

激光与光电子学进展

药品安全视域下安眠镇静类药物光谱模式识别研究

侯伟¹, 王继芬^{1*}, 张蕾萍², 何昕宇¹, 谢宜霖²

¹中国人民公安大学侦查学院, 北京 100038;

²公安部物证鉴定中心, 北京 100038;

³中国人民公安大学信息网络安全学院, 北京 100038

摘要 为了实现对安眠药种类的快速准确区分, 实验采集了苯二氮卓类、吩噻嗪类和巴比妥类 3 种安眠镇静类药物共计 92 份样本的红外光谱数据, 经预处理后进行分类模型的构建。实验结果表明, 采用串联融合后的数据进行建模分类的准确率优于均值融合和差值融合; 原始光谱与一阶导数光谱的指纹区特征变量进行融合后使用随机森林模型进行建模分析, 3 种安眠药的分类识别率可达 100%, 能够实现安眠药种类的完全区分。该方法快速准确, 可以在一定程度上为司法鉴定领域中安眠药类物质的检验提供一种新的方法和思路。

关键词 光谱学; 安眠镇静类药物; 光谱数据融合; 多元建模

中图分类号 O433.4

文献标志码 A

doi: 10.3788/LOP202259.0530004

Spectral Pattern Recognition of Sedative-Hypnotic Drugs in the Perspective of Drug Safety

Hou Wei¹, Wang Jifen^{1*}, Zhang Leiping², He Xinyu¹, Xie Yilin²

¹School of Investigation, People's Public Security University of China, Beijing 100038, China;

²Institute of Forensic Science, Ministry of Public Security, Beijing 100038, China;

³Department of Police Information Technology and Cyber Security, People's Public Security University of China, Beijing 100038, China

Abstract In order to achieve the accurate classification of sedative-hypnotic drugs, the infrared spectra data of 92 samples of 3 kinds of sedative-hypnotic drugs including benzodiazepine, phenothiazine, and barbitol were collected. Then the classification model was constructed after data preprocessing. The experimental results show that the accuracy of series fusion is better than mean fusion and difference fusion. The random forest model was used for modeling and analysis after the fusion of the fingerprint region characteristic variables of the original spectrum and the first-order derivative spectrum. It could achieve thorough identification of three kinds of sedative-hypnotic drugs, with the accuracy up to 100%. The method is rapid and accurate, which can provide a new method and idea for the examination of hypnotics in judicial identification to a certain extent.

Key words spectroscopy; sedative-hypnotic drugs; spectral data fusion; multi-variable modeling

收稿日期: 2021-04-14; 修回日期: 2021-05-20; 录用日期: 2021-06-02

基金项目: 中国人民公安大学国家安全高精尖学科高端论文项目(2020GDLW037)、2021年度基本科研业务费重点项目(2021JKF208)

通信作者: *wangjifen58@126.com

1 引言

国务院于 2017 年印发的《“十三五”国家药品安全规划》中指出,保障我国的药品安全对于维护国家安全和人民健康具有十分重要的意义^[1]。安眠镇静类药物作为一类精神药品和处方药品,其应用范围广,受众基数大,监管难度较高,是我国药品安全领域研究的一大热点^[2]。另外,安眠镇静类药物在某些案件中可能作为判断自杀或他杀的证据,在案件的侦破中往往起着至关重要的作用,因此也是法庭科学检验领域的研究重点之一。

在海关缉私和出入境管理执法过程中经常查获不明种类的药品和粉末,其中就包括具有镇定作用的安眠类药物甚至毒品,这类药品需要公安机关进行快速检测和初步定性分类,但是目前尚缺乏快速准确且无损的检验方法。当前国内外对于安眠镇静类药物的研究主要集中在色谱质谱类高精度仪器的检验,如 Rust 等^[3]开发并验证了人体毛发中 21 种苯二氮卓类药物的液相色谱串联质谱法(LC-MS/MS)检测方法,并对真实样本进行了检验,验证了该方法的可行性。这些色谱质谱检验方法在灵敏度方面具有一定的优势,但其不足之处在于分析步骤繁琐且对样本造成了不可逆的破坏,而光谱学检测技术结合化学计量学的分析方法不仅能够实现对样本的无损检验^[4-7],还可以为后续相关案件提供一定的鉴定方法和数学分类模型,在确保鉴定准确率的同时还能加快检验速度,具有良好的应用效果。

