

光谱学与光谱分析

PLS-GRNN法近红外光谱多组分定量分析研究

刘波平^{1,2}, 秦华俊³, 罗香^{2,4}, 曹树稳³, 王俊德^{1*}

1. 南京理工大学现代光谱研究室, 江苏 南京 210014
2. 江西省分析测试中心, 江西 南昌 330029
3. 南昌大学食品科学教育部重点实验室, 江西 南昌 330047
4. 南昌大学化学系, 江西 南昌 330047

收稿日期 2006-5-10 修回日期 2006-8-20 网络版发布日期 2007-11-26

摘要 研究了偏最小二乘(partial least squares, PLS)与广义回归神经网络(generalized regression neural networks, GRNN)联用在近红外光谱多组分定量分析中的应用。以饲料样品为实验材料, 采用PLS-GRNN法建立了饲料中水溶性氯化物、粗纤维、脂肪三项组分含量近红外光谱定量分析模型。马氏距离法剔除强影响点和奇异点, 用PLS法将原始数据压缩为主成分, 取8个主成分吸收峰与4个原始图谱特征峰值输入GRNN网络, 网络光滑因子 σ_i 为0.1。PLS-GRNN模型对样品3个组分含量的预测决定系数(r^2)分别为: 0.984 0, 0.987 0, 0.983 0; 样品平行扫描光谱预测值的标准偏差分别为: 0.003 26, 0.065 5, 0.031 4。结果表明所建PLS-GRNN模型通过近红外光谱能够准确预测饲料中水溶性氯化物、粗纤维、脂肪三项组分含量, 为近红外光谱进行多组分定量分析提供了新思路, 同时为解决近红外快速检测技术在预测组分含量较低的样品时误差相对较大的问题提供了可靠的方法。

关键词 [近红外光谱](#) [偏最小二乘法](#) [GRNN网络](#) [定量分析](#)

分类号 [O657.3](#)

DOI:

通讯作者:

王俊德 jdwang@mail.njust.edu.cn

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
 - ▶ [PDF\(1080KB\)](#)
 - ▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)
 - ▶ [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](#)

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

- [刘波平](#)
- [秦华俊](#)
- [罗香](#)
- [曹树稳](#)
- [王俊德](#)