

改进自编码网络特征提取在近红外定量分析的应用

罗智勇¹, 秦玉华^{1*}, 王世界¹, 何素素¹, 张海涛²¹青岛科技大学信息科学技术学院, 山东 青岛 266061;²云南中烟工业有限责任公司技术中心, 云南 昆明 650024

摘要 针对近红外光谱高维、非线性、大量噪声对定量建模的影响,将深度自编码网络引入到光谱特征学习中,提出一种改进卷积自编码网络的特征提取方法(1D-BCAE),并将其应用到烟叶关键指标的近红外光谱定量建模中,提高了模型的准确性和稳健性。首先利用适合光谱数据的一维卷积核和池化窗口进行特征提取,其次在编码过程中加入BasicBlock模块和批归一化(BN)结构优化网络结构,减少了参数量和计算量的同时,降低了光谱中的噪声和非线性特征的影响,优化了网络的训练效率。通过设计一种对应相连的结构,把编码器中各模块的参数传递给相应的解码器,减少了网络训练过程中细节特征的丢失。通过实验对比重构误差和均方根误差,验证了所提方法的有效性,然后分别采用全谱段和主成分分析(PCA)、卷积自编码(CAE)网络、1D-BCAE提取后的特征结合偏最小二乘(PLS)法建立了关于烟叶中烟碱、总糖指标的定量模型,并进行了对比分析。结果表明,1D-BCAE能有效学习高维数据中的内在结构和非线性关系,所建的模型具有更好的性能。所提方法实现了对待测组分光谱信息的有效提取,对建立稳健校正模型、降低模型复杂度具有重要意义。

关键词 卷积自编码网络; 近红外光谱定量分析; 特征提取; 一维卷积; BasicBlock模块

中图分类号 O433

文献标志码 A

DOI: 10.3788/LOP220740

Application of Improved Auto-Encoding Network Feature Extraction Method in Near Infrared Spectral Quantitative Analysis

Luo Zhiyong¹, Qin Yuhua^{1*}, Wang Shijie¹, He Susu¹, Zhang Haitao²

¹College of Information Science and Technology, Qingdao University of Science & Technology, Qingdao 266061, Shandong, China;

²Technical Research Center, China Tobacco Yunnan Industrial Co., Ltd., Kunming 650024, Yunnan, China

Abstract This study introduces a depth auto-encoding network into spectral feature learning and proposes an improved feature extraction method based on a convolution auto-encoding network (1D-BCAE) to address the impacts of high dimension, nonlinearity, and a lot of noise in the near-infrared spectrum on quantitative modeling. The feature extraction method is applied to the quantitative modeling of key indexes of tobacco using near-infrared spectroscopy, which improves the accuracy and robustness of the model. First, this method uses a one-dimensional convolution kernel and a pooling window suitable for spectral data feature extraction. Second, in the coding process, the BasicBlock module and batch normalization (BN) structure are added to optimize the network structure, which reduce the number of parameters and computation, reduces the noise and nonlinear characteristics of the spectrum, and optimizes the training efficiency of the network. By designing a corresponding connected structure, the parameters of each module in the encoder are passed to the corresponding decoder, which reduces the loss of detailed features in the network training process. The effectiveness of the proposed method is verified by comparing the reconstruction error and root mean square error in experiments. The quantitative models about nicotine and total sugar in tobacco leaves are established using the features extracted by the full spectrum segment and principal component analysis (PCA), convolutional auto-encoding (CAE) network, and 1D-BCAE combined with the partial least squares (PLS) method, respectively. The results reveal that 1D-BCAE can effectively learn the internal structure and nonlinear relationships in high-dimensional data, and the established model performs better. The proposed method can effectively extract the spectral information of the components to be measured, which is critical for developing a robust correction model and reducing model complexity.

收稿日期: 2022-02-15; 修回日期: 2022-03-15; 录用日期: 2022-03-29; 网络首发日期: 2022-04-10

基金项目: 云南中烟工业有限责任公司科技项目(2019XX03)

通信作者: *yuu71@163.com

Key words convolutional auto-encoding network; quantitative analysis by near-infrared spectroscopy; feature extraction; one-dimensional convolution; BasicBlock module

1 引言

近红外光谱(NIRS)技术是一种绿色环保、无损分析技术^[1],具有无需样品预处理、无污染、操作简便、检测速度快及样品的非破坏性等优点^[2],可与化学计量学方法相结合实现对样品的定性和定量分析,被广泛应用在石油化工、医药、环境科学、食品安全等领域^[3-4]。然而近红外光谱数据具有高维、谱带重叠、高噪声和非线性等特征^[5],导致建立的定量分析模型在数据预测的过程中会产生较大的误差,因此在建立分析模型之前对光谱进行特征提取,可以有效消除噪声和冗余信息的影响,提高模型的准确性和稳健性^[6]。何勇等^[7]采用主成分分析(PCA)与神经网络相结合的方法对光谱数据进行降维,将PCA变换后的线性变量作为模型的输入参数,但PCA为线性降维方法时忽略了近红外光谱数据的真实内在结构,无法获取数据的非线性结构特征;高全学等^[8]提出了改进 local preserving projection(LPP)的非线性降维算法,该算法在特征提取过程中融合了局部结构和差异信息,然而对稀疏性较大的近红外光谱数据效果并不理想;鲁梦瑶等^[9]提出隔点采样的方法对光谱数据进行特征提取,加快收敛速度,但该方法容易丢失重要特征。当高维数据呈现复杂及非线性结构时,这些方法难以发现能够表现数据集的主要特征,从而无法实现有效的特征提取^[10]。

