

光谱学与光谱分析

基于PLS投影分析的光谱波段选择方法

淡图南,戴连奎*

浙江大学工业控制技术国家重点实验室, 浙江 杭州 310027

收稿日期 2007-10-5 修回日期 2008-1-16 网络版发布日期 2009-2-1

摘要 光谱测量数据需要对其进行波长选择以提高模型预测精度和简化模型。文章提出了一种基于PLS投影相关系数的快速、准确的波段选择方法,它计算某波长点光谱数据对待测组分浓度向量的影响时,考虑了该波长点光谱数据的变化量与光谱PLS回归系数向量在该波长点的投影分量的共同影响。与传统相关系数方法想比较,该方法明显地改善了分析模型的稳健性并大幅度地压缩了建模所需的波长点数。对208个汽油样本的实验表明,经过PLS投影相关系数方法进行光谱波段选择后的光谱波长点数占全谱的比例下降至30%,交互验证均方根偏差(root mean square error of cross validation, RMSECV)由未经过波长选择时的0.44降至0.34。该方法可广泛应用于各类光谱定量分析中的波长选择与数据压缩。

关键词 [光谱分析](#) [波段选择](#) [近红外](#) [部分最小二乘](#) [汽油辛烷值](#)

分类号 [O657.3](#)

DOI: [10.3964/j.issn.1000-0593\(2009\)02-0351-04](#)

通讯作者:

戴连奎 lkdai@iipc.zju.edu.cn

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(1620KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)
- ▶ [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](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“光谱分析”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [淡图南](#)
- [戴连奎](#)