

直接光谱法水体 COD 检测多场景优化方法

刘恩华, 吴德操*, 王杰, 谭万尧, 蒲君豪, 罗彬彬**, 汤斌, 龙邹荣, 赵明富

重庆理工大学光纤传感与光电检测重庆市重点实验室, 重庆 400054

摘要 提出一种多场景优化的光谱分类建模解算方法:首先,通过颗粒物 Mie 散射仿真分析,构建幂函数修正方程,以直接拟合法对样本光谱进行精确浊度校正;然后,利用吸光度归一化法获取不同场景的线性特征光谱,形成场景特征库;使用偏最小二乘法(PLS)为每个场景建立解算模型,形成化学需氧量(COD)解算模型库。对未知水样本进行 COD 检测时,先通过杰卡德(Jaccard)相似性理论将其归一化光谱与场景库线性特征谱进行匹配,识别其归属场景,再获取解算库中的最优解算参数来计算 COD 浓度。实验结果表明,所提方法可获得较高的场景匹配精度,有效降低多场景条件下的 COD 解算误差,具备良好的实用价值。

关键词 光谱学;直接光谱法;多场景优化;浊度校正;COD 解算

中图分类号 O657.3

文献标志码 A

doi: 10.3788/AOS202141.2230001

Multi-scene Optimization Method of Water COD Measurement Based on Direct Spectroscopy

Liu Enhua, Wu Decao*, Wang Jie, Tan Wanyao, Pu Junhao, Luo Binbin**, Tang Bin,
Long Zourong, Zhao Mingfu

Chongqing Key Laboratory of Optical Fiber Sensor and Photoelectric Detection, Chongqing University of Technology,
Chongqing 400054, China

Abstract This paper proposed a solution method of spectral classification modeling for multi-scene optimization. Firstly, a modified power function equation was constructed through a simulation analysis of the Mie scattering of particles, and the direct fitting method was used to achieve accurate turbidity correction of the sample spectra. Then, the absorbance normalization method was employed to obtain the linear feature spectra of different scenes and develop a scene-based feature library. Subsequently, the partial least-squares (PLS) method was applied to build a solution model for each scene and thereby establish a chemical oxygen demand (COD) solution model library. When an unknown water sample went through the COD detection, its normalized spectrum was first matched with the linear feature spectra of the scene-based library through the Jaccard similarity theory for the identification of the scene it belonged to. Then, its COD concentration was calculated with the optimal solution parameters obtained from the solution library. The experimental results show that the proposed method holds application value in that it delivers high scene-matching accuracy and reduces the COD solution error under multi-scene conditions.

Key words spectroscopy; direct spectroscopy; multi-scene optimization; turbidity correction; chemical oxygen demand solution

OCIS codes 140.3070; 140.3325; 140.3515

收稿日期: 2021-04-19; 修回日期: 2021-04-29; 录用日期: 2021-06-01

基金项目: 重庆市自然科学基金面上项目(cstc2019jcyj-msxmX0243)、重庆市教委科学技术研究计划青年项目(KJQN202001117)、重庆市教委科学技术研究计划重点项目(KJZD-K201905601)、重庆市研究生创新项目(CYS20350)、重庆理工大学研究生创新项目(clycx20202034、ycx20192054)

通信作者: *wudecao@163.com; **luobinbin@cqut.edu.cn

1 引言

化学需氧量(chemical oxygen demand, COD)是反映水体中以可溶有机物为主的还原性污染物含量的重要水质参数^[1],其检测方法众多,目前应用最普遍的是高锰酸钾氧化法与重铬酸钾氧化法,但是这两种方法均存在水样预处理繁杂、设备成本高、测量周期长、二次污染等问题,不便于在移动式监测、突发污染预警、污染源定位等应用环境下使用。基于朗伯-比尔定律的直接紫外-可见吸收光谱检测法,具有检测速度快、成本低、设备体积小等优点,已成为近年来的研究热点^[2]。该方法采用光束透射式测量方式,利用样本的吸收光谱可解算 COD、生化需氧量、硝酸盐氮等多种水质参数,但也存在易受浊度干扰、数据处理难度大、测量精度偏低等问题。

