

基于分辨率增强算法的质谱重叠峰分峰方法

赵伟文¹, 谢志军¹, 王陈璐^{2,3}, 方子睿¹, 俞建成¹

(1. 宁波大学信息科学与工程学院, 浙江 宁波 315211;

2. 宁波大学材料科学与化学工程学院, 浙江 宁波 315211;

3. 宁波大学质谱技术与应用研究院, 浙江 宁波 315211)

摘要:在质谱数据分析中,重叠峰分峰是一个重要的预处理步骤。本文建立了一种基于分辨率增强算法的质谱重叠峰分峰方法。首先,采用对信号及其负二阶微分进行加权的峰锐化算法来提高峰分辨率,解决拖尾峰和前延峰的问题。然后,对锐化后的信号进行连续小波变换,实现信号去噪并得到谱峰的粗略参数。最后,将这些粗略参数作为曲线拟合的输入,通过非线性拟合得到最终精确的拟合参数,解决了大量峰重叠情况下的重叠峰分峰问题。理论分析和实验结果表明,解析后的分离度在仿真原始分离度上均有一定提升。与小波变换法、交点垂线法和比例分配法相比,该方法可以更加准确地实现重叠峰分峰。

关键词:重叠峰;分辨率增强;连续小波变换;非线性拟合

中图分类号:O657.63

文献标志码:A

文章编号:1004-2997(2020)04-0386-07

doi:10.7538/zpxb.2019.0141

Overlapping Peak Separation Method of Mass Spectrometry Based on Resolution Enhancement Algorithm

ZHAO Wei-wen¹, XIE Zhi-jun¹, WANG Chen-lu^{2,3}, FANG Zi-rui¹, YU Jian-cheng¹

(1. Faculty of Electrical Engineering and Computer Science, Ningbo University, Ningbo 315211, China;

2. School of Material Science and Chemical Engineering, Ningbo University, Ningbo 315211, China;

3. Institute of Mass Spectrometry, Ningbo University, Ningbo 315211, China)

Abstract: Overlapping peak separation is an important pretreatment step in mass spectrometry data analysis. Because the resolution of the instrument is not high, overlapping peaks appears in the mass spectrum. The position of the characteristic peak can not be accurately determined and have influence on the identification of compounds. The intersection vertical method and the proportional distribution method use geometric method to resolve overlapping peaks which can not solve the problem of trailing peak

收稿日期:2019-10-23;修回日期:2019-12-22

基金项目:国家自然科学基金(60902097,61971248);浙江省重点科技项目(2020C03064);宁波市国际合作项目(2016D10008);海洋电子信息产业智慧资源配置与分享平台研究与开发项目(2017GY116);宁波市2025重点研发项目(2019B10125,2019B10028,2018B10075);宁波大学“海洋生物技术与海洋工程”学科群专项项目(422004582)资助

作者简介:赵伟文(1994—),男(汉族),安徽人,硕士研究生,计算机技术专业。E-mail: 1804279646@qq.com

通信作者:谢志军(1974—),男(汉族),湖南人,副教授,从事质谱大数据处理研究。E-mail: xiezhiyun@nbu.edu.cn

王陈璐(1990—),女(汉族),浙江人,助理实验师,从事质谱应用研究。E-mail: wangchenlu@nbu.edu.cn

and leading peak. Wavelet is mainly used to denoise and determine the number of peaks and the position of overlapping peaks. Under the condition of a large number of peaks overlapping, the overlapping peaks can not be accurately separated. In this paper, a new method based on resolution enhancement algorithm was proposed. Firstly, the peak resolution was improved by using a peak sharpening algorithm which weight the signal and its negative second order differential, solving the problem of tailing peak and leading peak. Then, the sharpened signal was transformed by continuous wavelet transform, the signal was denoised and the rough parameters of the spectral peak were estimated. Finally, taking these rough parameters as the input of curve fitting, the accurate fitting parameters could be obtained by nonlinear fitting. Under the condition of a large number of peaks overlapping, the overlapping peaks could be accurately separated. The results showed that the resolution was improved in the simulation of the original resolution after resolution. Compared with the wavelet transform method, the intersection vertical method and the proportional distribution method, the proposed method could realize the overlapping peak separation more accurately. The white Gaussian noise with different signal-to-noise ratio (SNR) was added to the data by using the "AWGN" function in MATLAB. The overlapping peaks with different signal-to-noise ratios were simulated. The results showed that the relative error of this proposed method was obviously smaller than that of the wavelet transform method, the intersection vertical method and the proportional distribution method.

