

文章编号 1004-924X(2010)03-0586-07

应用近红外漫反射光谱快速测定土壤锌含量

黄富荣^{1,2}, 潘涛^{1,2}, 张甘霖³, 潘贤章³, 刘登飞^{1,2}

(1. 暨南大学“重大工程灾害与控制”教育部重点实验室, 广东 广州 510632;

2. 暨南大学 光电工程系, 广东 广州 510632;

3. 中国科学院 南京土壤研究所 土壤与农业可持续发展国家重点实验室, 江苏 南京 210008)

摘要: 采用近红外漫反射光谱和偏最小二乘法(PLS)建立了土壤锌快速分析的定量模型, 并进行了波段优选。首先, 基于单波长模型预测效果将全体样品划分为定标集和预测集; 然后, 采用多元散射校正(MSC)和 Savitzky-Golay(SG)平滑方法对光谱进行预处理。选取全谱 400~2 500 nm, 400~1 100 nm, 1 100~1 900 nm, 1 900~2 500 nm, 580~900 nm 等 5 个波段, 每个波段分别采用原谱、一阶导数谱、二阶导数谱, 共建立了 15 个定标模型。同时调整 SG 平滑点数和 PLS 因子数, 每个模型分别进行 PLS 数值实验, 按照预测效果进行优选。结果显示, 采用 1 900~2 500 nm 波段一阶导数谱的模型效果最好, 预测相关系数(RP)、RMSEP、RRMSEP 分别为 0.806, 31.0 mg/kg 和 19.96%。这些结果表明, 1 900~2500 nm 波段可以代替全谱波段得到更好的预测效果, 可为设计专用土壤近红外光谱仪提供依据。

关键词: 土壤; 锌; 近红外漫反射光谱; 偏最小二乘法; 波段选择

中图分类号: O657.33; X53 **文献标识码:** A

Rapid measurement of zinc contents in soils by near-infrared diffuse reflectance spectroscopy

HUANG Fu-rong^{1,2}, PAN Tao^{1,2}, ZHANG Gan-lin³, PAN Xian-zhang³, LIU Deng-fei^{1,2}

(1. *Key Laboratory of Disaster Forecast and Control in Engineering, Ministry of Education, Jinan University, Guangzhou 510632, China;*

2. *Department of Optoelectronic Engineering, Jinan University, Guangzhou 510632, China;*

3. *State Key Laboratory of Soil and Sustainable Agriculture, Nanjing Institute of Soil Science, Chinese Academy of Sciences, Nanjing 210008, China)*

Abstract: The quantification model of zinc rapid analysis in the soils was established by using near-infrared diffuse reflectance spectroscopy and a Partial Least Square (PLS) method, and the optimal measured wave band was also selected. All the samples were divided into calibration set and prediction set based on the prediction effect of single wavelength model, and then the spectra were pretreated by Multiplicative Scatter Correction (MSC) and Savitzky-Golay (SG) smoothing methods. The following five wave bands, the whole region 400-2 500 nm, 400-1 100 nm, 1 100-1 900 nm, 1 900-2 500 nm, 580-

收稿日期: 2009-06-22; **修订日期:** 2009-08-19.

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(No. 10771087); 广东省自然科学基金资助项目(No. 7005948); 广东省科技计划资助项目(No. 2007A020905001, 2007B030501008, 2007B020714001); 广州市科技攻关项目(No. 2007Z3-E0281)

900 nm were selected, and 15 calibration models were constructed for each band selected by the original spectra, the first derivative spectra and the second derivative spectra respectively. By simultaneous adjusting the numbers of SG smoothing points and PLS factors, the PLS computational experiments for each model were carried out and the best model was selected according to the prediction effect. The results indicate that the prediction effect of the model using the first derivative spectra in 1 900-2 500 nm is the best, and its prediction correlation coefficient (RP), RMSEP and RRMSEP are 0.806, 31.0 mg/kg, and 19.96% respectively. Obtained results show that 1 900-2 500 nm can replace the whole band to get a better calibration effect, and can provide a basis for the design of special soil near-infrared spectroscopy instruments.

