

光谱学与光谱分析

偏最小二乘法在傅里叶变换红外光谱中的应用及进展

张琳, 张黎明, 李燕*, 刘丙萍, 王晓斐, 王俊德

南京理工大学现代光谱研究室, 江苏 南京 210014

收稿日期 2004-6-6 修回日期 2004-9-6 网络版发布日期 2005-10-26

摘要 偏最小二乘法(PLS)是一种应用非常广泛的化学计量方法, 它综合了多元线性回归法(MLR)和主成分回归法(PCR)的优势, 具有预测能力强和模型相对简单等优点。PLS使傅里叶变换红外光谱的应用范围不断扩大, 同时算法也得到了改进和完善。文章介绍了偏最小二乘法在傅里叶变换红外光谱中的应用, 对改进算法, 如移动窗口PLS(MWPLS)、稳健PLS(RPLS)、加权PLS(WPLS)和非线性PLS等进行了介绍。同时, 对应用PLS时数据的预处理、变量的选择、噪声的处理和非线性模型的建立进行了综述。

关键词 [偏最小二乘法](#) [傅里叶变换红外光谱](#) [算法改进](#)

分类号 [O657.3](#)

DOI:

通讯作者:
李燕

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(476KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“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](#)