Key words: overlapping peak; resolution enhancement; continuous wavelet transform; non-linear fitting

质谱法是应用于分析化学^[1]、环境科学^[2]和地质学^[3]等领域的有力分析技术。峰值检测是质谱数据分析中的关键步骤^[4-5]。当仪器的分辨率不够高时,质谱图上会出现重叠峰^[6]现象,导致不能准确地寻找特征峰位置,从而影响待测物质的识别。

目前,识别峰及其位置的方法很多,包括导数谱法^[7-8]、对称零面积法^[9]和高斯函数拟合法^[10]等。基于几何的分峰方法主要有垂线法和切线法^[11],该类方法计算速度快、直观,适用于实时在线分析,已被商业集成所应用,但其分离精度会随着谱峰重叠程度的增加而降低,在重叠严重的情况下,定量误差较大。针对这一问题,叶国阳等^[12]提出了交点垂线法和比例分配法,大幅提高了定量精度,但该方法依赖于重叠峰的两个极大值点,而且在只有一个极大值点(即肩峰)的情况下,需要通过做重叠峰拐点切线求切线交点的方法求得另一个极大值点,且该方法无法解决拖尾峰和前延峰的问题。Du等^[13]将连续小波变换应用于质谱峰值检测,通过直接连接

连续小波变换系数矩阵中的局部极大值得到峰的位置,但该方法在识别重叠峰方面也存在局限性。Zhang等^[14]提出了一种改进的蚁群优化生物标志物选择方法,以提供更高的灵敏度和更少的检测错误。Chudinov等^[15]提出根据同位素的谱峰对质谱数据进行校准的方法识别和分辨重叠谱峰。以上算法都根据脊线的位置得到谱线的谱峰数及峰位值,而脊线是根据样本滑动窗口发现的局部极大值来确定的。噪声会产生更多的局部最大值,这将影响方法的准确性。因此,小波变换因其具有多尺度特性和抗噪声能力而最具优势。

小波变换寻峰法^[16]是一种新的寻峰重构方法,是在傅里叶变换的基础上发展起来的一种新的信号处理技术。该方法的原理类似于小波变换模极大值法,利用小波变换后峰顶点对应的模极大值的能量特征值最大^[17],得到峰值点和对应的峰位。但是,小波主要用于去噪和确定峰数以及重叠峰的位置,在大量峰重叠的情况下,无法准确地实现重叠峰分峰。

本工作提出一种分辨率增强法,采用峰锐化算法结合连续小波变换和曲线拟合建立质谱重叠峰分峰方法。采用峰锐化算法对信号及其负二阶微分进行加权来提高峰分辨率,解决拖尾峰和前延峰的问题;利用连续小波变换结合曲线拟合的方法去除噪声,实现重叠峰分峰;并在 23 种 VOC 混标溶液数据集上验证该方法的有效性。

1 方法

1.1 分辨率增强算法

为了检测重叠峰中的目标峰,采用分辨率增强算法人为提高峰分辨率。本实验采用 Li 等^[18]提出的对信号及其负二阶微分进行加权的峰锐化算法,表示如下:

$$R = F - kF^{(2)} \tag{1}$$

式中, R 为增强后的信号, F 为原信号, $F^{(2)}$ 为原信号的二阶导数, k 是给定实现最优信号增强的加权因子^[19]。重叠峰以及锐化后的重叠峰示于图 1。

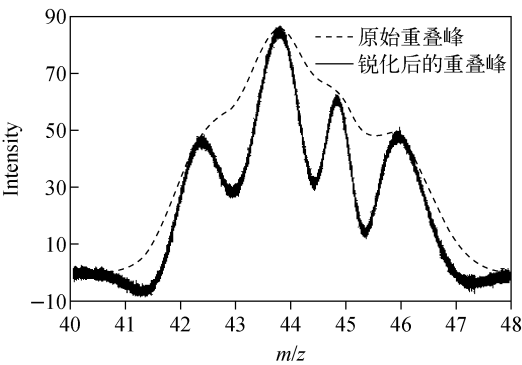


图 1 重叠峰与锐化后的重叠峰
Fig. 1 Overlapping peaks and sharp overlapping peaks

从图 1 中可以清楚地看到,经峰锐化后,峰分辨率得到大幅提高,峰位置和峰数目更加明显,便于进行重叠峰分峰。由于原信号含有噪声,锐化后信号的噪声变得更多,所以对信号进行降噪处理非常重要。

