

光谱学与光谱分析

一种基于流形学习的近红外光谱分析建模方法

洪明坚^{1, 2, 3, 4}, 温志渝^{1, 2, 3}, 张小洪⁴, 温泉⁴

1. 新型微纳器件与系统技术重点学科实验室, 重庆 400030
2. 微纳系统及新材料技术国际合作研发中心, 重庆 400030
3. 重庆大学光电技术及系统教育部重点实验室, 重庆 400030
4. 重庆大学软件学院, 重庆 400030

收稿日期 2008-8-2 修回日期 2008-11-6 网络版发布日期 2009-7-1

摘要 近红外光谱分析的重要内容之一是基于校正样品集建立光谱和化学成分或类别之间的回归模型。流形学习是一类新的机器学习方法,它能够揭示出复杂数据的本质维数,提取最重要的特征信息,并用于建立回归或分类模型。文章以近红外光谱为研究对象,针对近红外光谱数据维数高、谱带归属难以确定等特点,基于流形学习中局部线性嵌入(LLE)算法的思想,提出了一种最小二乘局部加权回归(LS-LWR)建模方法。最后,利用各种浓度葡萄糖溶液的近红外光谱,对该方法进行了验证。同时建立主成份回归(PCR)和偏最小二乘回归(PLSR)模型,通过计算预测标准偏差(SEP)与LS-LWR模型进行比较。实验结果表明,LS-LWR模型有更好的预测效果,而且具有模型简单、稳定性好和计算省时等优点。

关键词 [近红外光谱](#) [流形学习](#) [局部线性嵌入](#) [局部加权回归](#)

分类号 [O657.3](#)

DOI: 10.3964/j.issn.1000-0593(2009)07-1793-04

通讯作者:

洪明坚 hongmingjian@yahoo.com.cn

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(1283KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

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

· [洪明坚](#)

·

·

· [温志渝](#)

·

·

· [张小洪](#)

· [温泉](#)