

光谱学与光谱分析

### 多项式偏最小二乘法对非线性体系红外谱图的分析

张琳<sup>1</sup>, 张黎明<sup>1</sup>, 李燕<sup>1\*</sup>, 王晓斐<sup>1, 2</sup>, 胡兰萍<sup>1, 3</sup>, 王俊德<sup>1</sup>

1. 南京理工大学化工学院现代光谱研究室, 江苏 南京 210014
2. 南京大学化学化工学院, 江苏 南京 210092
3. 南通大学化学化工学院, 江苏 南通 226007

收稿日期 2004-12-10 修回日期 2005-4-20 网络版发布日期 2006-4-26

**摘要** 文章利用了一种非线性模型多项式偏最小二乘法(PPLS), 结合傅里叶变换红外光谱遥感技术, 对大气中的五组分混合体系进行了同时分析。并与偏最小二乘法(PLS)得到的结果进行了比较, PPLS显示出较好的处理非线性数据的能力。尤其是对混合物中的苯和氯仿的预测, 均方根预测误差(RMSEP)分别是0.043和0.087, 用PLS预测相应的RMSEP为0.402和0.842。PPLS的这一预测精度, 可以满足遥感傅里叶变换红外光谱对大气中有毒气体的实时、在线监测的需要。同时PPLS可以用较少的潜变量对变量进行解释, 显示出PPLS模型的稳健性和简单化。

**关键词** [多项式偏最小二乘法](#) [非线性模型](#) [多组分分析](#) [FTIR](#) [大气监测](#)

**分类号** [O657.3](#)

**DOI:**

**通讯作者:**

李燕

#### 扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(893KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“多项式偏最小二乘法”的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [张琳](#)  
· [张黎明](#)  
· [李燕](#)  
· [王晓斐](#)

· [胡兰萍](#)

· [王俊德](#)