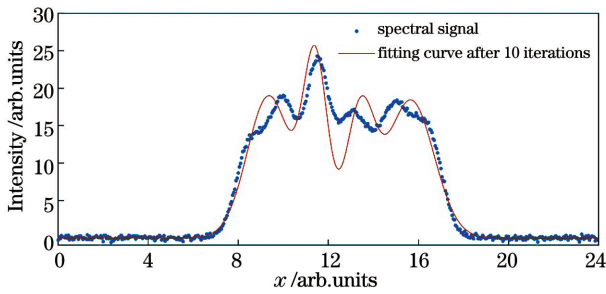


图 3 光谱信号与迭代 10 次的拟合曲线

Fig. 3 Spectral signal and fitting curve after 10 iterations
 和 4500 次时分别添加一个高斯峰,用(9)式计算初始化新增高斯峰的峰高。迭代后的拟合曲线、分解的高斯峰和误差变化曲线如图 4 所示,高斯峰参数的拟合结果如表 1 所示。图 4(a)为光谱信号、迭代 8000 次后的拟合曲线以及解析的单个高斯峰,可以发现,拟合曲线与光谱信号散点图基本重合,且解析出的单峰与光谱信号的峰位一一对应。图 4(b)为均方差 E 随迭代次数增加的变化曲线,通过求导方法找到 4 个峰并添加了 3 个峰,输出的结果为 7 个峰。其中,2 号高斯峰的峰宽 $c=0.0014$,十分狭窄,相当于一个脉冲函数,可以删除,因此并未在图中绘制该高斯峰。从图 4(b)可以看出,增加高斯峰时,均方差 E 会突然增大,然后快速衰减。原因是(9)式引入的高斯函数对计算影响较大,每增加一个高斯峰, E 会整体呈阶梯式下降,最后下降到 0.021。这表明新增高斯函数经过多次迭代后可以有效减小

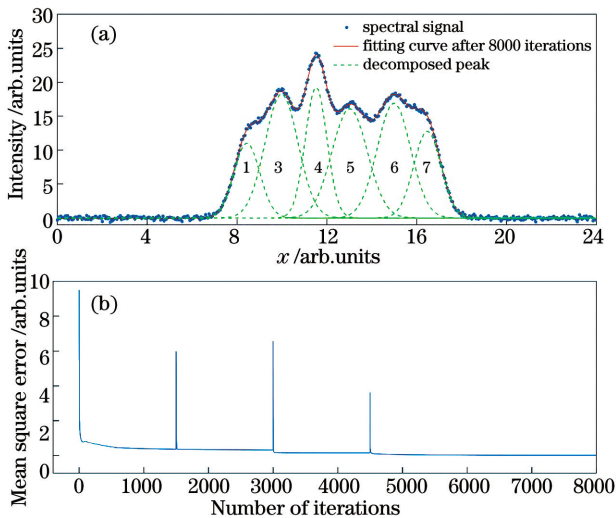


图 4 分峰不明显的重叠高斯峰。(a)光谱信号、拟合曲线、分解高斯峰;(b)均方差曲线

Fig. 4 Overlapping Gaussian peaks with unobvious sub-peaks. (a) Spectral signal, fitting curve, decomposition of Gaussian peak; (b) mean square error curve

均方差。输出各参数的最大相对误差为 9.47%,平均相对误差为 2.75%。在有噪声的情况下,拟合效果较好。

4 太赫兹波的时域曲线拟合

实验室搭建了一个透射式太赫兹波时域光谱系统,其中,飞秒激光器为奥地利 FEMTOLASERS 公司的 Femtolasers Synergy Pro 600,太赫兹天线为德国 BATOP 公司的 iPCA-21-05-1000-800-h。实验室采集到的太赫兹时域信号时间在 ps 量级,信号强度在 μV 量级。将太赫兹波时域曲线的数据输入本算法时需放大横纵坐标的尺度,放大后的结果如图 5 所示。图 5(a)中散点图为太赫兹脉冲信号穿过空气时检测到的时域信号。计算参数:用 3 个点移动平均去噪、导数零点的搜寻半径为 3、去噪阈值 $T=0.08\max(|z|)$ 、学习率 $\eta=0.06$;迭代次数为 8000,在 7000 次迭代之前,当均方差大于 0.007 时,每迭代 500 次,新增一个高斯峰,初始化峰宽 $c=0.4$,用(7)式计算初始化峰高 b 。

