

光谱学与光谱分析

结合分类与局部PLS的近红外光谱定量分析

张晓曼,戴连奎*

浙江大学工业控制技术国家重点实验室, 浙江 杭州 310027

收稿日期 2007-8-2 修回日期 2007-11-6 网络版发布日期 2008-12-26

摘要 近红外光谱分析技术是近年来发展起来的一种快速检测技术。为了提高近红外光谱定量分析的精度,文章首先用支持向量机法对测试样本进行分类,然后选用与待测样本性质相近的同类部分校正集样品建模来预测待测属性值。为了克服分类错误样本的影响,提出了一种新的混合PLS算法(称为H_PLS法)。该算法由基于分类的局部PLS法(称为C_PLS法)和基于全部训练样本集的局部PLS法(称为D_PLS法)组成,通过比较C_PLS法和D_PLS法的输出,计算测试样本的待测属性值。针对一批汽油样本的实验结果表明,在分类完全正确时C_PLS法的预测精度高于D_PLS法,然而存在分类错误时C_PLS法的预测精度将会显著下降。H_PLS法结合了C_PLS法和D_PLS法的优点,即使存在分类错误样本,使用该方法也可以将复相关系数从D_PLS法的0.973 4和C_PLS法的0.965 6提高到0.985 8。

关键词 [近红外光谱](#) [分类](#) [定量分析](#) [局部PLS](#) [汽油](#)

分类号 [O657.3](#)

DOI: [10.3964/j.issn.1000-0593\(2008\)12-2847-04](#)

通讯作者:

戴连奎 lkdai@ijpc.zju.edu.cn

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(771KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)

▶ [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“近红外光谱”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

• [张晓曼](#)

• [戴连奎](#)