

# 基于多尺度局部信噪比的拉曼谱峰识别算法

姜承志<sup>1,3</sup> 孙 强<sup>1</sup> 刘 英<sup>1</sup> 梁静秋<sup>2</sup> 刘 兵<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所光电技术研发中心, 吉林 长春 130033  
<sup>2</sup> 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所应用光学国家重点实验室, 吉林 长春 130033  
<sup>3</sup> 中国科学院大学, 北京 100049

**摘要** 拉曼谱峰识别是拉曼光谱定性分析中的关键技术之一。针对现有方法的自动化程度不高、识别率低的问题,提出了一种新的基于多尺度局部信噪比(MLSNR)的拉曼谱峰识别算法。算法通过多尺度二阶差分运算,得到光谱的差分系数,再将差分系数除以估计出的噪声标准差,获得光谱的 MLSNR 矩阵,通过寻找 MLSNR 矩阵中的局部极大值形成的脊线来识别拉曼谱峰。算法采用自动阈值估计法去除噪声引起的局部极大值的干扰,可实现谱峰的自动化识别,不需设置任何参数。仿真实验结果表明:无论对单峰还是重叠峰,当拉曼谱峰信噪比大于等于 6 时 MLSNR 的谱峰识别准确率均高达 100%,即使对处于检测限的单峰,仍有 95% 以上的识别准确率。MLSNR 是一种切实可行的拉曼谱峰识别方法。

**关键词** 光谱学;谱峰识别;多尺度局部信噪比;拉曼光谱;连续小波变换

**中图分类号** O433.4 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201434.0630001

## Peak Detection Algorithm of Raman Spectra Based on Multi-Scale Local Signal-to-Noise Ratio

Jiang Chengzhi<sup>1,3</sup> Sun Qiang<sup>1</sup> Liu Ying<sup>1</sup> Liang Jingqiu<sup>2</sup> Liu Bing<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Opto-Electricity Technology Research Center, Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun, Jilin 130033, China  
<sup>2</sup> State Key Laboratory of Applied Optics, Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun, Jilin 130033, China  
<sup>3</sup> University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

**Abstract** Raman spectral peak recognition is one of the key technologies in qualitative analysis of Raman spectra. Due to the defects of low degree of automation and low recognition accuracy of the existing Raman spectral recognition methods, a new Raman peak recognition algorithm based on multi-scale local signal-to-noise ratio (MLSNR) is proposed. The algorithm gets the multi-scale second order difference coefficient of spectrum through multi-scale second order difference operation, then divides the multi-scale second order difference coefficient by the estimated noise standard deviation to obtain the MLSNR matrix of spectrum, and identifies Raman peaks by searching the ridges caused by local maxima in MLSNR matrix. The algorithm uses an automatic threshold estimation method to avoid the interference of local maximum caused by noise, and can recognize Raman peaks automatically without any parameter to be specified by human. The simulation result shows that no matter to singular peak or congested peaks, when the signal-to-noise ratio of Raman peak is greater than or equal to 6, the recognition accuracy of MLSNR algorithm is 100%, even to the singular peak at the detection limit, the recognition accuracy is more than 95%. MLSNR algorithm is a practical Raman spectral peak identification method.

**收稿日期**: 2013-12-03; **收到修改稿日期**: 2014-01-09

**基金项目**: 国家自然科学基金(60977001)、吉林省科技厅项目(20125092)

**作者简介**: 姜承志(1984—),男,博士研究生,主要从事光学仿真、光谱定性、定量分析算法等方面的研究。

E-mail: wangjcz@163.com

**导师简介**: 孙 强(1971—),男,博士,研究员,主要从事红外光学系统设计方面的研究。E-mail: sunq@ciomp.ac.cn (通信联系人)

**Key words** spectroscopy; spectral peak recognition; multi-scale local signal-to-noise ratio; Raman spectrum; continuous wavelet transform

**OCIS codes** 300.6450; 000.3860

## 1 引 言

拉曼光谱具有无损、信息丰富、无需样品制备等优点,在食品、生物、制药、材料、半导体、环境监测等众多领域得到了广泛的应用<sup>[1-3]</sup>。拉曼谱峰中包含大量物质的信息,因此谱峰识别是光谱定性分析中的关键步骤。目前,人们对于谱峰识别问题已经提出了多种方法。如 Reich<sup>[4-5]</sup>提出的  $k$  邻近距离法、Watzig<sup>[6]</sup>提出的模仿人眼识别色谱谱峰的方法、导数法等,这些方法都需要人工参与,且识别准确率不高。目前研究较多的是连续小波变换法(CWT)识别谱峰<sup>[7-11]</sup>,该方法通过在小波系数矩阵中搜索谱峰引起的局部极大值形成的脊线来识别谱峰。CWT法需要确定脊线长度阈值及脊线信噪比(SNR)阈值,但脊线长度与小波尺度的选择密切相关,脊线信噪比的意义也不是非常明确,这些问题的存在使得该方法不够稳健,不易使用,谱峰识别准确率、峰位定位准确度不高。