1.2 连续小波变换

进行峰锐化算法后,采用 Zheng 等^[20]提出的连续小波变换进行重叠峰分峰以及每个峰粗略的参数估计。连续小波变换是一种重要的时

频分析工具,广泛应用于信号处理、图像压缩和数学建模等领域。谱信号经过式(2)的连续小波变换后,生成小波系数。

$$C(a,b) = \int_R f(t) \psi_{a,b}(t) dt, \psi_{a,b}(t) = \frac{1}{\sqrt{a}} \psi\left(\frac{t-b}{a}\right), a \in R^+ - \{0\}, b \in R \tag{2}$$

其中, $f(t)$ 是信号, a 是标度, b 是平移, $\psi_{a,b}(t)$ 是尺度变换的母小波, $C(a,b)$ 是小波系数, t 表示质谱图的 x 轴,即 m/z 。

式(2)可以用卷积形式改写为式(3)。通过 $f(t)$ 和母小波的卷积,可以得到小波系数:

$$C(a,b) = \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \cdot \psi_{a,b}\left(\frac{t-b}{a}\right) dt = f(b) \otimes \left[\frac{1}{\sqrt{a}} \psi_{a,b}\left(\frac{-b}{a}\right) \right] = -f(b) \otimes \left[\frac{1}{\sqrt{a}} \psi_{a,b}\left(\frac{b}{a}\right) \right] \tag{3}$$

其中, $\otimes$ 表示卷积。

为了检测谱峰的参数,传统上采用导数方法^[21]。然而,该方法对噪声非常敏感,实际的实验谱信号示于图 2,随机噪声的存在会影响导数。为了避免这一问题,在进行求导之前必须进行平滑处理,而高斯平滑是一种较好的平滑方法。根据卷积的性质,高斯平滑后的第 n 阶导数可以写成方程(4):

$$f^{(n)}(t) = p^{(n)}(t) \otimes g(t) = p(t) \otimes g^{(n)}(t) \tag{4}$$

其中, $p(t)$ 是具有噪声的谱, $g(t)$ 是高斯函数。在连续小波变换中,母小波被定义为高斯函数的第 n 阶导数,示于方程(5)。

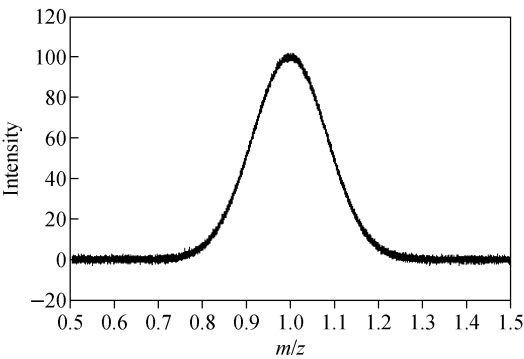


图 2 含噪声的高斯峰
Fig. 2 Gaussian peak with noise

$$\phi(t) = g^{(n)}(t) = (-1)^n \frac{d^n}{dt^n} e^{-t^2/2} \quad (5)$$

结合式(3)和(4),以高斯小波为母小波,可以得到 $f(t)$ 的 n 阶导数,即基于小波的导数谱,示于图 3。通过 $f(t)$ 的一阶导数可估计出谱峰的参数。用连续小波变换系数为 0 且两侧异号的点表示粗略的峰位,用峰位中心两侧两个局部极值点之间的距离粗略估计半宽度,峰位处粗略峰高被设定为锐化后的峰位处谱信号的强度。