近年来随着深度学习的快速发展,以自编码(AE)网络为基础的特征提取算法得到了广泛的应用^[11]。通常在AE网络的损失函数中引入Kullback-Leibler(KL)散度,使得网络获得稀疏性限制,得到的稀疏自编码(SAE)网络可以在特征提取过程中降低数据维度的同时,保持数据的原始结构,获得更好的特征表示。卷积神经网络的成功应用也让卷积核成功融入自编码网络中^[12],在编码过程中使用卷积池化运算,能够更好地对数据进行有效提取。张西宁等^[13]提出了一种深度卷积自编码网络,该网络在滚动轴承故障诊断中得到应用。罗仁泽等^[14]提出一种残差卷积自编码网络图像去噪方法,用于去除图像的噪声。目前自编码网络在图像的降噪和特征提取方面取得了较好的效果,而在高维光谱数据的特征提取上少有研究。

因此,针对近红外光谱数据高维、高噪声、非线性等特征,本文提出一种改进的基于BasicBlock模块的卷积自编码网络特征提取方法(1D-BCAE),并结合偏最小二乘(PLS)法构建了烟叶中烟碱、总糖指标的定量分析模型,实现了对烟叶光谱数据中信息的有效提取,提高了近红外光谱定量建模性能。

2 基于改进自编码网络特征提取的近红外定量建模方法

2.1 自编码网络降维方法

AE网络是一种无监督学习算法^[15],主要用于数据降维和特征提取。网络结构由编码和解码两部分组成,如图1所示。编码器对输入的数据进行编码,可以得到输入数据的高级特征表示,解码器对编码后的数据进行重构输出^[16],通过对比输入和输出,优化模型参数,完成网络训练,使隐含层数据能够表达输入数据。因此,自编码器能够学习到那些反映数据本质的特征,揭示高维数据的低维流行结构。

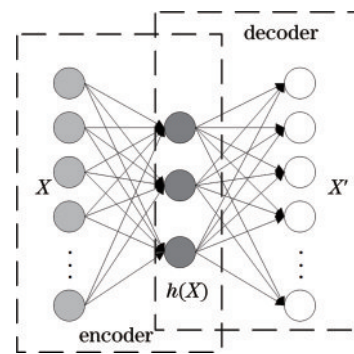


图1 自编码网络模型

Fig. 1 Auto-encoding network model

编码过程就是通过 $h(X)$ 函数把输入集 X 映射到隐含层中,解码过程就是将隐含层的 $h(X)$ 映射到输出层,以对输入集 X 进行重构。AE网络利用尽可能相等的输入和输出来优化训练网络参数,重构误差函数可以展示出输入和输出的相似度。

2.2 改进卷积自编码网络特征提取方法

卷积神经网络中卷积和池化运算具有较强的特征提取能力^[17]。在AE中,将原来的编码器用一个卷积层和池化层替换,而解码器由一个下采样层和反卷积层代替,构成了卷积自编码(CAE)网络。其可以对输入的特征进行降采样以提供较小维度的潜在表示,结构如图2所示。

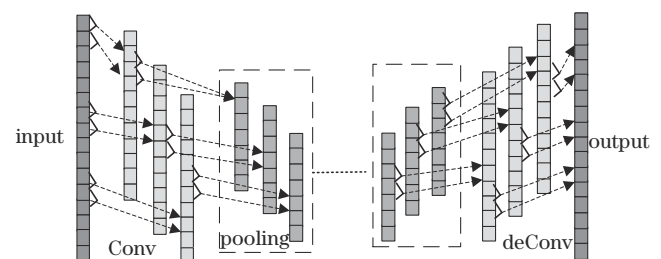


图2 卷积自编码网络结构

Fig. 2 Convolutional auto-encoding network

在编码过程中需要完成卷积核池化运算,计算公式为

$$X = f\left(\sum x * w_i + b_i\right), \quad (1)$$

$$X = \text{pooling}(x_i), \quad (2)$$

式中: w_i 是卷积核权重; b_i 表示偏置; $*$ 代表卷积运算; f 是相关激活函数, 选择 ReLU 激活函数; x_i 是经过卷积运算后得到的特征; $\text{pooling}(\cdot)$ 是池化函数。