针对传统技术的缺陷,本文提出了一种新颖的识别拉曼谱峰的方法:多尺度局部信噪比法(MLSNR),利用谱峰在 MLSNR 矩阵中引起的局部极大值所形成的脊线来识别谱峰,脊线搜索过程中为了避免噪声的干扰,采用自动阈值方法剔除噪声引起的局部极大值。该方法直观、不需要设置任何参数、谱峰识别准确率高、识别出的峰位准确度高。详细分析了 MLSNR 方法的算法原理,利用数值计算软件 Matlab 进行了仿真分析,并与 CWT 法进行了对比分析。

## 2 多尺度信噪比法

### 2.1 定义

谱峰信噪比:定义谱峰信噪比(PSNR,  $R_{\text{PSNR}}$ )为  $R_{\text{PSNR}} = h_{\text{peak}}/\sigma_n$ ,  $h_{\text{peak}}$  为基线以上的无噪声干扰时的理想谱峰的峰高,  $\sigma_n$  为原始谱峰中所包含的噪声的标准差。这与 McCreery<sup>[12]</sup>对谱峰信噪比的定义稍有不同,他定义谱峰信噪比为谱峰平均高度比上噪声标准差。要求得谱峰平均高度,需要知道谱峰宽度,因此该定义使用起来并不方便。图 1 为一含有一个独立峰的仿真光谱,其中噪声为高斯噪声,独立峰位于  $1537.5 \text{ cm}^{-1}$  处,谱峰信噪比为 3,峰型为高斯函数。如图 1 所示,该谱峰基本上已被噪声淹

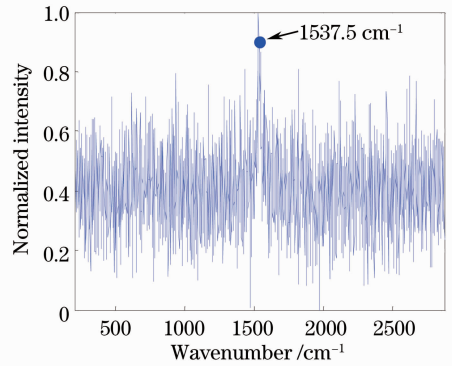


图 1 含单个谱峰的仿真谱

Fig. 1 Simulated spectrum with single peak

没,因此,定义谱峰信噪比等于 3 为谱峰的检测限。

多尺度二阶差分:设光谱信号向量为  $\mathbf{s} = [s_1, s_2, \dots, s_n]$ ,  $n$  为向量长度。定义尺度  $k$  下的二阶差分系数为  $c_i^k = s_{i-k} + s_{i+k} - 2s_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n, k \in \mathbb{Z}^+$ 。由于二阶差分运算属高通运算,该运算可以去除光谱中的基线的影响,但同时也会放大光谱中的噪声,因此对光谱做二阶差分运算之前,需要对其进行降噪操作。采用 Schulze 等<sup>[13]</sup>提出的循环三点零阶 Savitzky-Golay 滤波算法,该方法去噪能力强,同时可以很好地保留谱峰信息,且无需人工参与,可以实现去噪的自动化。

MLSNR:定义尺度  $k$  下的局部信噪比为

$$R_{\text{LSN}} = (2s_i - s_{i+k} - s_{i-k})/\sigma_n = -c_i^k/\sigma_n. \quad (1)$$

为了增加 MLSNR 矩阵与谱峰信噪比的相关性,MLSNR 矩阵也应是对理想光谱进行运算得到的。采用降噪后的光谱去逼近理想光谱。MLSNR 相比多尺度二阶差分具有更加明确的意义。由定义可知,当尺度与谱峰宽度匹配时,  $R_{\text{LSN}} = (2s_i - s_{i+k} - s_{i-k})/\sigma_n = 2h_{\text{peak}}/\sigma_n = 2R_{\text{PSNR}}$ ,即谱峰处局部信噪比应该等于两倍的谱峰信噪比。对处于检测极限的谱峰(谱峰信噪比为 3),尺度匹配时其局部信噪比的局部极大值应为 6。