Key words: soil; Zn; near-infrared diffuse reflectance spectroscopy; partial least square method; wave band choice

1 引言

土壤重金属是一类具有潜在危害的污染物,因受频繁的人类活动和密集的工业、交通运输的影响,目前越来越多的土壤受到不同程度的重金属污染。重金属含量过高不仅对农作物产品的产量和质量有很大的影响,还能够通过食物链对人体产生危害,如长期大量食入被锌污染的水、饮料或食品时,可使体内锌含量超过正常值,引起锌中毒^[1]。土壤重金属的测定主要采用室内化学分析和原子吸收分光光度法(或火焰吸收分光光度法),这些传统的分析方法费时费力,无法做到简便、快速、实时、动态的土壤监测,难于满足大范围区域土壤重金属污染监测和修复的需求。

随着光电技术和化学计量学方法的发展,现代近红外光谱(NIR)以其分析速度快、精度适中、成本低、非破坏性和易于实现实时分析等优点在农业、食品、医药、烟草、石油化工等领域中得到广泛应用^[2-6]。近年来,国内外已有在实验室采用近红外漫反射光谱分析土壤锌含量的研究报导^[7-9],发现土壤锌含量与近红外漫反射光谱之间存在相关性,通过建立土壤锌含量的近红外光谱分析模型,论证了采用近红外光谱分析土壤锌含量的可行性。但近红外光谱波段的优选和分析模型的进一步优化对于提高近红外光谱的预测能力和研发高信噪比的专用光谱仪器是非常重要的。

本文采用近红外漫反射光谱和偏最小二乘法(PLS)建立了土壤锌含量的定量分析模型。首先采用多元散射校正(MSC)和 Savitzky-Golay (SG)平滑方法对光谱进行预处理,然后利用 PLS

方法建立光谱定标预测模型,并对建模谱段进行筛选,为研发高信噪比小型专用光谱仪器的设计提供依据。同时,为了进一步改善模型的预测能力,本文还采用了一种基于单点模型预测效果的划分定标集和预测集的方法。

2 实验与方法

2.1 实验材料、仪器和测量方法

供试的 46 个土壤样品由南京某研究所提供。土壤样品锌含量化学值的测定采用火焰原子吸收分光光度法(参见 GB/T17138-1997)。表 1 给出 46 个土壤样品锌含量化学值的数据分析。

表 1 土壤样品锌含量化学值的数据分析

Tab. 1 Data analysis for Zn content
chemical value of soil samples (mg/kg)

	锌含量			
	最小值	最大值	平均值	标准差
定标集	100.23	211.15	147.83	31.18
验证集	100.44	209.69	155.11	36.11

光谱实验仪器采用丹麦 FOSS 公司的 XDS 光栅型近红外光谱分析仪和漫反射附件(圆型样品池、静止方式),探测器为 Si(400~1 100 nm)和 PbS(1 100~2 500 nm)。光谱扫描范围为 400~2 500 nm,扫描间隔为 0.5 nm。为了应用于简便、快速的土壤监测,本次实验的土壤样品经自然风干后,没有经过其他任何预处理,抽取相对均匀、颗粒细小的直接装样用于光谱测定。每个样

品经过 3 次连续扫描,然后计算平均光谱,实验室温度(23±1)℃,湿度为 46%RH。

2.2 定标集和预测集的划分方法

近红外光谱是一种间接分析技术,需要借助样品的参考化学值和光谱数据一起建立定标模型,模型的外部检验是通过把既有样品划分为定标集和预测集来实现的,合理的定标集和预测集的划分应该具有良好的建模代表性和客观性。基于全体样品的单波长模型预测效果,本文采用了如下的划分定标集和预测集的方法^[10]。

根据比尔定律,考虑土壤样品吸光度与锌含量化学值的单波长线性模型

$$A(\lambda) = k(\lambda)C + \epsilon, \quad (1)$$

其中 $A(\lambda)$ 为样品在波长 λ 处的吸光度, $k(\lambda)$ 为在波长 λ 处锌的单位浓度吸光度, C 为样品的锌含量化学值, ϵ 为其它未知干扰。首先,在每个波长 λ 上,利用全部样品的吸光度和参考化学值,通过回归计算 $k(\lambda)$,再利用得到的 $k(\lambda)$ 和每个样品的吸光度,通过回归计算每个样品的锌含量预测值 $\hat{C}_i(\lambda)$, $i=1, 2, \dots, N$, 其中 N 是全体样品个数,然后进一步计算预测值与参考化学值的均方根偏差(RMSE)

$$\text{RMSE}(\lambda) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (\hat{C}_i(\lambda) - C_i)^2}{N-1}}, \quad (2)$$