在解码过程中需要进行反卷积和上采样的过程, 与编码过程相逆, 公式为

$$Y = f\left(\sum x \otimes w_i + b_i\right), \quad (3)$$

$$Y = \text{unspooling}(y_i), \quad (4)$$

式中: w_i 是卷积核参数; \otimes 表示反卷积运算; $\text{unspooling}(\cdot)$ 是上采样函数, 进行反池化运算。

CAE 对图像等二维数据具有较好的特征提取性能, 但难以直接适用到高维光谱数据的特征提取中。因此, 针对近红外光谱高维、高噪声、非线性特征, 对卷积自编码网络特征提取方法做了改进, 改进后的网络结构 1D-BCAE 如图 3 所示。

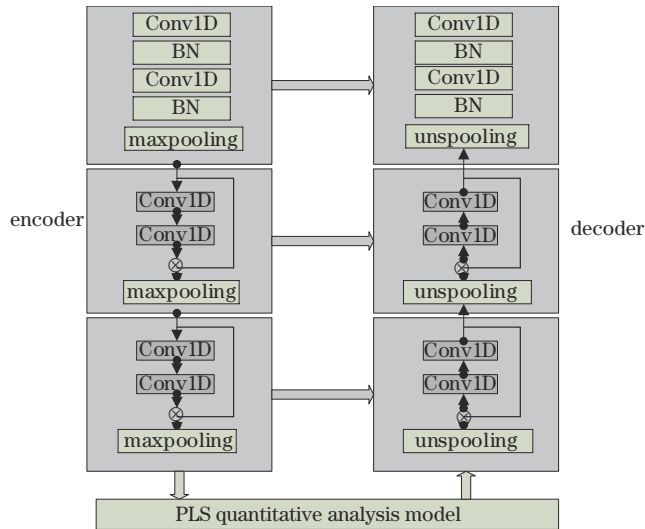


图 3 1D-BCAE 的结构

Fig. 3 1D-BCAE structure

首先, 将卷积核和池化窗口尺寸修改成一维向量结构, 其次在编码过程中加入 BasicBlock 模块, 在减少参数量和计算量的同时, 降低了光谱中的噪声、冗余及非线性特征的影响, 保证了信息的有效提取。通过设计一种对应相连的结构, 连接相对应的编码器和解码器, 把编码器中各模块的参数传递给相应的解码器, 减少了网络训练过程中细节特征的丢失。在卷积层后面接入批归一化(BN)层模块, 通过归一化的方式, 解决每次卷积计算后数据内在分布变得分散导致的网络效率降低问题。具体改进措施如下。

1) 卷积核

传统的卷积核和池化窗口都是由方形矩阵构成的, 用于对图像等二维数据的特征提取, 不适用于光谱

数据。本文将方形结构修改成一维向量的形式, 由传统的 $n \times n$ 形式修改为 $1 \times n$ 的形式, 便于对光谱数据进行特征提取。经过比较, 将卷积核设为 1×3 , 步长设为 2。池化窗口尺寸为 1×2 , 步长为 1。

2) 1D-BCAE 编码器

1D-BCAE 的编码器由 3 个模块组成。

第一个模块由 2 个相连的卷积层和 1 个最大池化层组成, 使用两个小窗口相连的卷积层结构可以减少计算量, 进行更多的非线性映射, 提高网络性能的同时获得大卷积核的感受野, 计算过程为

$$H_1 = \text{ReLU}\left[\text{ReLU}(X * w_1 + b_1) * w_2 + b_2\right], \quad (5)$$

$$M(H_1) = \text{maxpooling}(H_1), \quad (6)$$

式中: X 为输入集; w 表示卷积核的权值; b 表示偏置; $\text{maxpooling}(\cdot)$ 表示池化层选择的最大池化函数; H_1 为通过两个卷积层后的特征输出; $M(H_1)$ 为通过池化层后的输出。

第二个模块和第三个模块都是由 1 个 BasicBlock 模块和 1 个池化层组成的。BasicBlock 模块通过残差学习来获得数据更深层次的表达, 对于映射输入 y , 有 $y = F(x) + x$, 而残差模块需要学习的是 $F(x) = y - x$, 解决了网络训练中出现的梯度消失问题。

网络中第二个模块和第三个模块的输出特征可表示为

$$H_i = \text{ReLU}\left\{\text{ReLU}\left[M(H_{i-1}) * w_{i1} + b_{i1}\right] * w_{i2} + b_{i2} + M(H_{i-1})\right\}, \quad (7)$$

$$M(H_i) = \text{maxpooling}(H_i). \quad (8)$$

3) 1D-BCAE 解码器

解码器包含三个模块, 每个模块和编码器对应相连。第一个模块和第二个模块由 1 个上采样层和 1 个 BasicBlock 残差模块组成, 上采样层中选择 $\text{unspooling}(\cdot)$ 函数, 目的是对上一层输入数据维度进行放大, 恢复池化计算后减少的数据维度。对于经过三个编码模块之后得到的特征 $M(H_3)$, 输出可表示为

$$N(H_j) = \text{unspooling}\left[M(H_j)\right], \quad (9)$$

$$H'_j = \text{ReLU}\left\{\text{ReLU}\left[N(H_j) \otimes w_{j1}' + b_{j1}'\right] \otimes w_{j2}' + b_{j2}' + N(H_j)\right\}. \quad (10)$$

