

光谱学与光谱分析

神经网络对VOCs的自动识别

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

1. 南京理工大学现代光谱研究室, 江苏 南京 210014
2. 曲阜师范大学化学科学学院, 山东 曲阜 273165
3. 南京大学化工学院, 江苏 南京 210093

收稿日期 2004-9-16 修回日期 2005-1-31 网络版发布日期 2006-1-26

**摘要** 利用神经网络(ANN)对严重混叠的傅里叶变换红外光谱图进行了定性和定量解析。通过大量模拟数据训练神经网络后, 引用了新的评价标准——逼近度来选择最优网络模型。利用此优化网络对两类光谱图进行了解析, 考察了网络的泛化能力。结果表明: 该网络不仅能够对两组分同时存在时的样本进行准确解析, 而且对于未知单组分光谱图, 也能够进行准确鉴别和定量分析。可见, 该研究为神经网络在单组分和多组分未知物的定性和定量分析方面提供了一种新思路。

**关键词** [傅里叶变换红外光谱](#) [神经网络](#) [多组分分析](#) [未知物鉴定](#)

**分类号** [O644](#)

**DOI:**

**通讯作者:**  
李燕

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(376KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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“傅里叶变换红外光谱”的 相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)
- [刘丙萍](#)
- [李燕](#)
- [张琳](#)
- [张黎明](#)
- [王晓斐](#)
- [王俊德](#)