本研究以苯二氮卓类、吩噻嗪类和巴比妥类安眠镇静类药物为研究对象,采用决策树(DT)、径向基函数(RBF)和随机森林(RF)对三种安眠镇静类药物的衰减全反射-傅里叶变换红外光谱数据进行建模分析,考察光谱不同区域、导数光谱及不同融合方法等对于三种安眠镇静类药物分类识别率的影响。相较于常见的色谱质谱方法,红外光谱技术结合化学计量学的方法能够实现对安眠镇静类药物的快速无损检验和识别,具有分类结果可视化等诸多优点,为公安机关检验此类药物提供了全新的鉴定思路和分析方法。

2 实验

2.1 样本与仪器

样本为不同种类的安眠镇静类药品,共计 92 份,包括 60 份苯二氮卓类样品(艾司唑仑、阿普唑仑、马来酸米达唑仑、地西洋、劳拉西洋、氯硝西洋、

氯氮平、硝西洋)、22 份吩噻嗪类样品(奋乃静、氯丙嗪和异丙嗪)以及 10 份巴比妥类样品(苯巴比妥和司可巴比妥钠)。

仪器为傅里叶变换红外光谱仪(Nicolet 5700 型, Thermo Fisher Scientific 公司, 美国)配备衰减全反射附件的傅里叶变换红外光谱仪(Nicolet 5700 型, Thermo Fisher Scientific 公司, 美国)。

实验采用商业数学软件 matrix laboratory (Matlab R2021a, Mathworks, 美国)和 SPSS Statistics 26.0 (IBM, 美国)进行数据预处理、降维以及建模分析。

2.2 实验方法

分别采集三种安眠镇静类药物样本的傅里叶变换衰减全反射红外谱图,光谱采集范围为 4000~400 cm^{-1} 。扫描次数为 64 次,分辨率为 4 cm^{-1} ,每份样本连续进行 3 次光谱曲线的采集,选择其中峰形较好的谱图作为后续分析的实验样本^[8-9]。

2.3 数据预处理方法

对样品采集后的光谱进行自动基线校正、纵坐标归一化、标准正态变换、多元散射校正和 S-G 平滑滤波等预处理^[10-14],剔除仪器噪声、药品形态及表面散射等因素对于样本谱图信息的干扰,之后将 92 份安眠镇静类药品的红外光谱谱图信息转化为数值数据并采用 Z-score 方法^[15]进行标准化处理。

2.4 多元建模分析

实验采用决策树、随机森林和径向基函数神经网络这三类多元统计方法进行数据建模和分析,相关操作借助软件 Matlab R2021a 和 SPSS Statistics 26.0 来实现。

决策树是一种有监督学习且带有判定规则的预测模型,其通过大量训练集数据对模型进行优化,进而总结出一定的判定规则,依据这一规则来对未知种类样本进行分类定性^[16];随机森林是通过集成学习的思想将多棵树集成的一种算法,与传统的决策树相比,它有更强的泛化能力和更好的分类效果^[17];径向基函数神经网络是一种单隐层、以函数逼近为基础的前馈神经网络,其在模式识别和数据挖掘等领域具有较为广泛的应用^[18-19]。