图 2 为一幅仿真拉曼光谱,含有三个单峰,三个重叠峰,峰型为高斯函数形式,谱峰参数如表 1 所示,FWHM 为半峰全宽,谱峰信号和基线信号之比为 1。图 3 为采用 Schulze 提出的自动降噪方法降噪后的光谱。图 4 为降噪后光谱在尺度为 20 时的局部信噪比曲线。可以看到,由于二阶差分的高通特性,原光谱中基线已经被很好地滤除,并且在 6 个

谱峰处存在由谱峰引起的局部极大值, 这点与 CWT 法类似, 可以通过寻找 MLSNR 矩阵中的局部极大值形成的脊线来识别谱峰。

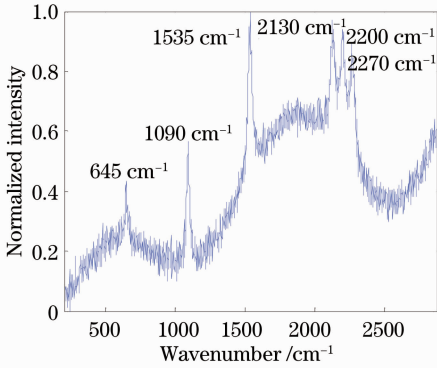


图 2 仿真拉曼光谱

Fig. 2 Simulated Raman spectrum

表 1 图 2 中仿真拉曼光谱的参数

Table 1 Parameters of the simulated Raman spectrum in Fig. 2

Peak position / $\text{cm}^{-1}$	645	1090	1535	2130	2200	2270
Peak height	3	6	9	6	6	6
FWHM / $\text{cm}^{-1}$	25	30	35	40	45	50
SNR of peak	6	12	18	12	12	12

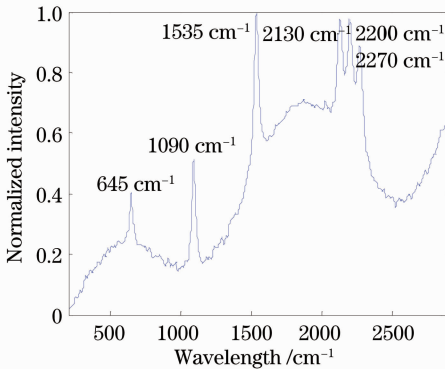


图 3 降噪后的仿真拉曼光谱

Fig. 3 Denoised simulated Raman spectrum

## 2.2 自动阈值估计

脊线搜索时为了避开噪声引起的局部极大值的干扰, 需要对噪声引起的局部极大值与谱峰引起的局部极大值进行区分。在尺度  $k$  的局部信噪比向量中以  $\text{med}[\text{abs}(R_{\text{LSNR}}^k)]/0.6745$  来估计噪声引起的局部极大值的标准差  $\sigma_{\text{imax}}^k$ , 其中  $\text{med}(\cdot)$  表示取中值,  $R_{\text{LSNR}}^k$  表  $k$  尺度中的所有局部极值。取  $5\sigma_{\text{imax}}^k$  作为噪声引起的局部极大值的上限。然而  $\sigma_{\text{imax}}^k$  容易受到谱峰个数的影响, 当平谱峰较多时可能会过大地估计噪声引起的局部极大值的上限, 因此将最大上限限定为 6 (处于检测极限的峰在匹配尺度上局部信噪

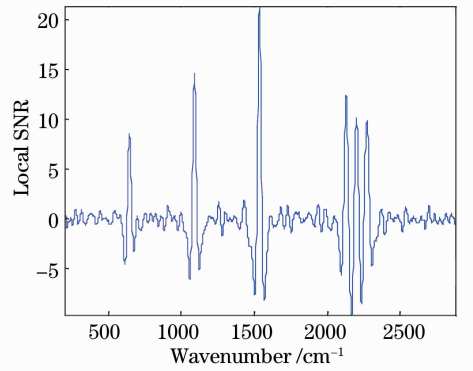


图 4 图 3 中光谱在尺度 20 时的局部信噪比

Fig. 4 Local SNR of the spectrum in Fig. 3 with scale of 20

比的理论局部极大值), 取  $k$  尺度上的阈值为  $V_{\text{th}}^k = \min(5\sigma_{\text{imax}}^k, 6)$ , 脊线搜寻时只取大于阈值  $V_{\text{th}}^k$  的局部极大值。