得到每一个单波长模型的预测效果。选择 RMSE 值较小的几个特征波长,分别计算这些波长模型对应的每个样品的锌含量预测值与参考化学值的偏差绝对值,然后计算这些绝对值的平均值,简称为单波长预测偏差(Single Wavelength Prediction Bias, SWPB)。由于这些波长点具有较高的信噪比,SWPB 值比较客观地代表了每个样品的吸光度和化学值的线性关联性。为了使得定标集和预测集的划分具有良好的建模代表性和客观性,本文按照指标 SWPB 和化学值来划分定标集和预测集,使得定标集和预测集的所有样品的 SWPB 值和化学值分布一致。

2.3 光谱预处理方法

MSC 方法的作用是校正吸收基线并降低样品散射作用对光谱的影响,降低样品的不均匀性带来的光谱差异性^[3-4,11]。因为本实验的样品为固体,并且没有经过研磨过筛处理,颗粒度是不均匀的,因此,本实验的所有光谱都先用 MSC 方法

来做预处理。

合理的光谱平滑化和光谱求导(一阶、二阶导数光谱)是一种有效的消除基线漂移、光谱倾斜等高频随机噪声的光谱预处理方法,本文利用 SG 平滑方法^[12-16]对原谱、一阶导数谱和二阶导数谱进行预处理。它采用移动窗口的方式,窗口宽度(平滑点数)可变。在窗口内,每一点先用多项式来做最小二乘拟合,要求窗口内各点总残差平方和最小,拟合后计算每一个窗口中心点的光谱平滑值和各阶导数平滑值,再通过窗口移动,计算出所有中心点的平滑值,得到原谱和各阶导数的平滑谱。平滑点数是重要的参数指标,平滑点数过少容易产生新的计算误差(噪音),从而造成模型精度下降;平滑点数过多则会使得包含样品信息的光谱数据磨光丢失,同样也会造成模型精度下降。因此,合理使用平滑点数非常重要,但必须通过多次数值实验比较,才能确定最优平滑点数。下面以平滑点数 15 为例,给出对应的一阶、二阶导数光谱的计算公式:

$$\begin{aligned} dA(\lambda) &= \frac{1}{334152\Delta\lambda^2} \\ &\quad \{12922[A(\lambda+7\Delta\lambda)+A(\lambda-7\Delta\lambda)]- \\ &\quad 4121[A(\lambda+6\Delta\lambda)+A(\lambda-\Delta\lambda)]- \\ &\quad 14150[A(\lambda+5\Delta\lambda)+A(\lambda-5\Delta\lambda)]- \\ &\quad 18334[A(\lambda+4\Delta\lambda)+A(\lambda-4\Delta\lambda)]- \\ &\quad 17842[A(\lambda+3\Delta\lambda)+A(\lambda-3\Delta\lambda)]- \\ &\quad 13843[A(\lambda+2\Delta\lambda)+A(\lambda-2\Delta\lambda)]- \\ &\quad 7506[A(\lambda+\Delta\lambda)+A(\lambda-\Delta\lambda)]\} \\ d^2A(\lambda) &= \frac{1}{6188\Delta\lambda^2} \\ &\quad \{91[A(\lambda+7\Delta\lambda)+A(\lambda-7\Delta\lambda)]+ \\ &\quad 52[A(\lambda+6\Delta\lambda)+A(\lambda-\Delta\lambda)]+ \\ &\quad 19[A(\lambda+5\Delta\lambda)+A(\lambda-5\Delta\lambda)]- \\ &\quad 8[A(\lambda+4\Delta\lambda)+A(\lambda-4\Delta\lambda)]- \\ &\quad 29[A(\lambda+3\Delta\lambda)+A(\lambda-3\Delta\lambda)]- \\ &\quad 48[A(\lambda+2\Delta\lambda)+A(\lambda-2\Delta\lambda)]- \\ &\quad 53[A(\lambda+\Delta\lambda)+A(\lambda-\Delta\lambda)]- \\ &\quad 56A(\lambda)\} \end{aligned}$$