现今,随着水体紫外-可见吸收光谱与 COD 之间的关系模型被逐渐挖掘,已有不少学者基于偏最小二乘(partial least squares, PLS)^[3]、反向传递人工神经网络(back propagating artificial neural net, BP-ANN)^[4]、支持向量机(support vector machine, SVM)^[5]等机器学习方法建立了光谱 COD 解算模型。但是,水体中有机污染物种类十分复杂,不同污染物的光谱特征及其对水质参数的贡献率存在较大差异,这就使得某一水质解算模型仅适用于成分相对稳定的测量环境。而且,即便是相同的水体,受人类活动、水生物繁殖、季节更替等因素的影响,污染物种类和各污染物的浓度也会随时间呈周期性变化^[6-7]。当出现极端天气或突发污染事件时,污染物组分更可能发生结构性改变。因此,单一的解算模型对水体变化的适应力较弱,短期稳定性和长期检测精度均受到限制,以致于难以构建一种普适模型,能同时应对各种具有一定差异的测量场景,如生活污水、工业废水、不同流域或不同气候条件下的地表水等,这就严重制约了光谱法在水质检测中的推广使用。

有鉴于此,本文研究了一种多场景优化的光谱分类建模解算方法,通过建立包含多种水体场景光谱模式的解算模型库,利用光谱线性特征对未知水样进行场景识别,然后匹配模型库中的最优模型来解算 COD 浓度,从而改善光谱测量法的多场景兼容性。

2 原理和方法

2.1 样本光谱的浊度校正

由朗伯-比尔定理可知,溶解物浓度与其吸光度

成正比,但透射法获取的样本光谱实为消光谱,是溶解物的光吸收和悬浮颗粒物光散射共同作用的结果,其中散射分量随颗粒物粒径和浓度不同具有显著的非线性特征,将严重影响光谱法水质检测的测量精度^[8],因而将其称为浊度干扰。浊度干扰的校正方法一般可分为两类:散射建模法^[9]和直接拟合法^[10]。散射建模法要求水体稳定,颗粒物粒径分布变化不大,因此在多场景条件下直接拟合法则更具优势。

由于常见地表水体在紫外-可见光谱的主要吸光物质为可溶有机物和硝氮,敏感谱段为 200~400 nm,部分水体还包含有色可溶有机物(colored dissolved organic matter, CDOM),敏感段可延伸至 450 nm^[8],而浊度干扰对全谱段均有影响,在 450 nm 以后起主导作用。因此,直接拟合法通常将 450~1100 nm 波段光谱的几个谱点或整个谱段拟合为某浊度的特征函数,并以此函数曲线预测浊度干扰在紫外段的消光趋势。拟合方法可根据函数类型选择“最小二乘法”或“多元非线性回归法”,浊度校正则通过将原光谱与拟合曲线进行差分实现。

直接拟合法的校正精度与所选的浊度特征拟合函数密切相关,常见的拟合函数有直线方程、二次多项式、指数函数等,但这些函数的拟合精度和稳定性都普遍偏低。为了寻找更合适的拟合函数,本文以泥沙型颗粒物为例(主要成分为硅酸盐),对 0.1, 1, 10, 100 μm 这 4 种典型粒径进行 Mie 散射^[11]仿真分析。考虑到 4 种粒径的颗粒物在相同浓度(即单位体积内颗粒数量相等时)下消光强度相差数个量级,为了便于讨论,按“浊度统一”方式对消光谱进行纵向尺度缩放:首先参照浊度国标检测法,以 860 nm 为入射光波长,仿真计算几种粒径的单颗粒物在 90° 方向上的散射光强比例;然后将此比例的倒数作为 4 种颗粒物达到相同浊度所需要的相对浓度,并计算它们在该浓度下的消光谱,如图 1(a)所示。小颗粒物的消光谱近似符合幂函数 $f = \lambda^B$ 分布^[12],其中 λ 为波长, B 为小颗粒物粒径分布系数,但谱线随颗粒物粒径增大逐渐趋于平直,使得在包含大颗粒物的水体中直接使用幂函数拟合的效果不佳。因此,构建幂函数修正拟合方程

$$f_{\text{Turb}}(\lambda) = A(\lambda^B + C), \quad (1)$$

式中: f_{Turb} 为散射消光度; A 为颗粒物浓度系数; C 为大颗粒物补偿系数。这样可以更好地拟合由包含不同粒径的混合颗粒物引起的浊度干扰。由图 1(a)可知,该方程能较好地拟合 4 种颗粒物的仿真消光谱。