## 2.3 谱峰位置估计

图 5 为  $1090 \text{ cm}^{-1}$  处的单峰及  $2130 \text{ cm}^{-1}$  处的重叠峰引起的脊线上信噪比局部极大值随尺度变化的曲线, 可以看到, 对于  $1090 \text{ cm}^{-1}$  处的单峰, 当尺度较小时, 局部极大值随着尺度的增大而较快地增大, 尺度与谱峰宽度相互匹配时, 局部极大值随尺度的变化趋于平缓, 这是由于受到了基线的影响, 利用这点可以估计单峰的谱峰宽度; 对于  $2130 \text{ cm}^{-1}$  处的重叠峰, 当尺度增大到一定程度时, 局部信噪比会呈现下降的趋势, 这是由于受到了相邻谱峰的影响。因此为了避开基线及相邻峰对峰位判断的干扰, 对该曲线上第一个局部极大值之前的所有尺度上的峰位取众数作为最终估计出的谱峰位置。

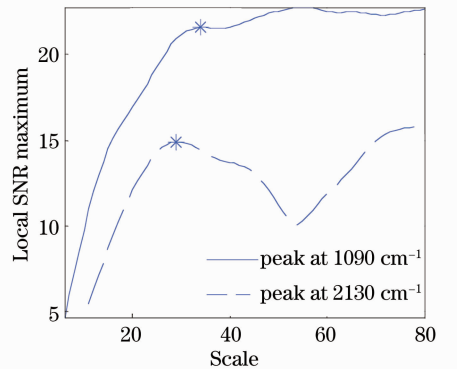


图 5  $1090 \text{ cm}^{-1}$  处单峰及  $2130 \text{ cm}^{-1}$  处重叠峰引起的局部极大值随尺度的变化

Fig. 5 Local maxima caused by singular peak at  $1090 \text{ cm}^{-1}$  and congested peak at  $2130 \text{ cm}^{-1}$  versus scale

## 2.4 算法实现过程

下面给出了 MLSNR 算法具体实现过程, 图 6

为算法实现的流程图。

1) 估计噪声标准差  $\sigma_n$ 。噪声标准差估计采用 Schulze 等<sup>[14]</sup> 提出的二阶差分法,该方法有非常好的估计准确度及稳健性。

2) 光谱外插。为减小边缘效应的影响,采用 Schulze 等<sup>[15]</sup> 提出的方法对原始光谱进行外插。

3) 光谱降噪。采用 Schulze 等提出的循环三点零阶 Savitzky-Golay 滤波法对光谱进行降噪。

4) 计算多尺度二阶差分,差分系数矩阵  $C$  除以估计噪声标准差  $\sigma_n$  得到多尺度局部信噪比矩阵  $M_{LSNR}$ 。

5) 搜索脊线。在尺度  $k$  对应的局部信噪比向量中求取阈值  $V_{th}^k$ ,只取大于  $V_{th}^k$  的局部极大值。

6) 计算峰位。对脊线上信噪比随尺度变化曲线上第一个局部极大值之前的所有尺度上的峰位取众数得到估计出的谱峰位置。

7) 输出识别出的谱峰峰位。

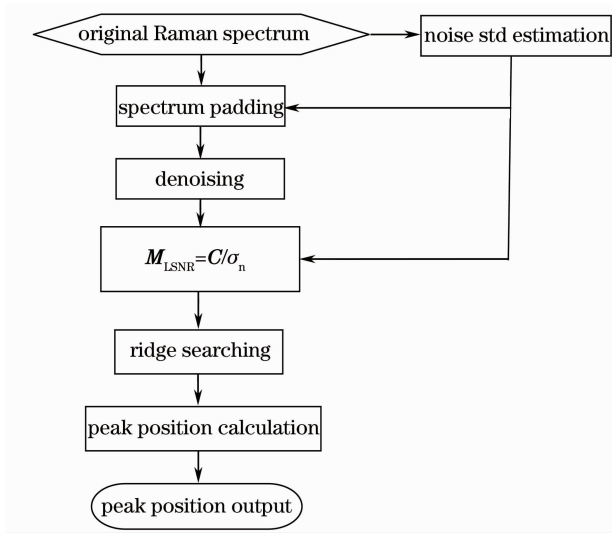


图 6 MLSNR 算法流程图

Fig. 6 Flow chart of MLSNR algorithm

### 3 仿真和实验

#### 3.1 谱峰识别过程

为了更好地说明 MLSNR 法识别谱峰的过程,用 MLSNR 法对图 2 中的仿真拉曼光谱进行谱峰了识别。图 7 为尺度为 5, 6, 7, ..., 50 时得到的 MLSNR 矩阵,从图中可以看到谱峰引起的局部极大值所形成的脊线,图 8 为搜寻到的脊线,图 9 中 \* 标识出来的峰为识别出的谱峰,可以看到,三个独立峰与三个重叠峰都被准确地识别了出来。