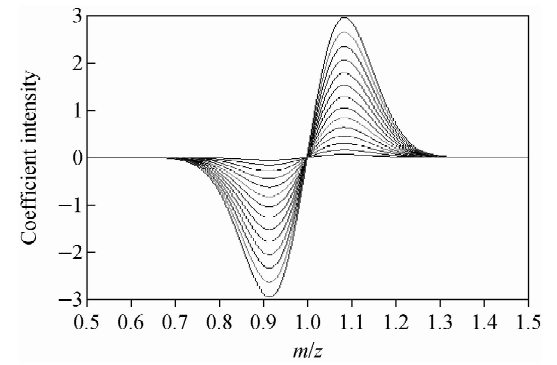


图 3 尺度为 1~14 的连续小波变换系数
Fig. 3 Continuous wavelet transform coefficients with a scale of 1-14

1.3 曲线拟合

利用连续小波变换得到每个峰的粗略参数,将这些粗略参数作为曲线拟合的输入值,通过 Li 等^[22]提出的非线性拟合得到最终的拟合参数。拟合函数^[23]用式(6)表示:

$$f(t) = \sum_{i=1}^n A_i \exp \left[-\frac{(t - \mu_i)^2}{2\sigma_i^2} \right] \quad (6)$$

式中, A_i 表示第 i 个谱峰的峰高, μ_i 表示第 i 个谱峰的峰位,半峰宽 W_i 表示为 $2.354\ 82 \times \sigma_i$ 。

对于曲线拟合,拟合优度准则^[24]定义如下:

$$\text{minimize}(E) = \sum_{i=1}^N (y_i - f_i)^2 \quad (7)$$

式中, y_i 和 f_i 分别是原始数据集和拟合数据集的第 i 个数据点, N 是数据点总数。

2 实验部分

2.1 仪器及试剂

GC-2014 气相色谱仪:日本岛津公司产品; QitVenture 便携式气相色谱-质谱联用仪:宁波

盘福生物有限公司产品。
23 种 VOC 混标溶液:岛津公司产品;甲醇,(纯度 99.99%);阿拉丁公司产品。
VOC 混标溶液的浓度:2 000 mg/L。

2.2 实验条件

色谱条件:色谱柱为 J&W DB-5 石英毛细柱(30 m × 0.25 mm × 0.25 μm);泵电流 0.50 A;泵电压 23.39 V;泵控制器温度 46 ℃;真空度 6.7×10^{-3} Pa;载气流速 1 mL/min;分流比 1 : 10;起始温度 50 ℃;升温速率 5 ℃/min。

质谱条件:电子轰击(EI)离子源;电子能量 70 eV;传输线温度 275 ℃;扫描速率 1×10^4 amu/s;质量扫描范围 m/z 50~550。

2.3 实验结果

为了评价解析重叠峰的效果,引入谱峰中分离度^[25]的概念,结合质谱理论,将质谱峰的分离度^[26]定义为:

$$R = \frac{c_2 - c_1}{\frac{1}{2}(W_1 + W_2)} \quad (8)$$

式中, c_1 、 c_2 分别为两个谱峰的峰位置; W_1 、 W_2 分别为两个谱峰 10%峰强处的宽度; R 为分离度,该值越大,两个谱峰的重叠度越小,该值越小,两个谱峰的重叠度越大。

在便携式气相色谱-质谱联用仪实际应用的基础上设计仿真数据,采用高斯模型构造质谱峰。大峰(相对丰度大于 30)一般含有 14~16 个采样点,小峰(相对丰度小于 10)一般含 5 个采样点,实验中存在大峰完全覆盖小峰的情况。本实验按照大峰 15 个点,小峰 5 个点进行采样,结果列于表 1。可见,本实验提出分离重

表 1 重叠谱峰的分离度

Table 1 Resolution degree of overlapping spectral peaks		
仿真的原始分离度 Original resolution degree of simulation	解析后的分离度 Degree of resolution after separation	提高幅度 Increased amplitude/%
0.795	1.172	47.42
0.617	1.133	83.63
0.599	1.121	87.15
0.447	1.124	151.45