3 结果及分析

3.1 各组分样本的红外光谱谱图分析

实验采用衰减全反射-傅里叶变换红外光谱仪对所有安眠镇静类药物样本的红外光谱信息进行

了采集,分别从苯二氮卓类、吩噻嗪类和巴比妥类三种安眠镇静类药物中选取了具有代表性的样品

(氯氮平、异丙嗪和苯巴比妥),三种样品的结构式和红外光谱信息见图 1。

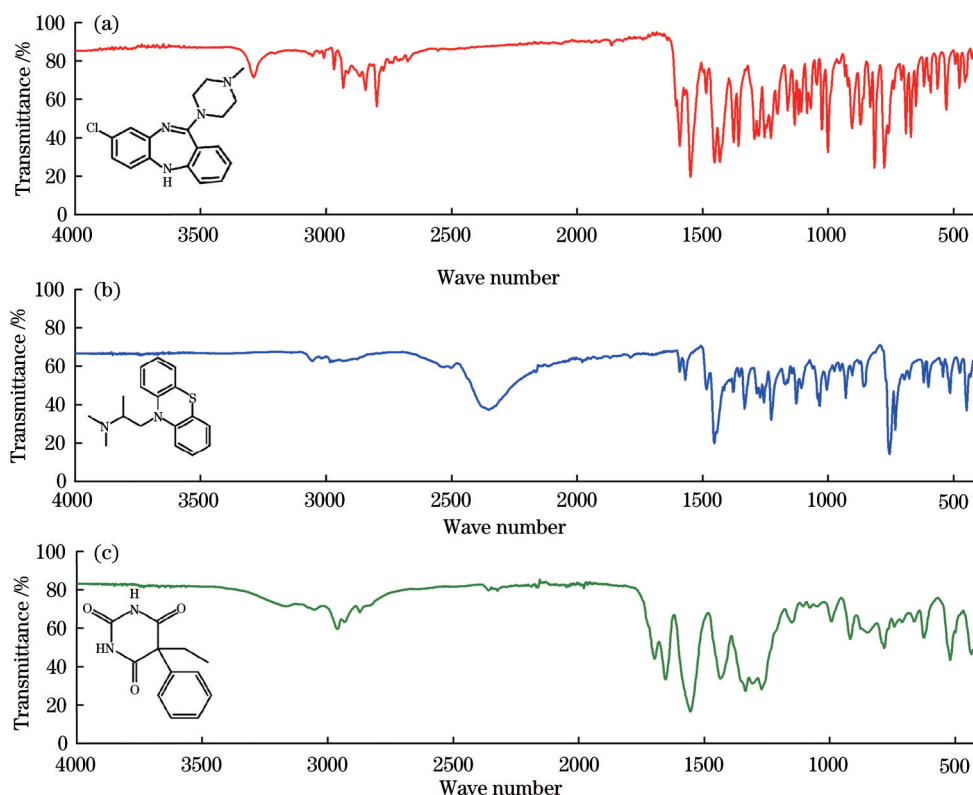


图 1 三类安眠镇静类药物的红外光谱图。(a)氯氮平;(b)异丙嗪;(c)苯巴比妥

Fig. 1 Infrared spectra of three kinds of sedative-hypnotic drugs. (a) Clozapine; (b) promethazine; (c) phenobarbital

由图 1 可知,氯氮平在波数为 3290 cm^{-1} 、 2968 cm^{-1} 、 2933 cm^{-1} 、 2844 cm^{-1} 和 2798 cm^{-1} 处均有较为明显的窄峰,同时在 $1591\sim 400\text{ cm}^{-1}$ 的波数范围内峰形较为混杂;异丙嗪在波数为 2351 cm^{-1} 处有一明显的宽峰,同时在 $1570\sim 400\text{ cm}^{-1}$ 的波数范围内有数个窄峰;苯巴比妥在波数为 2962 cm^{-1} 处有一左低右高的双峰,同时在波数为 $1697\sim 400\text{ cm}^{-1}$ 的波数范围内峰形较为复杂。由此可见,三类安眠镇静类药物在官能团区的峰形变化较小,而在指纹区的峰形变化较为复杂,仅依靠传统谱图分析方法难以对苯二氮卓类、吩噻嗪类和巴比妥类安眠镇静药物的光谱图进行准确区分,必须借助化学计量学的相关知识,通过构建多元数学统计模型才能实现对不同样本的快速、准确识别和分类。

3.2 基于光谱不同区域的三种模型分类识别结果

由于红外光谱不同区域可以反映物质不同位置的情况,因此可以将红外光谱分为官能团区 ($4000\sim 1300\text{ cm}^{-1}$, 反映物质的官能团情况) 和指纹区 ($1300\sim 400\text{ cm}^{-1}$, 反映物质的碳骨架情况), 不同

区域所蕴含的信息有所不同。将上述 92 份红外光谱谱图数据按照全波段、指纹区和官能团区三种模式进行划分,分别构建 DT、RBF 和 RF 三种多元数学统计模型进行建模分析,同时选择其中 30% 的样本进行交叉验证,得到光谱不同区域下三种安眠镇静类药物的分类识别结果,相关数据见表 1。

由表 1 可知,DT、RBF 和 RF 这三种多元数学统计分类模型对于三种安眠镇静类药物的分类效果有所区别,对于 DT 模型来说,光谱的全波段和指纹区训练集的分类识别率相近,分别达到 81.25% 和 82.81%,官能团区训练集的分类识别率相对较低,仅有 68.75%。测试集的分类识别率相对偏低,这可能是决策树模型在建模过程中产生了过拟合现象,导致难以对测试样本进行准确区分。在 RBF 模型中,应用指纹区数据进行分类的准确率均明显高于全波段和官能团区,这是因为光谱的指纹区所含的变量相对较少,但关键信息较为丰富;光谱的全波段虽然信息全面,但过多的冗余信息会增加模型的复杂度,造成分类识别率的下降;光谱的官能

表 1 原始光谱不同区域下三种安眠镇静药的分类识别率

Table 1 Classification accuracies of three kinds of sedative-hypnotic drugs under different regions of original spectra

| Spectra | Classification accuracy / % | | | | | |
|------------------|-----------------------------|-------|-------|----------|-------|-------|
| | Training set | | | Test set | | |
| | DT | RBF | RF | DT | RBF | RF |
| Full | 81.25 | 64.06 | 75.00 | 67.85 | 60.71 | 76.92 |
| Fingerprint | 82.81 | 78.57 | 79.68 | 71.42 | 71.43 | 77.78 |
| Functional group | 68.75 | 67.19 | 71.88 | 53.57 | 64.28 | 70.37 |