#### 3.2 采用仿真拉曼光谱对比算法性能

利用仿真拉曼光谱对比 MLSNR 法与 CWT 法

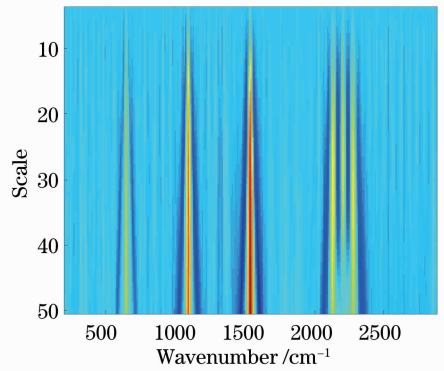


图 7 多尺度局部信噪比矩阵

Fig. 7 Multi-scale local SNR matrix

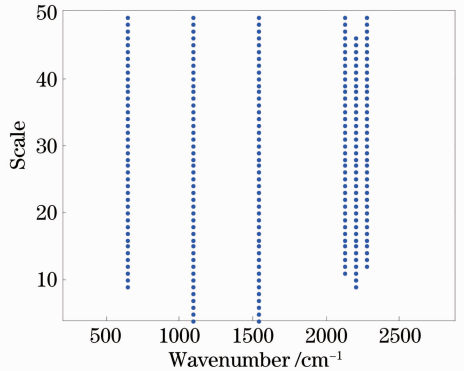


图 8 搜寻到的脊线

Fig. 8 Ridges by searching

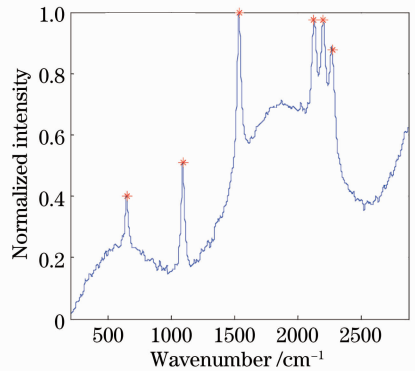


图 9 识别出的谱峰

Fig. 9 Identified spectrum peaks

的谱峰识别准确率及识别出的峰位准确度。

#### 3.2.1 仿真方法

分别使用仿真出的含有单个独立峰的光谱和含有三个相互重叠峰的光谱测试 MLSNR 法与 CWT 法识别独立峰与重叠峰的能力。含单个独立峰的光谱如图 1 所示,谱峰位于  $1537.5 \text{ cm}^{-1}$  处,半峰全宽为  $35 \text{ cm}^{-1}$ ,峰高为 3;含三个相互重叠峰的光谱如图 10 所示,峰位分别为  $1457.5, 1537.5, 1617.5 \text{ cm}^{-1}$ ,半峰全宽均为  $35 \text{ cm}^{-1}$ ,峰高均为 3。通过向理想仿真光

谱中添加 1000 次相同标准差的随机噪声来产生 1000 幅相同信噪比的光谱,统计其谱峰被准确识别的概率及识别出的谱峰位置的准确度。观察其谱峰信噪比分别为 3、4、 $\dots$ 、20 时两种方法谱峰识别准确率及识别出的峰位准确度的差异。单峰的谱峰识别准确率曲线如图 11 所示,谱峰位置识别准确度对比如图 12 所示,图中圆圈与方框所在位置的纵坐标分别表示 CWT 法与 MLSNR 法识别出的谱峰位置与理论位置差的绝对值的均值,上、下方的横杠表示识别出的谱峰位置与理论位置差的绝对值的标准差。为了清晰对比,将 CWT 法的结果向左平移了一些。重叠峰的谱峰识别准确率曲线如图 13 所示,谱峰位置识别准确度对比如图 14 所示。