叠峰方法后,与仿真的原始分离度相比,分离度均得到一定提高。

为了研究该方法的重叠峰分峰性能,对比

了小波变换法、交点垂线法、比例分配法的峰高(A)、峰位(μ)、半峰宽(W)的实验结果,详细数据列于表 2。

表 2 四种方法得到的结果对比
Table 2 Comparison of the results obtained by the four methods

方法 Method		峰号 Peak number			
		1	2	3	4
构成重叠峰的单峰的参数	峰高	3800.002	1060.003	1110.006	600.005
	峰位	195.832	196.990	197.801	199.003
	半峰宽	0.709	0.678	0.596	0.812
本文方法	峰高	3800.001	1060.003	1109.005	600.004
	峰位	195.826	196.987	197.800	199.001
	半峰宽	0.699	0.676	0.593	0.808
小波变换法	峰高	3800.007	1060.008	1110.009	600.005
	峰位	195.793	196.963	197.773	199.024
	半峰宽	0.688	0.671	0.591	0.805
交点垂线法	峰高	3800.01	1060.011	1110.013	600.01
	峰位	195.886	197.032	197.767	199.024
	半峰宽	0.678	0.662	0.586	0.803
比例分配法	峰高	3800.005	1060.009	1109.01	600.01
	峰位	195.877	197.020	197.830	199.030
	半峰宽	0.685	0.666	0.591	0.805

从表 2 可以看出,本实验提出的方法比小波变换法、交点垂线法和比例分配法具有更好的重叠峰解析效果,结果示于图 4。

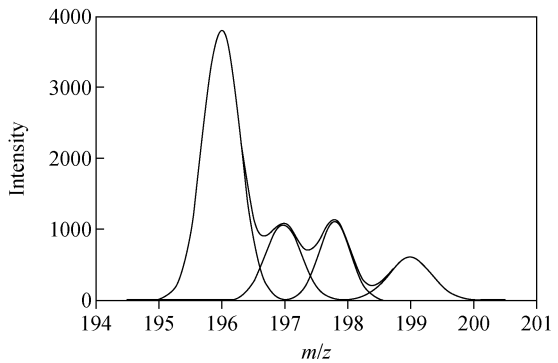


图 4 重叠峰解析
Fig. 4 Resolution of overlapping peaks

本实验模拟了不同信噪比的质谱数据,考察了噪声对拟合结果的影响。利用 Matlab 中的“AWGN”函数,将具有不同信噪比(SNR)的高斯白噪声^[27]添加到数据中。通过模拟具有不同信噪比的重叠峰^[28],测试该方法的性能。估计的相对误差示于式(9):

$$\text{Error} = \frac{|x - \hat{x}|}{x} \times 100\%$$

(9)

其中 x 为原始参数, $\hat{x}$ 为估计参数。峰高、峰位和半峰宽在不同信噪比下的相对误差示于图 5。

噪声对结果的影响有两个方面:一方面,噪声会增加峰数目和峰位检测的不确定性,从而导致检测结果不理想;另一方面,如果噪声级非常高,可能会直接影响检测结果。从图 5 中很容易看出,相对误差随着信号信噪比的增大而减小,本实验的方法相对误差明显小于小波变换、交点垂线和比例分配方法。

3 结论

本文提出了一种基于分辨率增强算法的质谱重叠峰分峰方法。为了检测重叠峰中的目标峰,采用了对信号及其负二阶微分进行加权的峰锐化算法,解决了拖尾峰和前延峰的问题。通过连续小波变换,可以在信号去噪的同时得到谱峰的粗略参数,将粗略参数作为曲线拟合的输入,通过非线性拟合得到最终精确的拟合参数。实验结果表明,该方法可以较准确地实现重叠峰分峰。

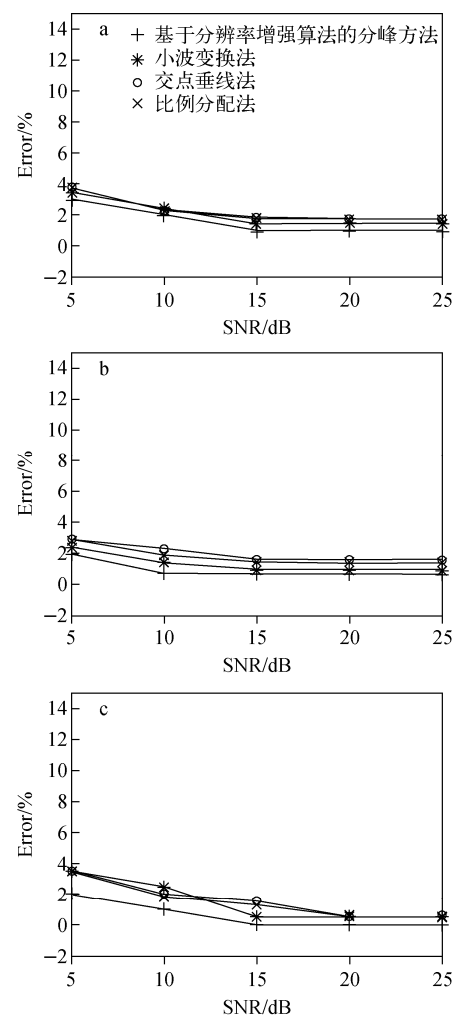


图5 峰高(a)、峰位(b)和半峰宽(c)在不同信噪比下的相对误差

Fig.5 Relative error of peak height (a), peak position (b) and half-width (c) under different signal-to-noise ratio