第三个模块由 1 个上采样层和 2 个反卷积层组成, 和编码器中第一个模块相反, 计算公式为

$$N(H_1) = \text{unspooling}(H'_2), \quad (11)$$

$$H'_1 = \text{ReLU}\left\{\text{ReLU}\left[N(H_1) \otimes w'_1 + b'_1\right] \otimes w'_2 + b'_2\right\}. \quad (12)$$

4) BN 结构

在网络的训练过程中, 经历多次的卷积计算后, 内部变量会发生偏移, 导致原始数据分布逐渐分散, 会使得网络的训练速度变慢、效率低下, 因此在每个卷积层后面接一个 BN 层。引入 BN 层的目的是对卷积核

提取后的数据进行归一化处理,能够保留学习到的特征,以防在模型训练时样本数据的分布结构变得分散而导致模型训练效率降低,提高网络的泛化能力,让经卷积层后分布变得松散的数据按照分布规律重新规划到一个标准的范围之内。BN层归一化计算公式为

$$\mu_{\beta} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m x_i, \quad (13)$$

$$\sigma_{\beta}^2 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (x_i - \mu_{\beta})^2, \quad (14)$$

$$\hat{x}_i = \frac{x_i - \mu_{\beta}}{\sqrt{\sigma_{\beta}^2 + \epsilon}}, \quad (15)$$

$$y_i = \hat{x}_i + \beta \equiv \text{BN}_{\gamma, \beta}(x_i), \quad (16)$$

式中: β 和 γ 均为模型可学习参数。

5) 对应相连接结构

在网络中,编码器中的每个模块和解码器的每个模块对应相连,便于将编码器中各模块训练好的参数传递到解码器中,对解码器中的参数进行初始化,减少训练时间,增加模型训练效率,还能减少训练过程中的信息丢失。

基于卷积自编码改进后的 1D-BCAE 的流程如图 4 所示。

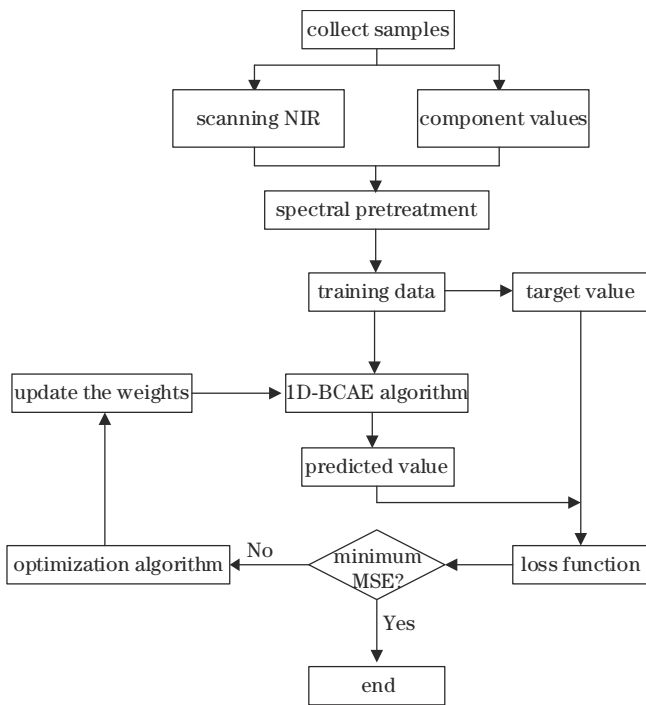


图 4 1D-BCAE 的流程

Fig. 4 Flow chart of 1D-BCAE

2.3 基于特征提取的近红外定量建模方法

提出的基于改进深度自编码网络的特征提取方法用于近红外定量建模的步骤如下。

1) 将采集的近红外光谱数据作为训练样本输入到 1D-BCAE 模型中,通过训练第一个模块确定参数并获得第一个模块在该参数下的输出,然后将得到的输出结果作为第二个模块的输入,直到获得编码器中

最后一个模块的输出结果,得到该模型初步提取到的特征光谱数据。

2) 为了减小计算成本,提高模型效率,将 1D-BCAE 中编码器和解码器对应相连接,将步骤 1) 各个模块中训练好的参数同步传递到解码器的各个模块中,进行参数初始化。

3) 将步骤 1) 中获得的光谱数据特征输入到解码器第一个模块中,通过训练确定参数并获得第一个模块在该参数下的输出,将得到的输出结果作为第二个模块的输入,如此循环,直到完成全部的解码运算。