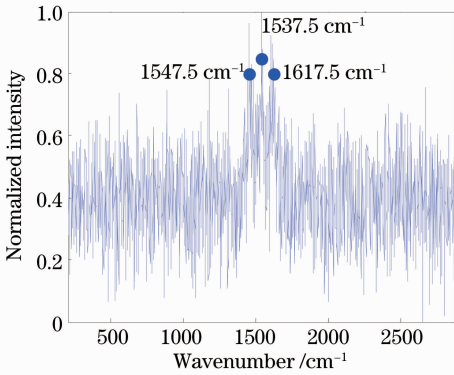


图 10 含三个重叠峰的仿真谱

Fig. 10 Simulated spectrum with three congested peaks

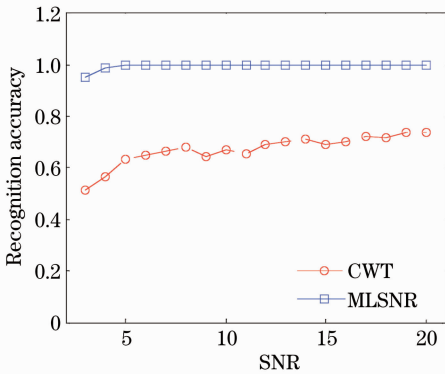


图 11 单峰识别准确率对比

Fig. 11 Recognition accuracy comparison of singular peak

对一组谱峰信噪比分别为 3、4、 $\dots$ 、20 时的单峰(图 1)及重叠峰(图 10),采用 MLSNR 法及 CWT 法对其峰位进行估计,结果如表 2 所示,表中“/”左侧为 CWT 法估计出的峰位,“/”右侧为 MLSNR 法估计出的峰位。

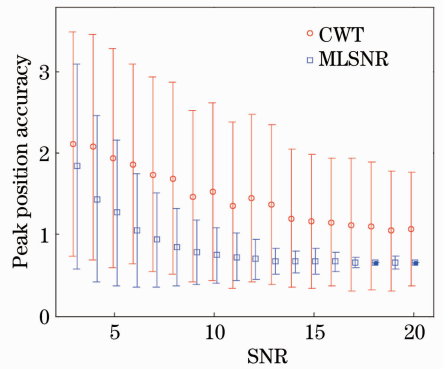


图 12 单峰位置识别准确度对比

Fig. 12 Recognition accuracy comparison of singular peak position

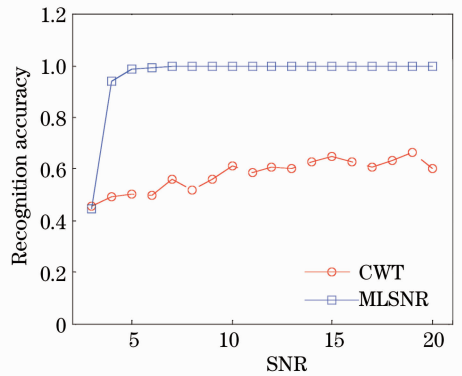


图 13 重叠峰识别准确率对比

Fig. 13 Recognition accuracy comparison of congested peaks

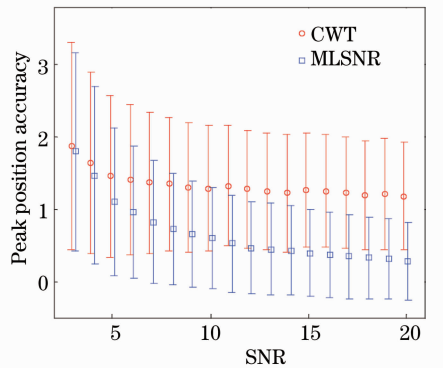


图 14 重叠峰位置识别准确度对比

Fig. 14 Recognition accuracy comparison of congested peak position

对比 MLSNR 法及 CWT 法谱峰识别性能时,均是对经过循环三点零阶 Savitzky-Golay 滤波法降噪后的光谱进行识别的,降噪操作对两种方法的识别率有相同的贡献,结果具有可比性。

表 2 估计出的峰位  
Table 2 Estimated peak positions

Ideal position / $\text{cm}^{-1}$	Single peak / $\text{cm}^{-1}$		Congested peak / $\text{cm}^{-1}$	
	1537.5	1457.5	1537.5	1617.5
3	1532.9/1536.8	1455.8/1457.1	1535.5/1536.8	1620.5/1617.9
4	1539.5/1538.2	1455.8/1455.8	1542.1/1539.5	1612.6/1617.9
5	1535.5/1538.2	1458.4/1457.1	1534.2/1534.2	1612.6/1617.9
6	1539.5/1538.2	1458.4/1457.1	1538.2/1536.8	1620.5/1619.2
7	1535.5/1536.8	1454.5/1455.8	1538.2/1536.8	1619.2/1619.2
8	1539.5/1536.8	1458.4/1457.1	1542.1/1538.2	1613.9/1616.6
9	1535.5/1536.8	1458.4/1457.1	1538.2/1536.8	1617.9/1617.9
10	1538.2/1536.8	1457.1/1455.8	1538.2/1536.8	1613.9/1616.6
11	1539.5/1538.2	1459.7/1457.1	1538.2/1536.8	1617.9/1617.9
12	1542.1/1538.2	1457.1/1458.4	1538.2/1536.8	1617.9/1617.9
13	1539.5/1538.2	1461.1/1458.4	1535.5/1535.5	1615.3/1616.6
14	1538.2/1536.8	1458.4/1457.1	1539.5/1538.2	1612.6/1617.9
15	1538.2/1536.8	1458.4/1457.1	1536.8/1535.5	1613.9/1617.9
16	1536.8/1538.2	1457.1/1457.1	1536.8/1536.8	1617.9/1617.9
17	1538.2/1536.8	1457.1/1457.1	1538.2/1536.8	1617.9/1617.9
18	1538.2/1538.2	1457.1/1457.1	1538.2/1538.2	1620.5/1617.9
19	1539.5/1538.2	1461.1/1458.4	1536.8/1538.2	1620.5/1617.9
20	1536.8/1538.2	1455.8/1457.1	1535.5/1536.8	1617.9/1617.9