参考文献:

[1] KOYANAGI G K, BLAGOJEVIC V, BOHME D K. Applications of extractive electrospray ionization (EESI) in analytical chemistry[J]. International Journal of Mass Spectrometry, 2015, 379: 146-150.

[2] HERNÁNDEZ F, SANCHE J V, IBÁÑEZ M, ABAD E, PORTOLES T, MATTIOLI L. Current use of high-resolution mass spectrometry in the environmental sciences[J]. Analytical and Bioanalytical Chemistry, 2012, 403(5): 1 251-1 264.

[3] WIEDENBECK M, GGR B. Review: key advances in secondary ion mass spectrometry in the geological sciences during the period 2008-

2009[J]. Geostandards & Geoanalytical Research, 2011, 34(4): 387-394.

[4] FALCETTA F, MOROSI L, UBEZIO P, GIORDANO S, DECIO A, GIAVAZZI R, FRAPOLLI R, PRASAD M, FRANCESCHI P, D'INCALCI M, DAVOLI E. Past-in-the-future. Peak detection improves targeted mass spectrometry imaging[J]. Analytica Chimica Acta, 2018, 1 042: 1-10.

[5] GOREN E, LIU P, WANG C, WANG C. Bin-Quasi: a peak detection method for ChIP-sequencing data with biological replicates[J]. Bioinformatics (Oxford, England), 2018, 34(17):2 909-2 917.

[6] BELKIĆ D, BELKIĆ K. Automatic self-correcting in signal processing for magnetic resonance spectroscopy: noise reduction, resolution improvement and splitting overlapped peaks[J]. Journal of Mathematical Chemistry, 2019, 57 (9): 2 082-2 109.

[7] YU Y J, XIA Q L, WANG S, WANG B, XIE F W, ZHANG X B, MA Y M, WU H L. Chemometric strategy for automatic chromatographic peak detection and background drift correction in chromatographic data[J]. Journal of Chromatography A, 2014, 1 359: 262-270.

[8] NAVARRO M, BEDIA C, TAULER R, JAUMOT J. Chemometrics strategies for peak detection and profiling from multidimensional chromatography[J]. Proteomics, 2018. doi: 10.1002/pmic.201700327.

[9] 毕云峰,李颖,郑荣儿. LIBS/Raman 光谱对称零面积变换自动寻峰方法研究[J]. 光谱学与光谱分析,2013,33(2):438-443.

BI Yunfeng, LI Ying, ZHENG Ronger. The symmetric zero-area conversion adaptive peak-seeking method research for LIBS/Raman spectra[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2013, 33(2): 438-443(in Chinese).

[10] 胡正文,庞成鑫,程冯宇. Gaussian-LM 算法在光纤布拉格光栅反射光谱寻峰中的应用[J]. 激光与光电子学进展,2017(1):294-298.

HU Zhengwen, PANG Chengxin, CHENG Fengyu. Application of Gaussian-LM algorithm in fiber bragg grating reflection spectrum peak search[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2017(1): 294-298(in Chinese).

