

光谱学与光谱分析

近红外光谱分析中建模校正集的选择

秦冲¹, 陈雯雯¹, 何雄奎¹, 张录达^{1*}, 马翔²

1. 中国农业大学理学院, 北京 100193
2. 红塔集团技术中心, 云南 玉溪 653100

收稿日期 2008-9-2 修回日期 2008-12-6 网络版发布日期 2009-10-1

摘要 将极大线性无关组的概念及方法引入近红外光谱分析, 探讨了在建立定量分析模型时代表性样品, 即校正集样品的选择问题。以2 652个烟末样品为实验材料, 随机选取1 001个样品构成预测集, 其余1 651个样品为代表性样品备选集。用Matlab软件求出代表性样品备选集光谱矩阵的极大线性无关组, 以此作为代表性样品, 构成建模的校正集。用PLS回归法建立了烟末样品总糖含量定量分析的预测模型, 并将模型用于预测集中1 001个烟末样品总糖含量的预测分析。实验结果表明, 当选择的校正集包含的样品数量大于32时, 所建各模型对预测集样品预测的平均相对误差均小于4%, 平均相关系数大于0.96。其中选择32个代表性样品和146个代表性样品所建模型定量分析预测集中各样品的总糖含量, 两个结果经统计检验没有显著性差异($\alpha=0.05$), 说明求极大线性无关组的方法用于校正集样品的选择, 可实现“少而精”选择样品的目的。此外, 我们用求极大线性无关组选择校正集样品和随机方法选择校正集样品两种方法, 选择了同样数目28, 32, 41, 76, 146, 163个样品建模进行预测效果的对比实验, 结果显示, 求极大线性无关组法选择校正集建模的预测效果优于随机选择校正集建模的预测效果。

关键词 [近红外光谱](#) [代表性样品选择](#) [极大线性无关组](#)

分类号 [O657.3](#)

DOI: [10.3964/j.issn.1000-0593\(2009\)10-2661-04](#)

通讯作者:

张录达 zhangld@cau.edu.cn

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(1267KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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

- [秦冲](#)
- [陈雯雯](#)
- [何雄奎](#)
- [张录达](#)
- [马翔](#)