

光谱学与光谱分析

小波包变换广义回归神经网络同时分辨三种有机化合物的重叠光谱

高玲¹, 李小平², 任守信¹

1. 内蒙古大学化学化工学院, 内蒙古 呼和浩特 010021

2. 内蒙古产品质量检验所, 内蒙古 呼和浩特 010024

收稿日期 2007-3-28 修回日期 2007-6-29 网络版发布日期 2008-10-26

摘要 文章结合两种化学计量学技术, 研制了一种小波包变换广义回归神经网络(WPTGRNN)方法, 对光谱严重重叠的三种有机化合物进行同时测定。该法结合小波包变换(WPT)和广义回归神经网络(GRNN)改进了除噪质量和预测能力。通过最佳化, 选择了小波函数、小波包分解水平及GRNN的平滑因子。偏最小二乘(PLS)法用于比较研究, 编制了三个程序(PWPTGRNN, PGRNN和PPLS)进行相关计算。结果表明, WPTGRNN法是成功的且优于GRNN及PLS方法, 与GRNN方法比较所有组分质量浓度的预测值与实际值的相对预测标准误差由4.0%降低为2.3%。

关键词 [小波包变换](#) [广义回归神经网络](#) [同时测定](#) [有机化合物](#)

分类号 [O6-04](#)

DOI: [10.3964/j.issn.1000-0593\(2008\)10-2392-04](#)

通讯作者:

高玲 lingyuxi@hotmail.com

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(795KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中包含“小波包变换”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [高玲](#)
- [李小平](#)
- [任守信](#)