Signal-to-noise ratio

### 3.2.2 仿真结果分析

由图 11 可以看到,对于单峰的识别准确率,两种方法的谱峰识别率都随着信噪比的提高呈整体上升的趋势,MLSNR 法具有非常高的谱峰识别准确率,即使对处于检测限的谱峰(谱峰信噪比等于 3)仍有 95.1%的识别准确率,谱峰信噪比等于 4 时识别准确率为 98.7%,谱峰信噪比等于 5 时为 99.7%,当谱峰信噪比大于等于 6 时谱峰识别准确率高达 100%,而 CWT 法在检测限附近识别准确率仅为 51%,在较高信噪比时识别率相对较好,但最高为 74%,MLSNR 法明显优于 CWT 法。对于单峰的峰位估计准确度,由图 12 可以看到,随着信噪比的提高,两种方法识别谱峰位置的准确度都在提高。

MLSNR 法识别出的峰位在正确度和精确度上都要优于 CWT 法,因此,MLSNR 法识别谱峰位置的准确度要高于 CWT 法。

对于重叠峰的识别准确率,由图 13 可知,谱峰信噪比等于 3 时 MLSNR 法的识别率下降至 44%,但识别率随着谱峰信噪比的增加迅速上升,谱峰信噪比等于 4 时识别率为 94.3%,谱峰信噪比等于 5 时识别率为 99%,谱峰信噪比等于 6 时识别率为 99.6%,谱峰信噪比大于等于 7 时识别率达到 100%,而 CWT 法在整个谱峰信噪比变化范围内识别率均呈现一定程度的下降趋势,最高识别率为 66%。谱峰位置识别准确度对比如图 14 所示,MLSNR 法识别谱峰位置的准确度高于 CWT 法。

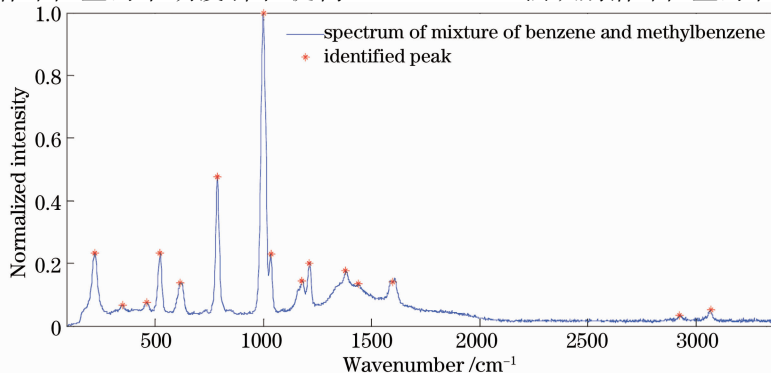


图 15 MLSNR 法识别苯与甲苯混合物的拉曼谱峰

Fig. 15 Raman peaks of mixture of benzene and methylbenzene identified by MLSNR

由表 2 中两种方法估计出的峰位对比也可以发现, MLSNR 法在峰位估计的正确度及精确度上都优于 CWT 法。

### 3.3 采用实测光谱验证算法功能

采用海洋光学 USB2000+ 光谱仪测量了苯、甲苯、四氯化碳、甲醇、乙醇、甲醛、乙醛及它们的部分混合物等 20 种样品的拉曼光谱。激发波长为 785 nm, 功率为 300 mW, 积分时间为 4 s, 探测器采用索尼 ILX511 线阵 CCD, 像素数为 2048, 光谱分辨率约为 1.7 nm。使用 MLSNR 法对所测光谱进行谱峰识别, 结果各样品的拉曼谱峰均得到了准确的识别, 其中苯与甲苯以一定的比例混合后所测得的拉曼光谱如图 15 所示, 可见 MLSNR 法已将各谱峰识别出来。