4) 求得所有模型的代价函数,并计算代价函数的偏导数。

5) 利用步骤 1) 和步骤 2) 中确定的参数对网络模型进行初始化,通过损失函数进行反馈优化,确定整个模型的最优参数。

6) 将训练好的 1D-BCAE 用于光谱数据特征提取,对提取的特征采用 PLS 方法进行定量建模。

3 实验部分

3.1 数据来源

实验选取某烟草企业 560 个不同产地、品种、等级的代表性烤烟样品。按照 3:1 的比例随机选取 320 个作为训练集,剩余 140 个作为测试集。烟叶的化学成分指标含量由权威机构根据常规化学分析方法测定。

3.2 光谱数据采集与数据处理

将样品在 60 °C 下烘 2 h,粉碎后过 40 目筛,装入密封袋中平衡 24 h。使用尼高力公司的 Antaris II 近红外光谱仪,光谱扫描范围为 4000~10000 cm^{-1} ,利用漫反射方式进行光谱采集,分辨率为 8 cm^{-1} ,室温保持在 18~22 °C。每个样品取质量为 15 g,压实放置近红外光谱仪中扫描 3 次,取 3 次光谱的平均值作为最终的光谱。光谱的原始谱图如图 5 所示。

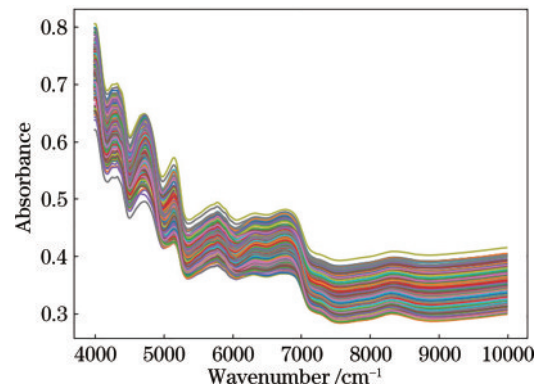


图 5 烟叶样本的原始近红外光谱

Fig. 5 Original near infrared spectra of cigarette samples

光谱数据分析及建模计算设备采用 i5-9400h 处理器和 GTX1660ti 显卡,软件使用 pycharm2019 和 matplotlib、pandas 工具箱。

4 结果与讨论

4.1 预处理方法

光谱采集过程中仪器误差、噪声等都会对采集的光谱产生影响,所以在建模之前需对光谱数据进行预处理,以消除基线漂移和其他背景干扰,增加信噪比,提高模型的预测精度。对比了标准正态变换(SNV)、Savitzky-Golay(SG)平滑、多元散射校正(MSC)并结合 1 阶导数、2 阶导数对光谱进行预处理,将预处理之后的光谱数据输入到 1D-BCAE 模型中并建立定量分析模型。以烟碱为例,多次实验对比结果如表 1 所示。

表 1 烟碱预处理方法对比

Table 1 Comparison results of nicotine pretreatment methods

Pretreatment method	Root mean square error of cross validation
SNV+1st derivative	0.1357
SNV+2nd derivative	0.1384
SG+1st derivative	0.0987
SG+2nd derivative	0.1172
MSC+1st derivative	0.1401
MSC+2nd derivative	0.1524
No pretreatment	0.3453

从表 1 可以看出,不使用任何预处理方法时,模型的交叉验证均方根误差(RMSECV)最大,模型效果较差,而采用 SG 平滑+1 阶导数对光谱进行预处理的模型的 RMSECV 最小。图 6 为 SG+1 阶导数处理后的光谱图,可以看出预处理后的光谱趋于平滑化,在放大光谱信号的同时,能够有效地减少噪声,消除原始谱图的漂移现象,便于后续从光谱数据中提取到充分有效的信息,提高模型性能。

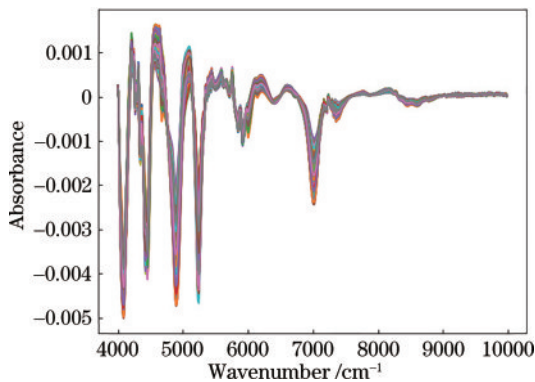


图 6 SG+1 阶导数处理后的光谱图

Fig. 6 Pretreatment spectra of SG+1st derivative

4.2 特征提取性能分析

为了验证改进模型的可行性,首先采用 AE、CAE、1D-BCAE 三种不同网络结构,以预处理后的光谱数据为输入,分别进行训练和预测,利用重构误差和均方根误差对模型进行评价。重构误差是以训练之前数据为初始状态,经过网络编码和解码后得到的数据与原数据的差异,计算公式为

$$e = \sum_{i=1}^n \| \mathbf{V} - \mathbf{V}^{(i)} \|, \quad (17)$$

式中: \mathbf{V} 是输入到网络中的样本数据; $\mathbf{V}^{(i)}$ 为经过网络解码之后得到的数据。重构误差和均方根误差能够在一定程度上反映自编码网络对训练数据的似然度,从而解释网络中隐含层得到的数据对原始数据的表征度。均方根误差可用来衡量观测值同真实值之间的偏差,表 2 为各模型的重构误差和均方根误差。可以看出,1D-BCAE 的重构误差和均方根误差都明显低于其他模型,表明 1D-BCAE 模型性能强于 AE、CAE 等传统自编码网络。