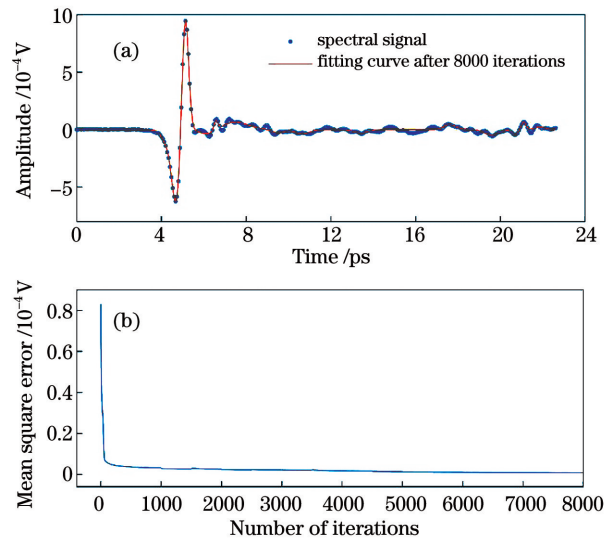


图 5 拟合的太赫兹时域曲线。(a)太赫兹信号和拟合曲线;(b)均方差的变化曲线

Fig. 5 THz time-domain curve obtained by fitting. (a) Terahertz signal and fitting curve; (b) variation curve of mean square error

图 5(a)为 17 个高斯函数拟合的太赫兹波时域曲线,可以发现,太赫兹波时域曲线的拟合效果较好。从图 5(b)可以发现,随着迭代次数的增加,均方差 E 从 0.83 逐渐减小到 0.059。新增高斯峰时,均方差有略微增加,其变化幅度比图 4 中的均方差小。原因是新增高斯峰的位置不在太赫兹波的主要区域,即图 5(a)中 6 ps 之后的区域信号对整个拟合

曲线的影响较小。

5 结 论

介绍了基于梯度下降法的动态增加高斯峰算法,并通过仿真模拟的光谱重叠峰分析了算法的有效性,同时将该算法应用于太赫兹波时域曲线的拟合。结果表明,本算法能将分峰不明显的光谱重叠峰分解为独立的高斯峰,且计算结果与真实值比较接近,所有参数的平均相对误差为 2.75%。对于比较复杂的太赫兹波时域曲线,也取得了较好的拟合效果,拟合曲线与原曲线的均方差降低至 0.059。动态增加高斯峰算法得到的拟合曲线均方差较小,精度较高,可以解析比较复杂的高斯重叠峰,也可以用于一般曲线的多高斯曲线拟合。

