

文章编号: 0253-2239(2010)12-3552-06

近红外光谱结合径向基神经网络在云芝菌丝体无损分析中的应用

张益波¹ 何欢¹ 孟庆繁¹ 逯家辉¹ 程瑛琨¹ 滕利荣¹ 李珊山^{2,*}

(¹吉林大学生命科学学院, 吉林 长春 130012; ²吉林大学第一医院生命科学学院, 吉林 长春 130021)

摘要 将近红外光谱(NIRS)与三层径向基神经网络(RBFNN)结合,建立药用真菌云芝中活性成份多糖和蛋白的快速无损分析模型(NIRS-RBFNN)。采用卷积平滑、傅里叶变换、一阶变换、二阶变换、多尺度小波变换和小波包变换对原始光谱进行预处理。对处理后的光谱进行主成份的提取,以前15个主成份得分作为径向基神经网络的输入节点选择范围。对网络相关的参数(输入节点数、中间神经元数、径向基宽度常数)进行了优选。得到了最佳的云芝多糖分析模型的条件为:小波变换6尺度重构光谱,模型参数为WPT-NIRS-RBFNN(7-12-1, 3.2),此时模型的交叉验证方根误差(RMSECV)为0.009897,校正集相关系数 $R_{cv}=0.98357$,此模型对预测集的预测远离方根误差(RMSEP)为0.00909,其相关系数 $R_p=0.98283$;对云芝蛋白的最佳分析模型的条件为:对小波变换6尺度重构光谱,模型参数为WPT-NIRS-RBFNN(12-10-1, 3.0),此时模型的RMSECV为0.005240, $R_{cv}=0.99426$,此模型对预测集的RMSEP为0.00998, $R_p=0.98246$ 。结果表明模型具有很好的稳健性和精确度。对实现药用真菌的无损快速分析有重要的意义。

关键词 近红外光谱;径向基神经网络;云芝;无损分析

中图分类号 O657.33;R927.2 文献标识码 A doi: 10.3788/AOS20103012.3552

Application of Near Infrared Reflectance Spectroscopy-Radial Basis Function Neural Network for Non-Destructive Determination of Coriolus Versicolor

Zhang Yibo¹ He Huan¹ Meng Qingfan¹ Lu Jiahui¹ Cheng Yingkun¹
Teng Lirong¹ Li Shanshan²

(¹College of Life Science, Jilin University, Changchun, Jilin 130012, China
²College of Life Science, First Hospital of Jilin University, Changchun, Jilin, 130021, China)

Abstract A calibration model (NIRS-RBFNN) based on combination of near infrared reflectance spectroscopy and radial basis function neural network (RBFNN) has been proposed for synchronous and rapid non-destructive determination of Coriolus versicolor. Savitzky-Golay smoothing (SGS), fast Fourier transform (FFT), derivative of wavelet transformation (WT) and wavelet packet transformation (WPT) with multi-scale analysis were used to dispose the original NIRS, then principal component analysis (PCA) method is used to obtain the principal components (PC) scores. The anterior 15 PC scores were used as input data. These developed RBFNN have been optimized by selecting suitable parameters of input data, numbers of hidden layer neurons and spread constant through different pretreated spectra of calibration. The optimal quantitative analysis (NIRS-RBFNN) model for polysaccharide and protein of coriolus versicolor; for polysaccharide the optimal model is 6 scales reconstructed spectra of WPT, model parameter is WPT-NIRS-RBFNN(7-12-1, 3.2), and root mean squared error of cross validation(RMSECV) is 0.009897, $R_{cv}=0.98357$; root mean squared error of predictions (RMSEP) is 0.00909; $R_p=0.98283$. For Protein the optimal model is 6 scales reconstructed spectra of WPT, model parameter is WPT-NIRS-RBFNN(12-10-1, 3.0), and RMSECV is 0.00524, $R_{cv}=0.99426$; RMSEP is 0.00998; $R_p=$