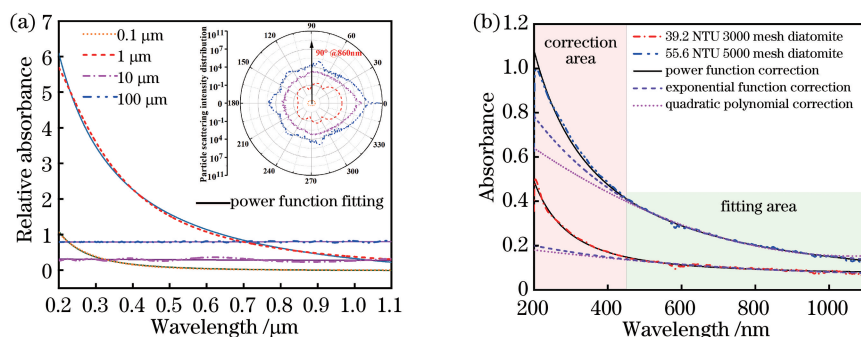


图 1 基于幂函数修正方程的浊度直接拟合校正结果。(a) 0.1~100 μm 粒径颗粒物散射仿真光谱的幂函数修正方程拟合结果;(b)硅藻土样本光谱的直接拟合浊度校正结果

Fig. 1 Turbidity direct fitting correction results based on modified power function. (a) Fitting results of the particles' simulation spectra by modified power function with particle size of 0.1–100 μm; (b) turbidity direct fitting correction results of diatomite sample spectra

利用 3000 目和 5000 目硅藻土研磨粉(中值粒径 D_{50} 约为 $5 \mu\text{m}$ 与 $2.7 \mu\text{m}$)分别配置悬浊液进行直接拟合校正测试,测试结果如图 1(b)所示。由于样本光谱近似为纯散射消光谱,拟合曲线应与原光谱尽可能重叠。可以看到,对两种样本应用幂函数修正方程得到的拟合曲线与原光谱在校正区的均方根误差分别为 0.042 与 0.028,明显优于指数函数 $f_{\text{Turb}}(\lambda) = AB^{\lambda} + C$ 拟合的均方根误差 0.115 与 0.108,以及二次多项式 $f_{\text{Turb}}(\lambda) = A\lambda^2 + B\lambda + C$ 拟合的均方根误差 0.125 与 0.176,证明应用幂函数修正方程的直接拟合法可获得更好的浊度校正效果。

需要特别指出的是,对于部分化工和印染企业产生的有色废水样本,以及包含大量水溶叶绿素的湖泊水华样本,由于其溶解物在 $450 \sim 1100 \text{ nm}$ 波段可能出现强吸收,基于幂函数修正方程的拟合算法在这类场景下的校正稳定性会有所降低。

2.2 场景特征提取与样本的场景匹配

理论上,经过浊度校正后,相同场景下水样本敏感波长的吸光度与目标溶解物浓度呈线性关系,因此可利用(2)式对样本光谱 S 进行吸光度归一化。

$$\varphi(\lambda) = \frac{S(\lambda) - S_{\min}}{S_{\max} - S_{\min}}, \quad (2)$$

式中; $S(\lambda)$ 为不同波长的吸光度; S_{\max} 为光谱中吸光度的最大值; S_{\min} 为吸光度最小值; $\varphi(\lambda)$ 为归一化吸光度。基于(2)式对 $200 \sim 450 \text{ nm}$ 敏感谱段进行处理,结果如图 2 所示,同一场景中不同样本的归一化光谱趋于一致,而不同场景的归一化光谱则具有显著差异。因此,可将该场景样本归一化光谱的平均值定义为此场景的线性特征光谱。若所有目标场景的线性特征谱均为已知时,则可根据此构建场景特征库,并进一步实现待测水样本的精确场景匹配。

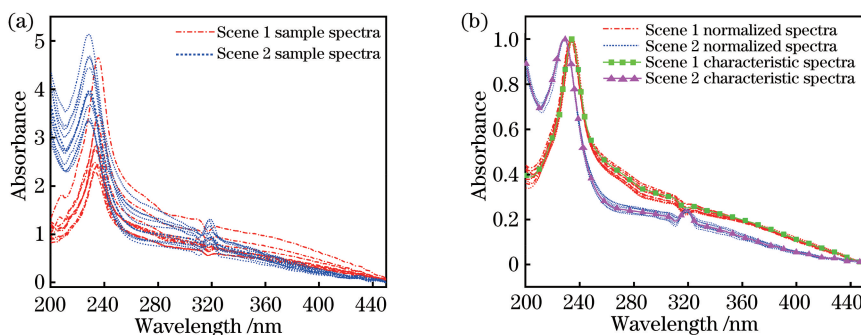


图 2 两种场景不同 COD 浓度的样本光谱。(a) 原始光谱;(b) 吸光度归一化光谱

Fig. 2 Spectra of samples with different COD concentrations in two scenes. (a) Original spectra; (b) absorbance normalized spectra