表 2 不同模型的重构误差和均方根误差

Table 2 Reconstruction error and root mean square error of different models

Network	Reconstruction error / %	Root mean square error
AE	47.53	0.042
CAE	35.79	0.027
1D-BCAE	17.26	0.016

4.3 BN 结构

BN 结构是一种数据批量归一化的处理方法,首先计算样本数据的均值和方差,通过转换公式,数据保留有学习到的特征并集中在一定的范围内。神经网络的本质是学习数据的内在结构,而在实验过程中,训练样本数据和测试样本数据的分布结构会有所不同,包括训练过程中的每批训练数据也会各不相同,导致网络模型在每次迭代时都需要去学习不同的结构,降低了网络的训练效率。BN 结构可以提高网络的泛化能力,防止过拟合。因此在模型的每个卷积层后面加入 BN 结构。表 3 为加入 BN 结构前后模型完成训练所需要的迭代次数和总时长。增加 BN 层之后网络对每个样本的训练时间相比没有增加 BN 层的网络有所增加,但是模型达到拟合时需要的迭代次数大幅减少,总训练时长也大大降低。由此可见 BN 层的加入可以更好地提高网络的训练效率。

表 3 训练时长对比

Table 3 Comparison of training duration

Model	Number of iterations	Total time / s
Model with BN	500	1215
Model without BN	1000	2186

4.4 定量建模性能分析

为了进一步验证 1D-BCAE 特征提取方法对近红外定量建模的性能,选取烟叶中烟碱、总糖指标,采用 PLS 法,分别利用全谱段和主成分分析(PCA)、CAE 网络、1D-BCAE 提取后的特征,采用 6 折交叉验证的方法建立了烟碱、总糖指标的定量校正模型。表 4 为不同特征子集的定量建模和预测性能的对比。可以看出:对于烟碱、总糖指标,1D-BCAE 特征提取模型的

表 4 不同特征子集的定量建模性能对比

Table 4 Comparison of quantitative modeling performance of different feature subsets

Method	Nicotine				Total sugar			
	RMSECV	RMSEP	R^2	Mean prediction error / %	RMSECV	RMSEP	R^2	Mean prediction error / %
Full spectrum	0.3003	0.3154	0.9523	6.523	0.7135	0.7215	0.9512	6.344
PCA	0.2435	0.2563	0.9601	5.878	0.6658	0.6368	0.9601	5.022
CAE	0.1401	0.1421	0.9713	4.502	0.4967	0.4782	0.9712	4.124
1D-BCAE	0.0987	0.1125	0.9879	3.713	0.3947	0.3892	0.9891	2.876

RMSECV、预测均方根误差 (RMSEP)、决定系数 (R^2)、平均预测误差与全谱段、PCA、CAE 相比,均取得了最好的效果;而使用全谱段的模型的效果最差,说明全谱段光谱中含有大量的噪声和冗余信息,导致所建模型的性能最差,而且外部小的变化会对模型产生较大影响,模型抗干扰能力差;PCA 为线性降维方法,减少了光谱中的冗余信息,增加了信噪比,但无法获取光谱的非线性结构,导致模型精确度不够;CAE 方法

利用卷积池化运算,较为有效地提取到了光谱数据特征,然而单层的卷积池化运算无法得到光谱数据更深层次的表示,且容易造成数据的丢失,使模型的预测性能无法达到最佳状态;1D-BCAE 可以更有效地对高维、非线性的光谱数据进行特征提取,所建模型的精确度最好,模型更加稳健,适应性更广。