[11] LARIONOVA E, ROMANENKO S. Determina-

- tion of overlapping peaks heights by tangent method [C]. Strategic Technology (IFOST), 2012 7th International Forum on, IEEE, 2012: 1-4.
- [12] 叶国阳,徐科军. 基于色谱重叠峰相似性原理的双重叠峰分峰新方法[J]. 仪器仪表学报, 2015, 36(2): 439-445.
YE Guoyang, XU Kejun. New decomposition peak methods of overlapping chromatographic peaks based on similarity principle[J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2015, 36(2): 439-445(in Chinese).
- [13] DU P, KIBBE W A, LIN S M. Improved peak detection in mass spectrum by incorporating continuous wavelet transform-based pattern matching[J]. Bioinformatics, 2006, 22(17): 2 059-2 065.
- [14] ZHANG P, LI H Q, WANG H H, WONG S T C, ZHOU X B. Peak tree: a new tool for multi-scale hierarchical representation and peak detection of mass spectrometry data[J]. IEEE/ACM Transactions on Computational Biology & Bioinformatics, 2011, 8(4): 1 054-1 066.
- [15] CHUDINOV A, LI L, ZHOU Z, HUANG Z, GAO W, YU J, NIKIFOROV S, PIKHTILEV A, BUKHARINA A, KOZLOVSKIY V. Improvement of peaks identification and dynamic range for bi-polar single particle mass spectrometer[J]. International Journal of Mass Spectrometry, 2019, 436: 7-17.
- [16] ZHANG X Q, ZHENG J B, GAO H. Curve fitting using wavelet transform for resolving simulated overlapped spectra[J]. Analytica Chimica Acta, 2001, 443(1): 117-125.
- [17] ZHANG Z M, TONG X, PENG Y, MA P, ZHANG M J, LU H M, CHEN X Q, LIANG Y Z. Multiscale peak detection in wavelet space[J]. Analyst, 2015, 140: 7 955-7 964.
- [18] LI Y L, PAN C, XUE Y M, MENG X. A novel signal enhancement method for overlapped peaks with noise immunity[J]. Spectroscopy Letters, 2016, 49(4): 285-293.
- [19] 潘畅. 重叠峰信号滤波及参数提取方法研究[D]. 南京:南京信息工程大学, 2016.
- [20] ZHENG Y, FAN R L, QIU C L, LIU Z, TIAN D. An improved algorithm for peak detection in mass spectra based on continuous wavelet transform[J]. International Journal of Mass Spectrometry, 2016, 409: 53-58.
- [21] ZHANG J Y, HU Y Y, LIU J Q, HU Z D. Overlapping-peak resolution and quantification using derivative spectrophotometry in capillary electrophoresis[J]. Microchimica Acta, 2009, 164(3/4): 487-491.
- [22] LI Y L, WANG Q, SUN N, ZHOU W P, LIU C H. Continuous wavelet transform to improve resolution of overlapped peaks based on curve fitting[J]. Spectroscopy Letters, 2013, 46(7): 507-515.
- [23] 冯飞,王府北,谢非,吴琼水,曾立波. 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): 107-112.
FENG Fei, WANG Fubei, XIE Fei, WU Qiongshui, ZENG Libo. Implementation of spectral overlap resolution based on wavelet transforms and gaussian fitting[J]. Acta Photonica Sinica, 2015, 44(6): 107-112(in Chinese).
- [24] LEVENE M, KONONOVICIUS A. Empirical survival Jensen-shannon divergence as a goodness-of-fit measure for maximum likelihood estimation and curve fitting[J]. Communication in Statistics- Simulation and Computation, 2019. doi: 10.1080/03610918.2019.1630435.
- [25] 李宝强,李翠萍,黄启斌,张众垚,徐智,张琳,郭春涛. 基于小波变换的便携式质谱重叠峰解析方法研究[J]. 质谱学报, 2015, 36(3): 199-205.
LI Baoqiang, LI Cuiping, HUANG Qibin, ZHANG Zhongyao, XU Zhi, ZHANG Lin, GUO Chuntao. Research of portable mass spectrometer overlapped peak resolution method based on wavelet transform[J]. Journal of Chinese Mass Spectrometry Society, 2015, 36(3): 199-205(in Chinese).
- [26] DU P, KIBBE W A, LIN S M. Improved peak detection in mass spectrum by incorporating continuous wavelet transform-based pattern matching[J]. Bioinformatics, 2006, 22(17): 2 059-2 065.
- [27] 何海红. 气相色谱质谱联用仪中关于信噪比计算的探讨[J]. 中国计量, 2010(1): 83-84.
HE Haihong. Discussion on the calculation of signal-to-noise ratio in GC-MS[J]. China Metrology, 2010(1): 83-84(in Chinese).
- [28] GUNZER F. Comparison of different de-convolution algorithms to resolve overlapping peaks in ion mobility spectrometry[C]. International Conference on Informatics, ACM, 2017: 43-46.