团区所含关键信息相对较少,利用该区数据进行建模分类的效果相对较差。对于 RF 模型来说,光谱不同区域下三种安眠镇静类药物的分类识别率变化不大,大致集中在 70%~80% 之间。综上所述,使用 DT 模型对于原始光谱的指纹区数据进行建模时,训练集和测试集的分类识别准确率相对较高,能够达到 82.81% 和 78.57%。

3.3 基于导数光谱的三种模型分类识别结果

对红外光谱进行求导处理之后即可得到一阶

导数光谱,再次求导可得到二阶导数光谱。与原始光谱相比,导数光谱能够有效消除共存组分和背景的干扰,同时峰形变锐有利于谱带的分辨,因此可能含有原始光谱所不具备的信息。使用 OMINC 软件分别得到 92 份安眠镇静类药物红外光谱的一阶和二阶导数光谱,光谱数据经预处理后进行建模分析,得到三种建模方法下导数光谱不同区域的三种安眠药的分类识别结果,相关数据如图 2 所示。

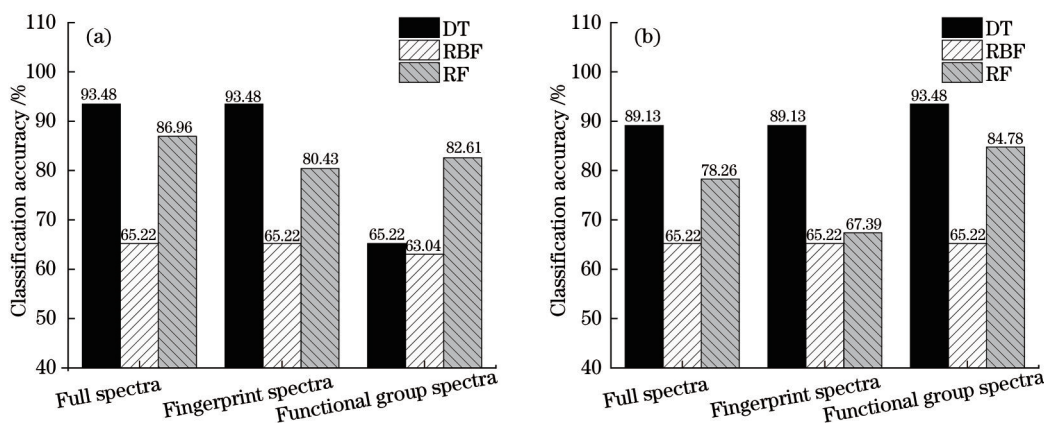


图 2 导数光谱不同区域下三种安眠镇静药的分类识别率。(a)一阶导数光谱;(b)二阶导数光谱

Fig. 2 Classification accuracies of three kinds of sedative-hypnotic drugs under different regions of derivative spectra. (a) First derivative spectra; (b) second derivative spectra

由图 2 数据可知,基于一阶导数光谱的分类识别率整体上高于二阶导数光谱,这可能是由于光谱数据在二次求导过程中造成了部分信息的缺失和分类识别率的下降。另外,基于导数光谱的 DT 模型与原始光谱相比,其对于三种安眠镇静类药物的分类识别率有所提高,其中全波段和指纹区数据的分类识别率分别增长了 12.23 个百分点和 10.67 百分点,具有较为明显的提升效果;基于导数光谱的 RBF 模型与原始光谱相比分类识别率有所下降,且基本维持在 65.22% 左右,仅将苯二氮卓类药物完全正确区分开来,另外两类药物未能准确区分;同时基于导数光谱的 RF 模型在分类效果上较原始光

谱有所提升,各部分的增长幅度在 0.75~11.96 百分点之间。以上数据证明了导数光谱所蕴含的安眠药种类信息与原始光谱相比总体上有所增加,运用导数光谱构建 DT 和 RF 模型能够有效提高三种安眠镇静类药物的分类识别准确率。

3.4 基于光谱融合数据的三种模型分类识别结果

近年来,多光谱数据融合结合多元统计分析对已知和未知种类物质进行分类分析的研究方法逐渐成为光谱和数据分析领域的一项热点。同一物质的多类光谱所具备的信息各有所侧重,而多光谱融合能够将不同种类光谱的关键信息进行整合,进而丰富光谱中所含的物质种类信息,提高多元统计