其中 λ 为波长(nm), $A(\lambda)$ 、 $dA(\lambda)$ 、 $d^2A(\lambda)$ 分别为原光谱、一阶导数谱、二阶导数谱的吸光度值, $\Delta\lambda$ 为光谱数据的波长间隔, $\Delta\lambda=0.5$ (nm)。

2.4 建模方法与模型评价指标

把全体样品划分为定标集和预测集后,采用

MSC 和 SG 平滑方法,对所有样品的光谱进行预处理,然后采用 PLS 方法建立定标预测模型。

PLS 方法是融合主成分分析和多元线性回归的有效化学计量学方法,其本质是先消除光谱共线性再做回归,其中 PLS 因子数是最重要的参数,它对应了代表样品信息的光谱数据的加权组合的组数。如果使用的因子数过少,就不能充分反映样品信息,模型预测精度会降低,称为不充分拟合。如果使用的因子数过多,就会引入一些代表噪声干扰的成分数据,模型的预测能力也会下降,称为过拟合。因此,合理确定 PLS 因子数,对于充分利用光谱信息和消除噪声非常重要,但必须通过多次数值实验的反复比较,才能选取确定。本文将 SG 平滑点数和 PLS 因子数联合变动,按照预测效果遴选出最适当的平滑点数和最优 PLS 因子数。

模型预测效果的评价指标主要包括预测均方根偏差(RMSEP)、相对预测均方根偏差(RRMSEP)和预测相关系数(R_p)

$$RMSEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^M (C_{ip}' - C_{ip})^2}{M-1}}, \quad (3)$$

$$RRMSEP = \frac{RMSEP}{C_p} \times 100(\%), \quad (4)$$

$$R_p = \frac{\sum_{i=1}^M (C_{ip} - \bar{C}_p)(C_{ip}' - \bar{C}_p)}{\sqrt{\sum_{i=1}^M (C_{ip} - \bar{C}_p)^2 \sum_{i=1}^M (C_{ip}' - \bar{C}_p')^2}}. \quad (5)$$

其中 C_{ip}' , C_{ip} 分别为预测集中第 i 个样品的预测值和化学值; \bar{C}_p , \bar{C}_p' 分别为预测集的全体样品的预测值均值和化学值均值; M 为预测集的样品个数。评价指标 RRMSEP 与 RMSEP 的变化是完全一致的, R_p 的大小变化与 RMSEP 也是有关联的, RMSEP 值低, R_p 一般也较高,因此本文主要以 RMSEP 为优化目标来进行参数设计和模型优选。

3 结果与讨论

图 1 给出了 46 个土壤样品的在全谱范围 400~2 500 nm 内的近红外漫反射光谱。由图可见,全波段没有明显吸收峰,光谱重叠严重,吸收较弱。

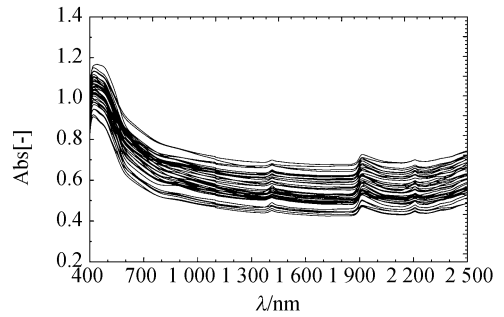


图 1 46 个土壤样品的近红外漫反射光谱

Fig. 1 Near-infrared diffuse reflection spectra of 46 soil samples

采用 2.2 节的方法划分定标集和预测集。首先计算每个波长模型的预测值与参考化学值的均方根偏差值,结果如图 2 所示。选择 RMSE 值较小的 4 个波长(400, 768, 784.5, 789 nm), 分别计算这些波长模型对应的每个样品的锌含量预测值与参考化学值的偏差绝对值,然后计算这些绝对值的平均值,得到单波长预测偏差的 SWPB 值。46 个样品的 SWPB 的最大值、平均值、方差分别为 68.4, 29.7, 16.9 mg/kg, 去除 3 个 SWPB 偏大的异常样品,余下 43 个样品用于定标建模。划分定标集(30 个)和预测集(13 个),使定标集和预测集所有样品的 SWPB 值和化学值分布一致。为了使得定标集浓度范围能够包含预测集浓度范围,本文把化学值最大和最小样品放在定标集,化学值次大、次小样品放在预测集。