图 7 分别为 PCA、CAE、1D-BCAE 特征提取方法所建模型对训练集和测试集样本的预测值-真实值相

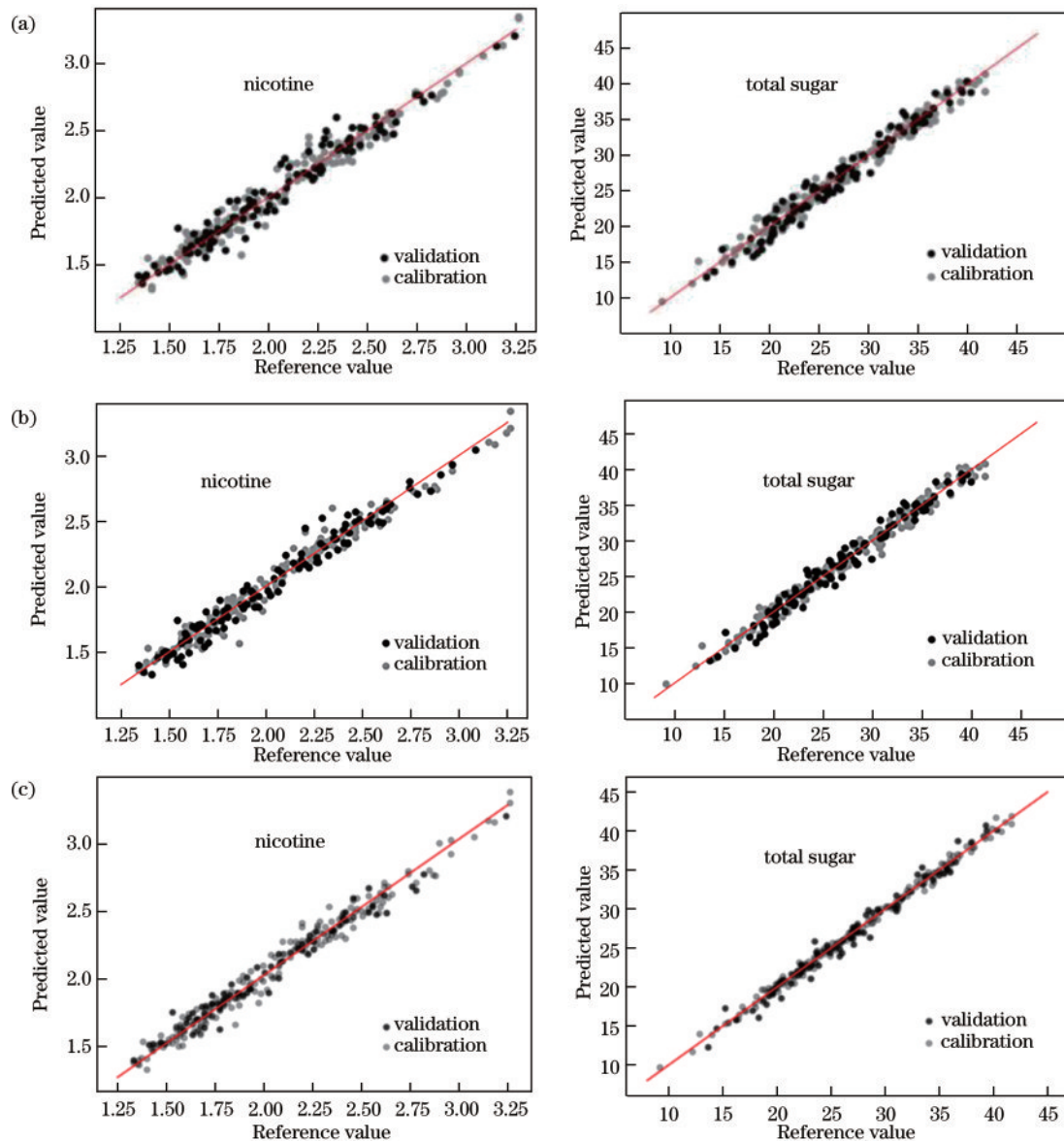


图 7 预测值-真实值曲线。(a)PCA;(b)CAE;(c)1D-BCAE

Fig. 7 Predicted value-true value curve. (a) PCA; (b) CAE; (c) 1D-BCAE

关图,其中直线表示斜率为 1 的拟合曲线。数据点越靠近拟合曲线,表示预测的偏差越小。可以看出,1D-BCAE 特征提取方法所建模型关于烟碱、总糖的预测值-真实值基本均匀分布在拟合曲线附近,预测值和真实值非常接近,效果明显优于 PCA、CAE 所建模型,说明 1D-BCAE 特征提取后所建模型的性能较好。

5 结 论

针对近红外光谱高维、非线性的特点,提出一种基于改进自编码网络的特征提取方法 1D-BCAE,该方法利用深度网络提取光谱数据的本质特征,使之保留近红外光谱数据的非线性结构。通过对网络结构的研究设计,提高了网络对有效特征提取的能力,保证了定量分析时模型的预测性能。以烟碱、总糖为例,分析比较了所提方法对高维光谱数据的特征提取能力,结果表明,1D-BCAE 可以更好地提取光谱数据特征,降低噪声、冗余信息及非线性结构的影响。所提方法可以有效提高定量分析模型的精确度,对建立稳健校正模型、降低模型复杂度具有重要意义。

