

光谱学与光谱分析

红外光谱分辨率对气体定量分析的影响研究

赵建华, 魏周君, 高明亮, 方俊

中国科学技术大学火灾科学国家重点实验室, 安徽 合肥 230027

收稿日期 2008-11-29 修回日期 2009-3-2 网络版发布日期 2009-12-1

摘要 利用不同分辨率(1, 2, 4, 8 cm^{-1})的红外光谱建立对多组分气体样本(一氧化碳、二氧化碳、一氧化氮)的定量分析模型, 研究了分辨率对气体定量测量精确性的影响。研究发现: 对于样本中的各气体组分, 在合适的分辨率下都有其最佳的测量精确性; 而对于模型的整体精确性, 在高分辨率1和2 cm^{-1} 以及低分辨率8 cm^{-1} 时模型都有较好的精确性, 各组分相关系数(r)均值达到0.999 5以上, 校正均方根误差(RMSEC)和验证均方根误差(RMSEP)的均值分别为18.36和15.43以下, 而在分辨率为4 cm^{-1} 时, 模型测量精确性陡然降低, r 均值降到0.989 66, RMSEC均值为90.37, RMSEP均值为64.33。实验结果表明: 光谱分辨率对气体定量分析有明显的影响。为提高定量分析测量的精确性, 需要针对不同的待测气体和应用场合采用合适的分辨率参数。

关键词 [红外光谱](#) [气体定量分析](#) [分辨率](#)

分类号 [O433.4](#)

DOI: [10.3964/j.issn.1000-0593\(2009\)12-3195-04](#)

通讯作者:

赵建华 zhaojh@ustc.edu.cn

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(929KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中包含“红外光谱”的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [赵建华](#)

· [魏周君](#)

· [高明亮](#)

· [方俊](#)