模型分类识别准确率。

3.4.1 不同融合方法下三种模型分类情况

不同种类光谱进行数据融合的方法不尽相同,本文首先考察了均值融合、差值融合和拼接融合三种融合方法对于模型分析的影响。均值融合是指将两类光谱相同波数处的吸收峰强度数据经标准化处理后计算得到平均值,将其作为融合光谱在相应波数下的新值;差值融合与均值融合相似,区别在于差值融合得到的是两类光谱相同波数处数据相减后的差值;串联融合是指将两类光谱的变量进行简单拼接,得到含有两类光谱全部变量信息的融合光谱,在拼接过程中不会改变原始数据,也不会产生新的数据。

本研究首先选择全波段的原始光谱、一阶导数光谱和二阶导数光谱两两进行三种方法的融合,并使用DT、RBF和RF三种多元统计方法进行建模分析。原始光谱与一阶导数光谱的融合、原始光谱与二阶导数光谱的融合、一阶导数光谱和二阶导数光谱的融合分别记作 Q_1 、 Q_2 和 Q_3 ,相关数据见表2。

表2 不同融合方式下三种安眠镇静药的分类识别率
Table 2 Classification accuracy of three kinds of sedative-hypnotic drugs under different types of fusion unit: %

| Item | | Classification accuracy | | |
|------|-------|-------------------------|-------------------|---------------|
| | | Average fusion | Difference fusion | Tandem fusion |
| DT | Q_1 | 65.22 | 65.22 | 93.48 |
| | Q_2 | 65.22 | 65.22 | 89.13 |
| | Q_3 | 65.22 | 65.22 | 93.48 |
| RBF | Q_1 | 65.22 | 65.22 | 65.22 |
| | Q_2 | 65.22 | 65.22 | 65.22 |
| | Q_3 | 65.22 | 65.22 | 78.26 |
| RF | Q_1 | 86.96 | 86.96 | 95.65 |
| | Q_2 | 86.96 | 86.96 | 89.13 |
| | Q_3 | 84.78 | 84.78 | 93.48 |

由表2数据可知,均值融合和差值融合方法下各部分的分类识别率均相同,其中使用DT模型和RBF模型对各部分进行建模分析时分类识别率均为65.22%(仅有苯二氮卓类安眠药的分类完全正确,吩噻嗪类巴比妥类均未被正确分类),使用RF模型进行建模分析的分类识别率最高可达86.96%。而串联融合方法下各部分的分类识别率相对较高,这可能是由于串联融合能够包含两种光谱的全部数据,融合过程中没有造成信息的损失,同时从分类识别结果来看,两种光谱经串联融合后的分类识别率与单一光谱相比均有所提高,综合来说是较为有效的融合方法。

与其他两种建模方法相比,RF模型对于串联融合方法下光谱数据的分类识别率较高,其中原始光谱与一阶导数光谱融合后的分类识别率可达95.65%,其他两类融合光谱的分类识别率也均高于90%。但这一融合方式存在一个问题,即串联融合后的光谱数据变量维度较高,冗余信息较多,导致模型的运算量增大,运算时间增长,经统计可知串联融合所需的建模时间与均值和差值融合相比分别增加了约75个百分点和80个百分点。同时高维变量信息会对模型的分类准确性造成一定的影响,因此必须采用一定的方法对融合数据进行降维处理,以提高模型精度、减少运算时长。

3.4.2 基于中级光谱融合数据的RF模型分类识别结果

在上述光谱数据融合过程中,单个光谱的变量维度没有发生变化,是在原维度基础上进行的数据融合,这称为光谱数据的初级融合。初级融合在对单个光谱的关键信息进行整合的同时,也掺杂了一定的冗余信息,这部分信息对于提高模型的分类识别率没有帮助,反而会降低模型精度,增加分析时间。而将单个光谱的诸多变量进行降维处理后再进行特征变量的融合,便称为光谱数据的中级融合。中级融合能够有效地精简数据维度,提取单一光谱的关键信息,剔除无关冗余信息,有利于模型更好更快地进行运算分析。

运用主成分分析(PCA)分别对原始光谱、一阶导数光谱、二阶导数光谱的全波段、指纹区和官能团区进行降维处理,分别提取三种类光谱下各区域贡献值大于1的特征变量。分别对全波段、指纹区和官能团区的原始光谱、一阶导数光谱和二阶导数光谱的特征变量进行两两之间的串联融合。光谱的全波段、指纹区和官能团区分别用下标数字“1”“2”“3”表示,原始光谱、一阶导数光谱和二阶导数光谱分别用大写英文字母“A”“B”和“C”表示,例如 A_1B_1 即代表全波段的原始光谱与一阶导数光谱特征变量的融合。使用RF方法分别构建不同光谱区域下三类光谱中级融合数据模型,三种安眠镇静类药物的分类识别率见图3。