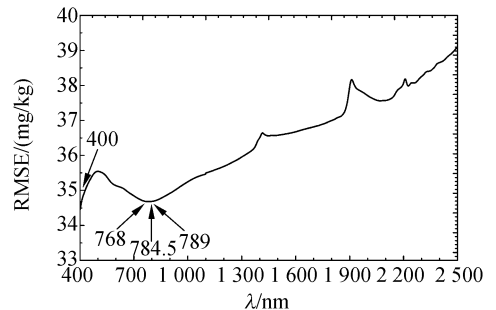


图 2 每个单波长模型的 RMSE 值

Fig. 2 RMSE value of each single wavelength model

由于土壤样品的光谱吸收重叠严重,波段平坦,没有明显吸收峰,因此本文主要按照单波长模型的 RMSE 谱段来划分建模波段。首先,采用全谱波段 400~2 500 nm 和可见-短波近红外波段 400~1 100 nm 建模,由于在长波近红外波段内,

RMSEP 谱在 1 900 nm 附近有一个明显的峰,因此把长波近红外波段分为 1 100~1 900nm(一级倍频区)、1 900~2 500 nm(合频区)两段来分别建模,此外,在 784.5 nm 附近单波长模型的预测效果最好,因此,也考虑采用包含该波长的谱段 580~900 nm 来建模。

在上述 5 个波段分别采用原谱、一阶导数谱、二阶导数谱的 SG 平滑谱建模,共建立 15 个定标模型,将 SG 平滑点数、PLS 因子数联合变动,以预测效果 RMSEP 值为优化目标,遴选出最适当的平滑点数和最优 PLS 因子数,得到最优模型。这是一个双参数的目标优化问题。每个定标模型都设定 1,2,3,4,5 共 5 个因子数,并设定 3,7,11,15,19,23 共 6 种平滑点数,从而有 30 个参数组合,对每一个模型,每一个参数组合都分别做 PLS 数值实验,共做了 $15 \times 5 \times 6 = 450$ 次 PLS 数值实验来比较选优。

表 2 给出了通过全部数值实验比较得到的 15 个模型对应的最优的平滑点数、PLS 因子数和 RMSEP 值。5 个波段的最优模型的最优 PLS 因子数,最优 SG 平滑点数,最优 RMSEP 在表 2 中用方括号表明。全局最优模型是采用 1 900~2 500 nm 波段一阶导数平滑谱的模型,次优模型

表 2 15 个定标模型的最优 SG 平滑点数、PLS 因子数和 RMSEP

Tab. 2 Optimal number of SG smoothing points, PLS factors and RMSEP for 15 calibration models

波段/nm		最优因	最优平	最优
		子数	滑点数	RMSEP
400-2500	原谱平滑	[10]	[3]	[32.3]
	一阶导数谱	1	3	35.9
	二阶导数谱	1	7	35.8
400-1100	原谱平滑	7	3	36.7
	一阶导数谱	1	3	36.1
	二阶导数谱	[1]	[3]	[35.8]
1100-1900	原谱平滑	6	3	37.7
	一阶导数谱	1	7	34.3
	二阶导数谱	[6]	[11]	[32.7]
1900-2500	原谱平滑	7	3	34.5
	一阶导数谱	5	3	31.0
	二阶导数谱	4	7	32.6
580-900	原谱平滑	[8]	[3]	[34.5]
	一阶导数谱	1	51	39.9
	二阶导数谱	3	3	36.7

是采用全谱 400~2 500 nm 原谱平滑的模型。这两个模型的预测相关系数(RP), RMSEP, RRMSEP 分别为 0.806, 31.0 mg/kg, 19.96% 和 0.648, 32.3 mg/kg, 20.82%。最优模型对应的土壤锌含量预测值和化学值的比较如图 3 所示。结果表明,位于合频区的波段 1 900-2 500 nm 可以代替全谱波段得到更好的预测效果,为设计小型专用土壤近红外光谱仪提供了依据。

同时还看到,在原谱平滑、一阶导数平滑和二阶导数平滑的预处理方式中,哪种定标效果好,不能一概而论,以及采用多少 SG 平滑点数和 PLS 因子数等,都要经过多次的数值实验来确定。