待测样本的场景匹配方法基于杰卡德(Jaccard)相似性理论^[13]实现,令光谱 S 包含 n 个波

长点,即 $S = \{S_i\}, i = 1, 2, \dots, n$,其一阶导数为 S' 。利用(3)式计算 S' 的二进制一阶导数谱 $W = \{W_i\}$ 。

$$W_i = \begin{cases} 1, & S'_i > 0 \\ 0, & S'_i < 0. \\ W_{i-1}, & S'_i = 0 \end{cases} \quad (3)$$

对待测样本的归一化光谱和所有场景的线性特征谱执行上述变换,设样本的变换结果为 W^a ,而某个场景特征谱的变换结果为 W^b ,统计这两者在所有波长点上 W_i 相同的次数 J 和不同的次数 K 。那么待测样本与该场景的匹配度可定义为 $C = J/(J+K)$ 。通过计算待测样本与所有场景的匹配度,当 C 达到极大值 C_{max} 时,极大值对应的场景即为待测样本的归属场景。

此外,当 C_{max} 明显偏低时,可判定该样本来自未知场景,或提示该样本的归属场景污染物组分可

能发生了明显变化,应及时修正场景匹配模型库和 COD 解算模型库,避免检测出现严重失准。一般地,可以定义匹配阈值 $C_{thre} = 0.7$,若 $C_{max} < 0.7$,表示匹配出现异常。

2.3 多场景优化 COD 检测方法

多场景优化的 COD 检测方法流程如图 3 所示。首先实验获取多场景条件下的光谱训练集,并对训练集光谱进行浊度校正;其次,利用吸光度归一化法得到各场景的线性特征光谱,建立多场景光谱特征库;最后,利用化学法标记训练光谱的 COD 浓度,并基于机器学习算法分别建立各场景下光谱法 COD 定量解算模型,形成多场景 COD 解算模型库。

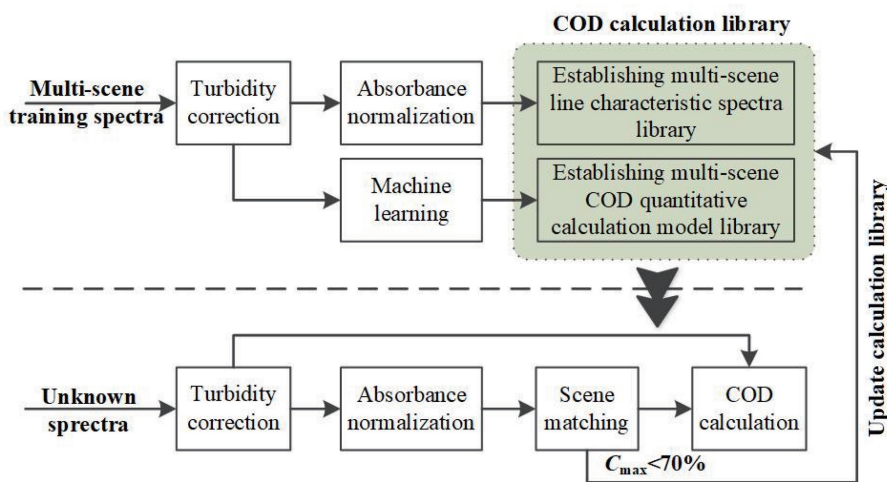


图 3 多场景优化的 COD 检测方法流程图

Fig. 3 Flow chart of multi-scene optimized COD measurement method

待测样本光谱经过浊度校正后,通过光谱线性特征场景匹配,选中解算模型库中的最优解算参数,并最终测得精确的 COD 浓度值。

2.4 实验材料与光谱测量系统

利用图 4 所示的光谱测量系统获取水样本光谱。其中,光谱仪选用海洋光学公司生产的型号为 Maya 2000 Pro 光谱仪,探测范围为 200~1100 nm;光源为海洋光学公司生产的 DH2000 氙卤灯;样本池长度为 10 mm。实验收集了 4 种不同场景的工