由图3可知,光谱数据的中级融合能够有效提高三种安眠镇静类药物的分类识别率,其中使用原始光谱和一阶导数光谱的指纹区特征向量进行融合时,RF模型分类识别率能够达到100%,实现了苯二氮卓类、吩噻嗪类和巴比妥类三种安眠镇静

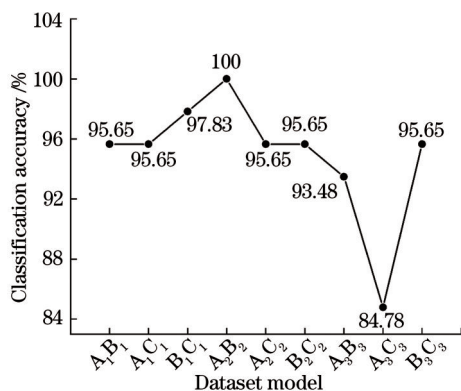


图 3 中级融合光谱在 RF 模型下的分类识别率

Fig. 3 Classification accuracy of intermediate fusing spectrum under RF model

类药物的完全区分。各样本在该模型下的空间分布如图 4 所示,其中 X 和 Y 分别表示 RF 模型二维分类空间的坐标轴。由图 4 可知,三种安眠镇静类药物在 RF 模型下具有明显的区域划分,其中苯二氮卓类药物总体上分布较为集中,表明各样本之间的谱图差异相对较小;而巴比妥类药物分布较为分散,表明各样本谱图之间具有相对明显的差异。

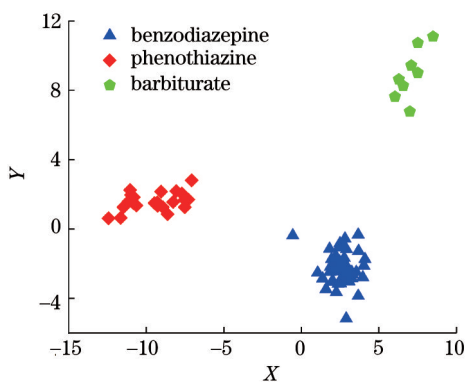


图 4 3 种安眠镇静药的二维分布图

Fig. 4 Two-dimensional distribution map of three kinds of sedative-hypnotic drugs

4 案例分析

2021 年,北京市海关缉私局在某起案件中查获疑似安眠镇静类药物片剂 4 份,分别命名为 M₁、M₂、M₃ 和 M₄,以上样本经过光学无损检验后再进行色谱质谱分析,4 份样本的衰减全反射-傅里叶变换红外光谱图如图 5 所示。由图 5 可知,M₁ 和 M₂ 的红外

