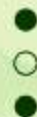




# SVDD的近红外光谱 定性分析光谱质量判 定方法

汇报人：

2024-01-25



# CATALOGUE

## 目录

- 引言
- SVDD算法原理及模型建立
- 近红外光谱数据预处理
- 基于SVDD的光谱质量判定方法
- 实验设计与结果分析
- 结论与展望





# PART 01

# 引言



REPORTING



CATALOGUE



# 目的和背景



阐述近红外光谱技术在定性分析中的应用



01

强调光谱质量对分析结果的重要性



02

提出一种基于SVDD的光谱质量判定方法

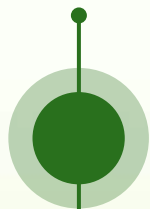


03

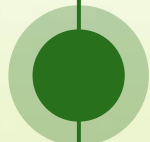




# 近红外光谱技术简介



近红外光谱技术原理



近红外光谱技术应用领域



近红外光谱技术优缺点



PART 02

# SVDD算法原理及模型建立



REPORTING



CATALOGUE



# SVDD算法原理



## 01

支持向量数据描述 ( Support Vector Data Description , SVDD ) 是一种基于统计学习理论的方法，用于数据分类和异常检测。

## 02

SVDD算法通过在高维空间中寻找一个最小的超球体来描述目标数据的分布，使得该超球体能够包含尽可能多的目标数据，同时尽可能少地包含非目标数据。

## 03

超球体的中心和半径是通过优化问题求解得到的，支持向量是距离超球体中心最远的数据点，它们决定了超球体的形状和大小。



# 模型建立与参数优化



在SVDD模型中，需要确定超球体的中心和半径，以及松弛变量和惩罚因子等参数。

模型建立的过程包括选择合适的核函数及其参数，以及通过交叉验证等方法确定最优的参数组合。



参数优化可以采用网格搜索、遗传算法、粒子群优化等方法进行，以找到最优的参数组合，使得模型在训练集和测试集上均表现良好。





# 特征提取与降维处理



01

在近红外光谱分析中，原始光谱数据往往包含大量的冗余信息和噪声，需要进行特征提取和降维处理。

02

特征提取可以采用主成分分析（PCA）、线性判别分析（LDA）、独立成分分析（ICA）等方法进行，以提取出与目标分析物相关的特征信息。

03

降维处理可以采用PCA、t-SNE、UMAP等方法进行，以降低数据的维度和复杂性，提高模型的训练速度和预测精度。同时，降维后的数据可视化效果更佳，有助于对数据分布和模型性能进行直观的分析 and 评估。



## PART 03

# 近红外光谱数据预处理





## 确定采集参数

在近红外光谱仪中设置合适的分辨率、扫描范围、扫描次数等参数，以获取高质量的光谱数据。

## 样品准备

确保待测样品具有代表性且表面干净，避免杂质和背景干扰对光谱数据的影响。

## 数据保存与整理

将采集到的光谱数据以标准格式保存，并进行必要的整理和分类，以便后续分析。



# 噪声滤除和基线校正



## 噪声滤除

采用合适的滤波算法（如Savitzky-Golay滤波器、小波变换等）对原始光谱数据进行平滑处理，以消除随机噪声和干扰。

## 基线校正

通过多项式拟合、样条插值等方法对光谱基线进行校正，消除基线漂移对光谱数据的影响。



# 归一化处理 and 标准化转换



## 归一化处理

将光谱数据按照一定比例进行缩放，使得所有光谱的幅值都在同一数量级内，便于后续比较和分析。

## 标准化转换

对光谱数据进行中心化和标准化处理，消除量纲影响和异常值的干扰，使得不同光谱之间具有可比性。

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：  
<https://d.book118.com/108047016107006101>