业废水(德阳化工厂、利尔化工厂、某市化工九厂、某硫酸钾工厂)、4 种不同场景的生活污水(某污水处理厂进水口水样、某污水处理厂出水口水样、某高校生活污水排水口水样、某高校排水沟污水)及 2 种不同场景的地表水(某高校观赏湖水样、芙蓉溪水),按顺序编号为场景 1~10,共采集光谱 167 组。同时,所有样本均利用哈希 DRB200 消解仪及 DR2800 多参数水质测量仪通过重铬酸钾法获取其准确的 COD 浓度。

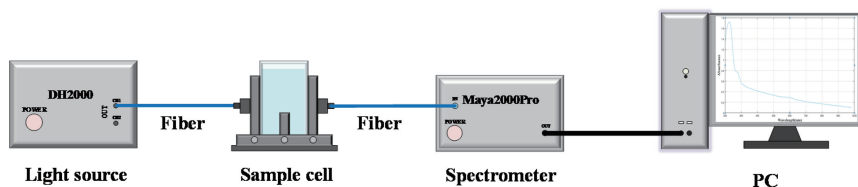


图 4 水样本光谱测量系统示意图

Fig. 4 Schematic of water sample spectrum measurement system

3 数据处理与分析

3.1 多场景光谱匹配实验

实验中,首先从每个场景随机选取 5 组样本光谱,共 50 组光谱组成测试集。其中,第 1~5 组光谱为场景 1 的测试集,第 6~10 组光谱为场景 2 的测试集,以此类推。然后,利用剩余光谱数据依据图 3 所示方法为 10 个场景中的前 9 个场景创建线性特征匹配数据库。第 10 个场景作为未知场景参与实验,对应测试集的第 46~50 组光谱。

测试集样本光谱的场景匹配结果如图 5 所示,由对 C_{max} 的统计分析可知,前 9 个场景的测试光谱全部匹配成功。而属于场景 10 的 5 组光谱由于在数据库中未包含其线性特征,被匹配到错误场景中,但由于 C_{max} 明显偏低(低于阈值 0.7),从而被算法正确判定为未知场景。作为对比,利用当前的测试集与训练集,选取 SVM、BP-ANN、K-近邻(K-nearest neighbor,K-NN)3 种典型机器学习分类方法^[14]对前 9 个场景进行匹配测试,其结果如图 6 和表 1 所示。

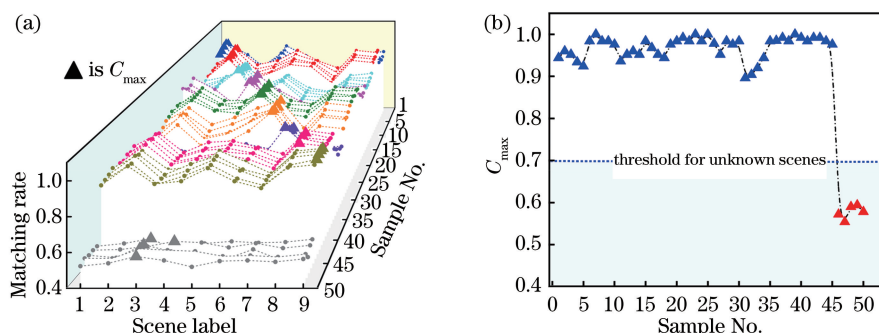


图 5 测试集样本光谱的场景匹配结果。(a)样本光谱的场景匹配度;(b)样本光谱的 C_{max} 统计值

Fig. 5 Scene matching results of the sample spectra in the test set. (a) Scene matching rate of the sample spectra; (b) C_{max} of the sample spectra