参 考 文 献

- [1] Mizzi L, Chatzitzika C, Gatt R, et al. HPLC analysis of phenolic compounds and flavonoids with overlapping peaks[J]. Food Technology and Biotechnology, 2020, 58(1): 12-19.
- [2] Qi R B, He S K, Li X T, et al. Simulation of TDLAS direct absorption based on HITRAN database[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2015, 35(1): 172-177.
齐汝宾, 赫树开, 李新田, 等. 基于 HITRAN 光谱数据库的 TDLAS 直接吸收信号仿真研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2015, 35(1): 172-177.
- [3] Xu L, Zhang Z R, Dong F Z, et al. Analytical method of spectral overlapping interference using laser absorption spectroscopy[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2019, 56(19): 193003.
许丽, 张志荣, 董凤忠, 等. 激光吸收光谱中谱线重叠干扰的解析方法[J]. 激光与光电子学进展, 2019, 56(19): 193003.
- [4] Cao B H. Study on measurement techniques based on terahertz time domain spectroscopy[D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2009: 86-98.
曹丙花. 基于太赫兹时域光谱的检测技术研究[D]. 杭州: 浙江大学, 2009: 86-98.
- [5] Li M, Sheng Y. Study on application of Gaussian fitting algorithm to building model of spectral analysis [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.
- [6] Du Y, Meng X C, Zhu L Q. Overlapping spectral analysis based on genetic algorithms and BP neural networks [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2020, 40(7): 2066-2072.
都月, 孟晓辰, 祝连庆. 遗传算法和神经网络的重叠光谱解析 [J]. 光谱学与光谱分析, 2020, 40(7): 2066-2072.
- [7] Wang W. Study on terahertz technology for paper thickness measurement [D]. Xuzhou: China University of Mining and Technology, 2019: 19-27.
王伟. 基于太赫兹技术的纸页厚度检测方法 [D]. 徐州: 中国矿业大学, 2019: 19-27.
- [8] Hu Y G, Zhang X X, Zhao Z Y, et al. Strategy and implementation of resolve overlapping spectra based on curve fitting [J]. Journal of Chongqing University, 2012, 35(5): 76-82.
胡耀垓, 张晓星, 赵正予, 等. 光谱重叠峰的曲线拟合解析策略与实现 [J]. 重庆大学学报, 2012, 35(5): 76-82.
- [9] Hu R M, Wang Z Z, Liu R W, et al. Quantitative analysis of unburned carbon in fly ash by laser-induced breakdown spectroscopy [J]. Acta Photonica Sinica, 2018, 47(8): 0847005.
胡若木, 王珍珍, 刘人玮, 等. 飞灰未燃碳的激光诱导击穿光谱定量分析 [J]. 光子学报, 2018, 47(8): 0847005.
- [10] Feng F, Wang F B, Xie F, et al. Implementation of spectral overlap resolution based on wavelet transforms and Gaussian fitting [J]. Acta Photonica Sinica, 2015, 44(6): 0630001.
冯飞, 王府北, 谢非, 等. 小波变换与高斯拟合在光谱重叠峰解析中的应用 [J]. 光子学报, 2015, 44(6): 0630001.
- [11] Hu Y, Chen B, Shou J N, et al. Identification of Platycladi Semen from cypress seed by Fourier self-deconvolution infrared spectroscopy [J]. Chinese Traditional Patent Medicine, 2013, 35(10): 2222-2225.
胡晔, 陈彬, 寿佳妮, 等. 傅里叶自去卷积红外光谱法应用于柏子仁及其伪品柏树籽的鉴别研究 [J]. 中成药, 2013, 35(10): 2222-2225.
- [12] Lu J, Trnka M J, Roh S H, et al. Improved peak detection and deconvolution of native electrospray mass spectra from large protein complexes [J]. Journal of the American Society for Mass Spectrometry, 2015, 26(12): 2141-2151.
- [13] Xu X R, Pan Z Q, Li X H, et al. Analytical strategy of overlapping peaks based on wavelet transform and continuous Hopfield neural network [J]. Journal of Dalian University of Technology, 2019, 59(1): 97-105.
徐喜荣, 潘子琦, 李兴华, 等. 基于小波变换和连续 Hopfield 神经网络的重叠峰解析策略 [J]. 大连理工大学学报, 2019, 59(1): 97-105.

- [14] Yu K, Jiao Q L, Liu Z L, et al. Positioning of characteristic spectral peaks based on improved sine cosine algorithm [J]. *Acta Optica Sinica*, 2019, 39(9): 0930008.
于坤, 焦青亮, 刘子龙, 等. 基于改进正弦余弦算法的光谱特征峰定位方法 [J]. *光学学报*, 2019, 39(9): 0930008.
- [15] Sun G L, Zhang C L, Fang Y H, et al. A method based on wavelet transform for spectral feature extraction [J]. *Chinese Journal of Quantum Electronics*, 2006, 23(1): 22-26.
孙桂玲, 张翠兰, 方勇华, 等. 小波变换在光谱特征提取方面的应用 [J]. *量子电子学报*, 2006, 23(1): 22-26.
- [16] Barclay V J, Bonner R F, Hamilton I P. Application of wavelet transforms to experimental spectra: smoothing, denoising, and data set compression [J]. *Analytical Chemistry*, 1997, 69(1): 78-90.
- [17] Chen Y, Cheng Y N, Liu H L. Application of improved wavelet adaptive threshold de-noising algorithm in FBG demodulation [J]. *Optik*, 2017, 132: 243-248.
- [18] Shi L F, Qu J. Pretreatment of noise removal in infrared spectrum of lubricating oil [J]. *Journal of Naval Aeronautical and Astronautical University*, 2016, 31(5): 584-588.
史令飞, 瞿军. 润滑油红外光谱去噪预处理方法 [J]. *海军航空工程学院学报*, 2016, 31(5): 584-588.
- [19] Zhu Y M, Shi C J, Wu X, et al. Terahertz spectroscopy algorithms for biomedical detection [J]. *Acta Optica Sinica*. 2020, 41(1): 0130001.
朱亦鸣, 施辰君, 吴旭, 等. 生物医学检测中太赫兹光谱技术的算法研究 [J]. *光学学报*. 2020, 41(1): 0130001.