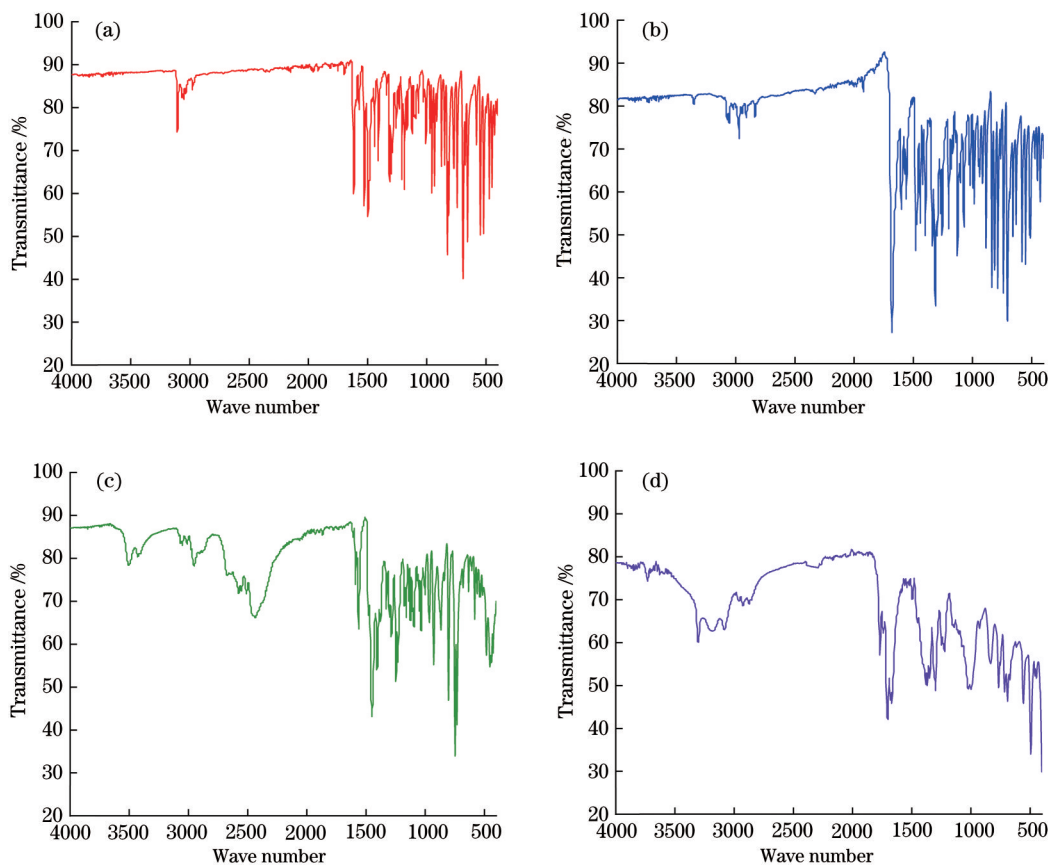


图 5 4 种未知样本的红外光谱图。(a) M₁; (b) M₂; (c) M₃; (d) M₄

Fig. 5 Infrared spectra of four unknown samples. (a) M₁; (b) M₂; (c) M₃; (d) M₄

光谱图具有较高的相似度, M_3 和 M_4 在峰形和相对峰高等方面差异性较大, 仅依靠谱图分析难以判别其种类, 需借助化学计量学的相关方法进行分析 and 认定。

以上述 92 份安眠镇静类药物样本作为训练集, 4 份未知种类安眠药样本为测试集, 构建基于中级融合光谱数据的 RF 模型, 4 份未知样本的种类判定结果如表 3 所示。同时色谱质谱检验结果印证了这一分类结论的准确性, 这表明上述模型对于未知样本具有较好的分类判别效果, 验证了该模型在安眠镇静类药物光谱模式识别方面的可行性。

表 3 4 种未知样本的分类结果

| Sample | Benzodiazepine | Barbiturate | Phenothiazine |
|--------|----------------|-------------|---------------|
| M_1 | ✓ | | |
| M_2 | ✓ | | |
| M_3 | | | ✓ |
| M_4 | | ✓ | |

5 结 论

本研究以苯二氮卓类、吩噻嗪类和巴比妥类安眠镇静类药物为研究对象, 使用衰减全反射-傅里叶变换红外光谱仪得到 92 份安眠药红外光谱图, 经光谱数据预处理后进行建模分析。实验结果表明, 使用光谱指纹区数据进行建模时的分类识别率高于全波段和官能团区; 导数光谱的分类效果与原始光谱相比有所提高; 采用串联融合的方法将原始光谱、一阶导数光谱和二阶导数光谱数据进行融合后的分类效果优于均值融合和差值融合; 同时, 采用中级光谱融合方法构建 RF 分类模型, 原始光谱和一阶导数光谱的指纹区特征变量进行串联融合后三种安眠药的分类识别率可达 100%, 实现了完全区分。这一实验结果证明了光谱数据融合技术能够突破单一光谱的限制, 通过整合不同光谱数据中的关键信息达到更好的模型分类效果。该研究可以在一定程度上为司法鉴定领域中安眠药类物质的检验提供一种新的思路和方法, 为公安机关处理此类案件提供一定的借鉴和参考。

参 考 文 献

[1] Mao T, Jiang J, Lu Y. Suggestions on key research areas of technical support system for food safety supervision during the 13th five-year plan[J]. Food Science, 2018, 39(11): 302-308.

毛婷, 姜洁, 路勇. “十三五”期间食品安全监管技术支撑体系研究重点领域建议[J]. 食品科学, 2018, 39(11): 302-308.

[2] Wang W Z, Jiang H F, Zhao M. Current situation of psychoactive prescription drug abuse[J]. Chinese Journal of Drug Dependence, 2019, 28(3): 178-182, 188.
王文哲, 江海峰, 赵敏. 精神活性处方药物滥用现状[J]. 中国药物依赖性杂志, 2019, 28(3): 178-182, 188.

[3] Rust K Y, Baumgartner M R, Meggiolaro N, et al. Detection and validated quantification of 21 benzodiazepines and 3 “z-drugs” in human hair by LC-MS/MS[J]. Forensic Science International, 2012, 215(1/2/3): 64-72.

[4] Zhang L, Jin X, Fu L Y, et al. Recognition method for weeds in rapeseed field based on Faster R-CNN deep network[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2020, 57(2): 021508.
张乐, 金秀, 傅雷扬, 等. 基于 Faster R-CNN 深度网络的油菜田间杂草识别方法[J]. 激光与光电子学进展, 2020, 57(2): 021508.