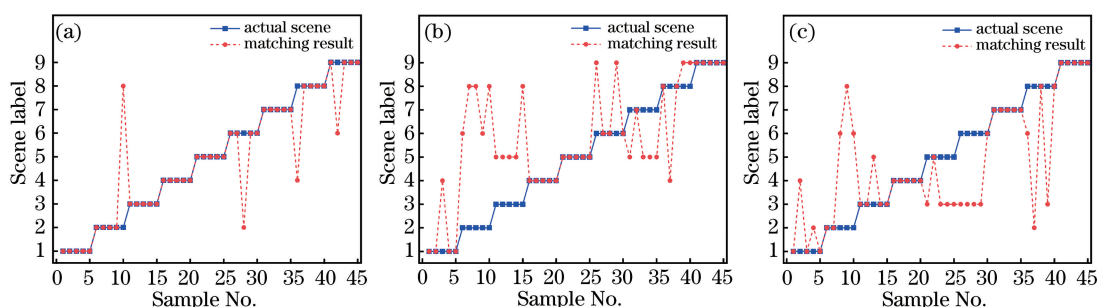


图 6 基于三种典型分类方法的测试集场景匹配结果。(a) SVM; (b) BP-ANN; (c) K-NN

Fig. 6 Scenes matching results of test set based on three typical classification methods. (a) SVM; (b) BP-ANN; (c) K-NN

表 1 四种场景匹配方法的正确率统计

Table 1 Accuracy statistics of four scene-matching methods

Method	Accuracy / %
BP-ANN	55.56
K-NN	62.22
SLCSM	100.00
SVM	91.11

由表 1 可知,由于 BP-ANN 和 K-NN 算法的建模收敛速度较慢,无法利用当前的小规模训练集构建可靠的匹配模型,虽然增大训练样本数量能提高匹配精度,但水样本的采集与化学法 COD 标定需要消耗大量时间,不利于模型库的建立和维护。SVM 法与所提出的光谱线性特征场景匹配

(spectral line characteristic scene matching, SLCSM)法的收敛效果明显更优,更能适应小训练集条件下的多场景匹配建模。而 SLCSM 法由于能够消除样本溶解物整体浓度变化对光谱的影响,突出由不同场景中溶解物种类或比例不同引入的光谱特征差异,算法稳定性较高,匹配精度相比 SVM 法更具优势。值得注意的是,由于本实验涉及的场景种类和样本数量仍相对较少,实验结果仅代表不同算法的相对匹配能力,并不表示 SLCSM 法能够实现对任意样本的正确匹配。

3.2 多场景 COD 解算实验

PLS 是目前光谱法 COD 定量解算中应用广

泛、精度较高的方法之一^[15-16]。本实验为每个场景预留 1 组,共 10 组光谱作为测试集,首先将所有剩余样本光谱整体作为训练集,基于 PLS 算法建立单一解算模型,并以此模型解算测试集中样本的 COD 浓度;然后,分别以每个场景的剩余样本光谱作为训

练集,构建 PLS 多场景解算模型库,再将测试集利用 SVM 法与 SLCSM 法进行场景匹配,并选中模型库中归属场景的解算参数实施 COD 计算。实验中,所有样本的光谱均基于幂函数修正方程进行直接拟合法浊度校正,解算结果如表 2 所示。

表 2 多场景 COD 解算实验结果

Table 2 Experimental results of multi-scene COD calculation

Scene label	Actual value / (mg · L ⁻¹)	Holistic PLS modeling		SVM-PLS modeling		SLCSM-PLS modeling	
		Calculation value / (mg · L ⁻¹)	Error rate / %	Calculation value / (mg · L ⁻¹)	Error rate / %	Calculation value / (mg · L ⁻¹)	Error rate / %
1	80.44	1175.93	1361.87	79.08	1.69	79.08	1.69
2	141.18	130.46	7.59	140.75	0.30	140.75	0.30
3	37.78	545.59	1344.12	264.43	599.92	36.59	3.15
4	160.88	1573.13	877.83	160.81	0.04	160.81	0.04
5	109.93	862.32	684.43	111.14	1.10	111.14	1.10
6	3.63	220.67	5979.06	40.72	1021.76	3.64	0.28
7	20.01	285.89	1329.45	19.69	1.60	19.69	1.60
8	6.03	156.08	2488.39	5.91	1.99	5.91	1.99
9	6.12	75.15	1127.94	23.82	289.22	6.02	1.63
10	10.31	100.77	877.40	19.24	86.61	10.10	2.04
Average execution time / s		0.363		0.553		0.762	

由表 2 的对比结果可知:以整体建模方式构建的单一 PLS 解算模型在多场景环境下已无法进行可靠的 COD 解算;而实施多场景优化建模后,解算误差大幅下降,其中 SLCSM-PLS 法的解算误差降至 3.15% 以下;而 SVM-PLS 法由于存在匹配错误,部分场景的解算误差仍然较大。从计算时间来看,整体建模解算法因为不包含场景匹配过程,速度最快;SLCSM 法由于在场景匹配中增加了吸光度归一化环节,速度慢于 SVM 法,但仍能满足实时测量需求。