## 4 结 论

MLSNR 法通过寻找 MLSNR 矩阵中的脊线来识别谱峰, 非常直观, 无需人为设置参数, 可实现谱峰识别的自动化, 且不需要提前对拉曼光谱做去背景处理, 避免了去背景操作导致的光谱信息损失。仿真结果表明, 与 CWT 法相比, MLSNR 法谱峰识别能力更强、识别出的峰位准确度更高, 是一种行之有效的拉曼谱峰识别方法。目前, 利用物质的拉曼光谱对其进行判别分析主要采用全谱匹配法。现代光谱仪器分辨率很高, 光谱向量往往含有大量的数据点, 全谱匹配需要用全部光谱数据参与计算, 因此非常耗时。MLSNR 谱峰识别算法十分可靠, 谱峰识别率高达 100%, 使得利用峰位信息对物质进行判别分析成为了可能。

### 参 考 文 献

- 1 An Yan, Liu Ying, Sun Qiang, *et al.*. Design and development of optical system for portable Raman spectrometer [J]. *Acta Optica Sinica*, 2013, 33(3): 0330001.
- 2 安 岩, 刘 英, 孙 强, 等. 便携式拉曼光谱仪的光学系统设计与研制[J]. *光学学报*, 2013, 33(3): 0330001.
- 3 Niu Liyuan, Lin Manman, Li Xue, *et al.*. Raman spectroscopic analysis of single white blood cell of DM mouse *in vivo* [J]. *Laser*

4. *Optoelectronics Progress*, 2012, 49(6): 063001.
- 牛丽媛, 林漫漫, 李 雪, 等. 活体糖尿病小鼠中单个白细胞的拉曼光谱分析[J]. *激光与光电子学进展*, 2012, 49(6): 063001.
- 3 Ye Yuhuang, Chen Yang, Li Yongzeng, *et al.*. Discrimination of nasopharyngeal carcinoma and normal nasopharyngeal cell lines based on confocal Raman microscopy [J]. *Chinese J Lasers*, 2012, 39(5): 0504003.
- 叶宇煌, 陈 阳, 李永增, 等. 基于拉曼光谱的鼻咽癌与正常鼻咽细胞株的分类研究[J]. *中国激光*, 2012, 39(5): 0504003.
- 4 Gregor Reich. Recognizing chromatographic peaks with pattern recognition methods; Part 1. development of a k-nearest-neighbour technique [J]. *Analytica Chimica Acta*, 1987, 201: 153-170.
- 5 Gregor Reich. Recognizing chromatographic peaks with pattern recognition methods III. Application of the algorithm for peak recognition in trace analysis [J]. *Chromatographia*, 1987 24(1): 659-665.
- 6 H Watzig. Peak recognition technique by a computer program copying the human judgement [J]. *Chromatographia*, 1992, 33 (5-6): 218-224.
- 7 Pan Du, Warren A Kibbe, Simon M Lin. Improved peak detection in mass spectrum by incorporating continuous wavelet transform-based pattern matching [J]. *Bioinformatics*, 2006, 22 (17): 2059-2065.
- 8 Andrew Wee, David B Grayden, Yonggang Zhu, *et al.*. A continuous wavelet transform algorithm for peak detection [J]. *Electrophoresis*, 2008, 29(20): 4215-4225.
- 9 Zhijian Cai, Jianhong Wu. An automatic peak detection algorithm for Raman spectroscopy based on wavelet transform [C]. *SPIE*, 2011, 8200: 82000E.
- 10 Gordon Cooper, Maria Kubik, Kurt Kubik. Wavelet based Raman spectra comparison [J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2011, 107(1): 65-68.
- 11 Miroslav Morhac. An algorithm for determination of peak regions and baseline elimination in spectroscopic data [J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A: Accelerators, Spectrometers, Defectors and Associated Equipment*, 2009, 600 (2): 478-487.
- 12 Richard L McCreery. *Raman Spectroscopy for Chemical Analysis* [M]. New York: Wiley Interscience, 2000. 49-50.
- 13 H Georg Schulze, Rod B Foist, Andre Ivanov, *et al.*. Fully automated high-performance signal-to-noise ratio enhancement based on an iterative three-point zero-order savitzky-golay filter [J]. *Applied Spectroscopy*, 2008, 62(10): 1160-1166.
- 14 H Georg Schulze, Marcia M L Yu, Christopher J Addison, *et al.*. Automated estimation of white gaussian noise level in a spectrum with or without spike noise using a spectral shifting technique [J]. *Applied Spectroscopy*, 2006, 60(7): 820-825.
- 15 H Georg Schulze, Rod B Foist, Kadek Okuda, *et al.*. A small-window moving average-based fully automated baseline estimation method for Raman spectra [J]. *Appl Spectrosc*, 2012, 66(7): 757-764.