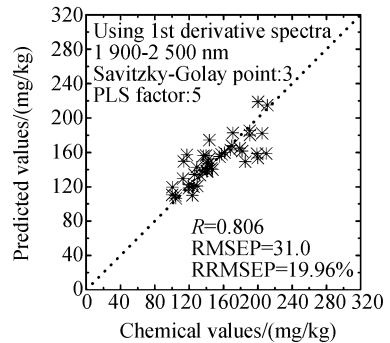


图 3 采用 1 900~2 500 nm 波段一阶导数谱的最优模型得到的锌含量的预测值和化学值的比较

Fig. 3 Comparison of the predicted values with chemical ones of Zn concent of soil samples for optimal model by using the first derivative spectra on 1 900-2 500 nm region.

4 结 论

采用近红外漫反射光谱和 PLS 方法建立了土壤锌快速分析的定量模型,并进行了波段优选。首先,基于单波长模型预测效果来划分定标集和预测集;然后采用 MSC 和 SG 平滑方法对光谱进行预处理。选取 5 个波段:全谱 400~2 500 nm, 400~1 100 nm, 1 100~1 900 nm, 1 900~2 500 nm, 580~900 nm 等 5 个波段,每个波段分别采用原谱、一阶导数谱、二阶导数谱,共建立了 15 个定标模型。同时调整 SG 平滑点数和 PLS 因子数,对每个模型分别做 30 次 PLS 数值实验,从中比较选优。结果表明,采用 1 900~2 500 nm 波段一阶导数谱的模型效果最好,相应的预测相关系数(RP), RMSEP, RRMSEP 分别为 0.806,

31.0 mg/kg, 19.96%。位于合频区的波段 1 900 ~ 2 500 nm 可以代替全谱得到更好的预测效果, 结果为设计小型专用土壤近红外光谱仪提供了依据。研究也表明, 要获得高精度的定标模型必须考虑波段的不同选取, 不同光谱预处理方式的选

取, 不同 SG 平滑点数和不同 PLS 因子数的选取等多种参数变化, 虽然运算量很大, 既往的研究很少能够做到这一步, 但这是改善提高近红外光谱分析预测能力的一个重要措施, 应该给予很好的关注。

参考文献:

- [1] LI X Z. The damage of heavy metals lead and cadmium to soil and crop swath reference to the control measures [J]. *Economic Forest Researches*, 2002, 18(4):12-13.
- [2] WILLIAMS P, NORRIS K. *Near-infrared Technology in the Agricultural and Food Industries* [M]. Second Edition, Minnesota: the American Association of Cereal Chemists, Inc. St. Paul, 2001.
- [3] 陆婉珍主编. 现代近红外光分析技术[M]. 第二版. 北京: 中国石化出版社, 2007.
LU W ZH. *Modern Near Infrared Spectroscopy Analytical Technology* [M]. Second Edition, Beijing: Chinese Petrochemistry Press, 2007. (in Chinese)
- [4] 严衍禄主编. 近红外光谱分析基础与应用[M]. 北京: 中国轻工业出版社, 2005.
YAN Y L. *Near Infrared Spectroscopy Analysis Fundament and Application* [M]. Beijing: Chinese Light Industry Press, 2005. (in Chinese)
- [5] 陈华才, 吕进, 陈星旦, 等. 基于径向基函数网络的茶多酚总儿茶素近红外光谱检测模型的研究[J]. *光学精密工程*, 2006, 14(1):58-62.
CHEN H C, LU J, CHEN X D, *et al.*. Near infrared spectroscopic model for determinating total catechins in tea polyphenol powder based on radical basis function network [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2006, 14(1):58-62. (in Chinese)
- [6] 曹璞, 潘涛, 陈星旦. 小型近红外玉米蛋白质成分分析仪器设计的波段选择[J]. *光学精密工程*, 2007, 15(12):1952-1958.
CAO P, PAN T, CHEN X D. Research on choosing wave band for instrument design for the mini-type near-infrared corn protein content analyzer [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2007, 15(12):1952-1958. (in Chinese)
- [7] MALLEY D F, CWLLIAMS P. Use of near-infrared reflectance spectroscopy in prediction of heavy metals in freshwater sediment by their association with organic matter [J]. *Environ Sci. Technol.*, 1997, 31:3461-3467.
- [8] KEMPER T, SOMMER S. Estimate of heavy metal contamination in soils after a mining accident using reflectance spectroscopy [J]. *Environ Sci. Technol.*, 2002, 36:2742-2747.
- [9] 解宪丽, 孙波, 郝红涛. 土壤可见光-近红外反射光谱与重金属含量之间的相关性[J]. *土壤学报*, 2007, 11(6):982-992.
XIE X L, SUN B, HAO H T. Relationship between visible-near infrared reflectance spectroscopy and heavy metal of soil concentration[J]. *Acta Pedologica Sinica*, 2007, 11(6):982-992. (in Chinese)
- [10] 潘涛, 胡愉华, 陈星旦, 等. 近红外光谱技术在甘蔗初压汁快速分析中的应用[J]. *光谱学与光谱分析*, 2008, 28(增刊):137-138.
PAN T, HU Y H, CHEN X D, *et al.*. Application of near infrared spectroscopy technology in rapid analysis of sugarcane initial-pressed juice[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2008, 28 (Supp.):137-138. (in Chinese)
- [11] 赵强, 张工力, 陈星旦. 多元散射校正对近红外光谱分析定标模型的影响[J]. *光学精密工程*, 2005, 13(1):53-58.
ZHAO Q, ZHANG G L, CHEN X D. Effects of multiplicative scatter correction on a calibration model of near infrared spectral analysis[J]. *Opt. Precision Eng.*, 2005, 13(1):53-58. (in Chinese)
- [12] SAVITZKY A, GOLAY M J E. Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures[J]. *Analytical Chemistry*, 1964, 36 (8):1627-1637.
- [13] NAKANISHI K, HASHIMOTO A, PAN T, *et al.*. Mid-infrared spectroscopic measurement of ionic dissociative materials in metabolic pathway [J]. *Applied Spectroscopy*, 2003, 57(12):1510-1516.
- [14] PAN T, HASHIMOTO A, KANOU M, *et al.*. Development of a quantification system of ionic dissociative metabolites using an FT-IR/ATR method[J]. *Bioprocess and Biosystems Engineer-*

ing, 2003,26(2):133-139.

- [15] PAN T, HASHIMOTO A, KANOU M, *et al.*. Mid-infrared spectroscopic quantification of ionic dissociative metabolites based on three spectral extraction methods[J]. *Japan Journal of Food Engineering*, 2004,5(1):22-31.
- [16] 陈洁梅, 潘涛, 陈星旦. 二阶导数光谱预处理在用 FTIR/ATR 方法定量测定葡萄糖-6-磷酸和果糖-

6-磷酸中的应用[J]. *光学精密工程*, 2006,14(1):1-7.

CHEN J M, PAN T, CHEN X D. Application of second derivative spectrum prepares in quantification measuring glucose-6-phosphate and fructose-6-phosphate using a FTIR/ATR method[J]. *Opt. Precision Eng.*, 2006,14(1):1-7. (in Chinese)

作者简介:



黄富荣(1979-),男,广东化州人,博士研究生,助理研究员,2000年于湛江师范学院获得学士学位,2004年于暨南大学获得硕士学位,主要从事应用光谱、生物医学信息技术等方面的研究。E-mail: furong_huang@163.com



张甘霖(1966-),男,湖北通山人,研究员,博士生导师,1993年于中国科学院南京土壤研究所获得理学博士学位,主要从事大土壤发生、分类与土壤地理研究。E-mail: glzhang@issas.ac.cn



潘贤章(1965-),男,安徽合肥人,博士,副研究员,1987年于华中农业大学获得学士学位,2005年于中国科学院研究生院获得博士学位,主要从事遥感及GIS技术应用的研究。E-mail: xzpan1@gmail.com



刘登飞(1978-),男,江西赣州人,硕士研究生,2003年于赣南师范学院获得学士学位,主要从事应用光谱和仪器设计方面的研究。E-mail: dfliu518@163.com

通讯作者:



潘涛(1964-),男,广西宜州人,教授,博士生导师,1985年于四川大学获得学士学位,2004年于日本三重大学获得博士学位,主要从事应用光谱、生物医学工程、应用数学等方面的研究。E-mail: tpan@jnu.edu.cn