将上述实验中直接拟合法浊度校正的浊度特征函数替换为二次多项式与指数函数,观察其对 SLCSM-PLS 法 COD 解算的影响,结果如图 7 与

表 3 所示。从计算时间来看,整体建模解算法因为不包含场景匹配过程,速度最快,平均运算时间为 0.363 s;SLCSM 法由于在场景匹配中增加了吸光度归一化环节,平均运算时间为 0.762 s,慢于 SVM 法的 0.553 s,但仍能满足实时测量需求。

表 3 三种浊度特征拟合函数对 SLCSM-PLS 法 COD 解算误差率的影响统计

Table 3 Statistics of the influence of three turbidity characteristic fitting functions on the error rate of COD calculation in SLCSM-PLS method

Scene label	Error rate / %		
	Power function	Exponential function	Quadratic polynomial
1	1.69	11.43	14.06
2	0.30	10.49	40.57
3	3.15	13.24	12.25
4	0.04	8.45	9.61
5	1.10	54.73	65.76
6	0.28	2.93	2.09
7	1.60	10.27	9.53
8	1.99	9.62	8.98
9	1.63	2.34	2.29
10	2.04	2.95	3.17
Average error rate	1.36	12.65	16.83

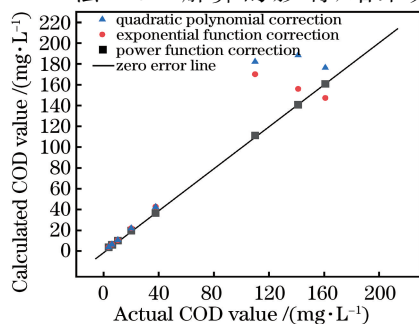


图 7 三种浊度特征拟合函数对 SLCSM-PLS 法 COD 解算的影响

Fig. 7 Influence of three turbidity characteristic fitting functions on SLCSM-PLS COD calculation

由表 3 可知,基于幂函数修正方程浊度校正后的 COD 解算平均误差为 1.36%,明显低于二次多项式的校正误差 12.65%及指数函数的校正误差 16.83%。由于场景匹配算法对浊度校正精度较为依赖,指数函数与二次多项式浊度校正分别在场景 5 和场景 2、5 引起了场景匹配错误,使 COD 解算出现了较大偏差。在计算耗时上,3 种函数的平均运算时间分别为 0.301 s、0.249 s 和 0.224 s,幂函数修正方程浊度校正的执行时间稍长,但与另两者的差距在 0.1 s 以内。

4 结 论

针对直接紫外-可见光谱法 COD 检测中,单一解算模型在多场景条件下解算结果不稳定,水体溶解物组分发生波动时误差明显增大的关键问题,研究了一种多场景优化的 COD 建模和解算方法。该方法首先通过分析悬浮颗粒物散射特征,构建幂函数修正拟合方程,并基于直接拟合法实现了浊度干扰的精确校正;然后,通过吸光度归一化法建立多场景光谱线性特征库,利用杰卡德相似性理论实现待测样本的场景匹配;最后,基于 PLS 算法完成 COD 浓度解算。实验证明,这种方法改善了直接拟合法的浊度补偿能力,场景匹配正确率明显优于传统机器学习匹配法,而且需要少量训练样本即可完成建模,可使多场景条件下的 COD 检测精度明显提高,有利于解决光谱检测法推广应用中的稳定性和可靠性差的问题。