[5] Argyri A A, Panagou E Z, Tarantilis P A, et al. Rapid qualitative and quantitative detection of beef fillets spoilage based on Fourier transform infrared spectroscopy data and artificial neural networks[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2010, 145(1): 146-154.

[6] Buitrago M F, Skidmore A K, Groen T A, et al. Connecting infrared spectra with plant traits to identify species[J]. ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing, 2018, 139: 183-200.

[7] Grunert T, Stephan R, Ehling-Schulz M, et al. Fourier transform infrared spectroscopy enables rapid differentiation of fresh and frozen/thawed chicken[J]. Food Control, 2016, 60: 361-364.

[8] He X L, Wang J F, Wang F, et al. Rapid identification of rubber particles based on second derivative infrared spectra[J]. China Measurement & Test, 2019, 45(9): 60-64, 83.
何欣龙, 王继芬, 王飞, 等. 二阶导数红外光谱快速鉴别轮胎橡胶颗粒[J]. 中国测试, 2019, 45(9): 60-64, 83.

[9] He X L, Wang J F, Zhang Q, et al. Infrared spectroscopy analysis of marker ink based on multi-classification model[J]. Chemistry, 2019, 82(2): 169-174.
何欣龙, 王继芬, 张倩, 等. 基于多分类模型的记号

- 笔墨水红外光谱分析[J]. 化学通报, 2019, 82(2): 169-174.
- [10] Koch M, Suhr C, Roth B, et al. Iterative morphological and mollifier-based baseline correction for Raman spectra[J]. Journal of Raman Spectroscopy, 2017, 48(2): 336-342.
- [11] Yang N N, Yang C Y, Wang Y Z, et al. Application of FTIR and active ingredients quantitative analysis on quality control of Dai medicine *alstonia scholaris* (L.)R. Br[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2017, 37(1): 58-64.
- 杨妮娜, 杨春勇, 王元忠, 等. FTIR 结合有效成分定量分析在傣药灯台叶质量控制中的应用[J]. 光谱学与光谱分析, 2017, 37(1): 58-64.
- [12] Bi Y M, Yuan K L, Xiao W Q, et al. A local pre-processing method for near-infrared spectra, combined with spectral segmentation and standard normal variate transformation[J]. Analytica Chimica Acta, 2016, 909: 30-40.
- [13] Lindemann M E, Guberina N, Wetter A, et al. Improving ^{68}Ga -PSMA PET/MRI of the prostate with unrenormalized absolute scatter correction[J]. Journal of Nuclear Medicine, 2019, 60(11): 1642-1648.
- [14] Mishra P, Lohumi S. Improved prediction of protein content in wheat kernels with a fusion of scatter correction methods in NIR data modelling[J]. Biosystems Engineering, 2021, 203(1): 93-97.
- [15] Qin J Q, Kong X Y, Sun X R. Influence of different data normalizing methods on the performance of Sevcik fractal dimension algorithm[J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2016, 37(7): 1485-1491.
- 秦建强, 孔祥玉, 孙喜荣. 数据标准化对 Sevcik 分形维数算法的性能影响[J]. 仪器仪表学报, 2016, 37(7): 1485-1491.
- [16] Zhang L, Cui Y, Liu J, et al. Application of machine learning in cyberspace security research[J]. Chinese Journal of Computers, 2018, 41(9): 1943-1975.
- 张蕾, 崔勇, 刘静, 等. 机器学习在网络空间安全研究中的应用[J]. 计算机学报, 2018, 41(9): 1943-1975.
- [17] Bao Q L, Ding J L, Wang J Z. Prediction of soil moisture content by selecting spectral characteristics using random forest method[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2018, 55(11): 113002.
- 包青岭, 丁建丽, 王敬哲. 利用随机森林方法优选光谱特征预测土壤水分含量[J]. 激光与光电子学进展, 2018, 55(11): 113002.
- [18] Hou W, Wang J F, He X L. Spectral classification and identification of methamphetamine and its common additives based on multivariate modeling[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2021, 58(3): 0330003.
- 侯伟, 王继芬, 何欣龙. 基于多元建模的甲基苯丙胺及其常见添加剂混合物光谱分类识别[J]. 激光与光电子学进展, 2021, 58(3): 0330003.
- [19] He X L, Wang J F, Wu F L, et al. Identification of the infrared spectra of tire rubber based on chemometrics [J]. Journal of Analytical Science, 2019, 35(3): 357-361.
- 何欣龙, 王继芬, 吴福璐, 等. 基于化学计量学的橡胶颗粒红外光谱分析鉴别[J]. 分析科学学报, 2019, 35(3): 357-361.