参 考 文 献

- [1] 秦玉华,丁香乾,宫会丽. 高维特征选择方法在近红外光谱分类中的应用[J]. 红外与激光工程, 2013, 42(5): 1355-1359.
Qin Y H, Ding X Q, Gong H L. High dimensional feature selection in near infrared spectroscopy classification [J]. Infrared and Laser Engineering, 2013, 42(5): 1355-1359.
- [2] 胡建,冯耀泽,王益健,等. 基于近红外光谱的鲜味物质与鲜味强度检测[J]. 光学学报, 2022, 42(1): 0130002.
Hu J, Feng Y Z, Wang Y J, et al. Detection of umami substances and umami intensity based on near-infrared spectroscopy[J]. Acta Optica Sinica, 2022, 42(1): 0130002.
- [3] Chen Z H, Luan X L, Liu F. Near-infrared fault detection based on stacked regularized auto-encoder network [J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2020, 204: 104101.
- [4] Mees C, Souard F, Delporte C, et al. Identification of coffee leaves using FT-NIR spectroscopy and SIMCA [J]. Talanta, 2018, 177: 4-11.
- [5] 罗微,杜焱喆,章海亮. PCA 和 SPA 的近红外光谱识别白菜种子品种研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2016, 36(11): 3536-3541.
Luo W, Du Y Z, Zhang H L. Discrimination of varieties of cabbage with near infrared spectra based on principal component analysis and successive projections algorithm[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2016, 36(11): 3536-3541.
- [6] Liu J, Yang Z, Liu Y, et al. Hyperspectral remote sensing images deep feature extraction based on mixed feature and convolutional neural networks[J]. Remote Sensing, 2021, 13(13): 2599-2606.
- [7] 何勇,李晓丽. 用近红外光谱鉴别杨梅品种的研究[J]. 红外与毫米波学报, 2006, 25(3): 192-194, 212.
He Y, Li X L. Discriminating varieties of waxberry using near infrared spectra[J]. Journal of Infrared and Millimeter Waves, 2006, 25(3): 192-194, 212.
- [8] 高全学,谢德燕,徐辉,等. 融合局部结构和差异信息的监督特征提取算法[J]. 自动化学报, 2010, 36(8): 1107-1114.
Gao Q X, Xie D Y, Xu H, et al. Supervised feature extraction based on information fusion of local structure and diversity information[J]. Acta Automatica Sinica, 2010, 36(8): 1107-1114.
- [9] 鲁梦瑶,杨凯,宋鹏飞,等. 基于卷积神经网络的烟叶近红外光谱分类建模方法研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2018, 38(12): 3724-3728.
Lu M Y, Yang K, Song P F, et al. The study of classification modeling method for near infrared spectroscopy of tobacco leaves based on convolution neural network[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2018, 38(12): 3724-3728.
- [10] Li Q Q, Zeng J Q, Lin L, et al. Mid-infrared spectra feature extraction and visualization by convolutional neural network for sugar adulteration identification of honey and real-world application[J]. LWT, 2021, 140: 110856.
- [11] 崔广新,李殿奎. 基于自编码算法的深度学习综述[J]. 计算机系统应用, 2018, 27(9): 47-51.
Cui G X, Li D K. Overview on deep learning based on automatic encoder algorithms[J]. Computer Systems & Applications, 2018, 27(9): 47-51.
- [12] 季颖,龚凌冉,傅爽,等. 基于卷积神经网络的相位体自动识别方法研究[J]. 激光与光电子学进展, 2022, 59(6): 0617026.
Ji Y, Gong L R, Fu S, et al. Automatic phase recognition method based on convolutional neural network [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2022, 59(6): 0617026.
- [13] 张西宁,向宙,唐春华. 一种深度卷积自编码网络及其在滚动轴承故障诊断中的应用[J]. 西安交通大学学报, 2018, 52(7): 1-8, 59.
Zhang X N, Xiang Z, Tang C H. A deep convolutional auto-encoding neural network and its application in bearing fault diagnosis[J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2018, 52(7): 1-8, 59.
- [14] 罗仁泽,王瑞杰,张可,等. 残差卷积自编码网络图像去噪方法[J]. 计算机仿真, 2021, 38(5): 455-461.
Luo R Z, Wang R J, Zhang K, et al. Image denoising method of residual convolution auto-encoder network[J]. Computer Simulation, 2021, 38(5): 455-461.
- [15] 雷勇,闫晓剑. 基于深度降噪自编码神经网络的近红外光谱去噪[J]. 自动化技术与应用, 2021, 40(4): 15-18.
Lei Y, Yan X J. Denoising of the near infrared spectral based on deep denoising autoencoder neural network[J]. Techniques of Automation and Applications, 2021, 40(4): 15-18.
- [16] 张绍辉. 基于多路稀疏自编码的轴承状态动态监测[J]. 振动与冲击, 2016, 35(19): 125-131.
Zhang S H. Bearing condition dynamic monitoring based on multi-way sparse autocoder[J]. Journal of Vibration and Shock, 2016, 35(19): 125-131.
- [17] 程钊,赵南京,殷高方,等. 基于多任务卷积神经网络的浮游藻类群落识别方法[J]. 光学学报, 2022, 42(5): 0530002.
Cheng Z, Zhao N J, Yin G F, et al. Identification method of planktonic algae community based on multi-task convolutional neural network[J]. Acta Optica Sinica, 2022, 42(5): 0530002.