参 考 文 献

- [1] Kolb M, Bahadir M, Teichgräber B. Determination of chemical oxygen demand (COD) using an alternative wet chemical method free of mercury and dichromate[J]. *Water Research*, 2017, 122: 645-654.
- [2] Hou D B, Zhang J, Chen L, et al. Water quality analysis by UV-vis spectroscopy: a review of methodology and application[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2013, 33(7): 1839-1844.
侯迪波, 张坚, 陈玲, 等. 基于紫外-可见光光谱的水质分析方法研究进展与应用[J]. *光谱学与光谱分析*, 2013, 33(7): 1839-1844.
- [3] Li J W, Tong Y F, Guan L, et al. Optimization of COD determination by UV-vis spectroscopy using PLS chemometrics algorithms[J]. *Optik*, 2018, 174: 591-599.
- [4] Hamzaoui Y E, Hernández J A, Silva-Martínez S, et al. Optimal performance of COD removal during aqueous treatment of alazine and gesaprim commercial herbicides by direct and inverse neural network[J]. *Desalination*, 2011, 277(1/2/3): 325-337.
- [5] Leong W C, Bahadori A, Zhang J, et al. Prediction of water quality index (WQI) using support vector machine (SVM) and least square-support vector machine (LS-SVM) [J]. *International Journal of River Basin Management*, 2021, 19(2): 149-156.
- [6] Liu Y F, Su R G, Zhou Q Q, et al. Rapid modeling offshore eutrophication technique using optical parameters of CDOM[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2014, 41(12): 1215001.
刘艳芳, 苏荣国, 周倩倩, 等. 基于 CDOM 光学参数的近海富营养化快速评价技术[J]. *中国激光*, 2014, 41(12): 1215001.
- [7] Chen H R, Zhang J W, Wang S Q, et al. Study on diurnal variation of turbidity in the Yangtze estuary and adjacent areas by remote sensing[J]. *Acta Optica Sinica*, 2020, 40(5): 0501003.
陈黄蓉, 张靖玮, 王胜强, 等. 长江口及邻近海域的浊度日变化遥感研究[J]. *光学学报*, 2020, 40(5): 0501003.
- [8] Wu D C, Wei B, Tang G, et al. Turbidity disturbance compensation for UV-VIS spectrum of waterbody based on Mie scattering[J]. *Acta Optica Sinica*, 2017, 37(2): 0230007.
吴德操, 魏彪, 汤戈, 等. 基于 Mie 散射的水体紫外-可见光谱浊度干扰补偿[J]. *光学学报*, 2017, 37(2): 0230007.
- [9] Tang B, Wei B, Wu D C, et al. Experimental research of turbidity influence on water quality monitoring of COD in UV-visible spectroscopy[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2014, 34(11): 3020-3024.
汤斌, 魏彪, 吴德操, 等. 一种紫外-可见光谱法检测水质 COD 的浊度影响实验研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2014, 34(11): 3020-3024.
- [10] Hu Y T, Wen Y Z, Wang X P. Novel method of turbidity compensation for chemical oxygen demand measurements by using UV-vis spectrometry [J]. *Sensors and Actuators B*, 2016, 227: 393-398.
- [11] Cai X S, Su M X, Shen J Q. Particle size measurement technique and its application [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2010: 28-49.
蔡小舒, 苏明旭, 沈建琪. 颗粒粒度测量技术及应用[M]. 北京: 化学工业出版社, 2010: 28-49.
- [12] Langergraber G, Fleischmann N, Hofstädter F. A multivariate calibration procedure for UV/VIS spectrometric quantification of organic matter and

- nitrate in wastewater [J]. *Water Science and Technology*, 2003, 47(2): 63-71.
- [13] Varmuza K, Karlovits M, Demuth W. Spectral similarity versus structural similarity: infrared spectroscopy[J]. *Analytica Chimica Acta*, 2003, 490(1/2): 313-324.
- [14] Liu L X, He D, Li M Z, et al. Identification of Xinjiang jujube varieties based on hyperspectral technique and machine learning[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2020, 47(11): 1111002.
- 刘立新, 何迪, 李梦珠, 等. 基于高光谱技术与机器学习的新疆红枣品种鉴别[J]. *中国激光*, 2020, 47(11): 1111002.
- [15] Wang G F, Zhang Y X, Xu W L, et al. Estimation of phytoplankton pigment concentration in the South China sea from hyperspectral absorption data [J]. *Acta Optica Sinica*, 2021, 41(6): 0601002.
- 王桂芬, 张银雪, 徐文龙, 等. 基于高光谱吸收的南海浮游植物色素浓度估算[J]. *光学学报*, 2021, 41(6): 0601002.
- [16] Liu L Y, Chang T Y, Li K, et al. Spectral analysis and quantitative detection of baicalin based on terahertz radiation [J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2020, 47(3): 0314001.
- 刘陵玉, 常天英, 李珂, 等. 基于太赫兹辐射的黄芩苷光谱分析及定量检测[J]. *中国激光*, 2020, 47(3): 0314001.