收稿日期: 2010-03-22; 收到修改稿日期: 2010-05-05

基金项目: 中国医学基金会新药发展基金(20061108)资助课题。

作者简介: 张益波(1982—),男,博士研究生,主要从事生物技术制药方面的研究。E-mail: zhangyibo1982@gmail.com

导师简介: 滕利荣(1954—),男,教授,博士生导师,主要从事生物技术制药方面的研究。E-mail: tenglr@jlu.edu.cn

* 通信联系人。E-mail: shansalee@163.com

0.98246. These results show that the model has good robustness and precision and NIRS technology is convenient, rapid, no pretreatment and no pollution that this method could be popularized in the in situ measurement and the on-line quality control for coriolus versicolor.

Key words near infrared reflectance spectroscopy; radial basis function neural network; coriolus versicolor; non-destructive determination

1 引言

担子菌杂色云芝菌(*Coriolus versicolor*)也称为杂色云芝,是一种野生名贵的药用真菌。民间常用于治疗气管炎、肝炎、肿瘤和妇科病^[1]等。现代医学研究表明:从云芝子实体、菌丝体中提取的云芝糖肽,有增强正常机体的免疫功能、拮抗动物因负瘤而引起的免疫抑制、抗溃疡活性及抗病毒、抗肝炎活性^[2]等广泛的药理作用。云芝中的蛋白和多糖含量的高低对云芝糖肽和评判云芝的品质的好坏有很重要的影响。现行常用的蛋白测定方法如:凯氏定氮^[3]法和 Folin-酚(Lowry)法^[4]等;多糖常用的测定方法蒽酮硫酸法^[5]和苯酚硫酸法^[6]等,这些方法都存在药材材料损耗大,测定过程复杂,化学试剂消耗量大且分析时间长等缺点。

随着光谱学和计算机的发展,近红外光谱分析技术也得到飞快发展。近红外光谱技术在建立可靠的校正模型的基础上,可直接对样品进行无损检测,具有分析速度快、效率高、成本低和可实现在线检测等优点^[7],近年来在农业、化工、食品和药物分析等方面有着广泛应用^[8~12],在中药材的分类和活性成分分析中还处于起步阶段^[13~17]。然而近红外光谱信息量大,特征信息弱,非特异性强,重叠谱严重,这些特点给近红外光谱分析带来了困难^[18~19],因此使用适当的方法对光谱进行预处理十分重要。

径向基神经网络(RBFNN)具有很强的非线性拟合性能,同时它克服了误差反传网络(BP)的收敛慢、易落入局部极优点和权重调整复杂等缺陷,在定量和定性分析的建模应用中发展很快^[20~23]。本文在对云芝原始近红外光谱进行适当预处理后,结合径向基神经网络建立云芝中蛋白和多糖的定量分析模型,并用所建立的模型对预测集样品进行预测。结果表明:最优模型预测的稳定性和精密度很高,可以替代常规的测定方法,对实现药用真菌的绿色无损分析有重要的意义。

2 实验方法

2.1 实验仪器与软件

日本岛津 UV-3150 型紫外可见近红外分光光度计(带 ISR-3100 积分球附件);BP211D 型十万之

一电子天平(德国赛多利斯);玛瑙研钵;全自动凯氏定氮仪 2300(BUCHI);联想家悦 E3030 微型计算机;752 分光光度计(上海分析仪器总厂)。

实验中对光谱的数据预处理包括平滑处理(SGS)、快速傅里叶变换处理(FFT),导数算法处理(Derivative)涉及的软件为 Origin7.0;光谱小波变换(WT)和小波包变换(WPT)处理过程、主成份的提取、径向基神经网络的建模和优选过程使用 Matlab 7.0 来实现。

2.2 样品的制备

从云芝的发酵实验中获得 51 个不同批次的云芝菌丝体,各个批次分别冻干后研磨成粉,过 40 目(0.63 mm)筛,备用。使用蒽酮硫酸法测定样品总糖的含量,同时使用 DNS 法测定还原糖的含量,计算样品中的多糖含量,样品蛋白含量使用凯氏定氮法进行测定。

2.3 光谱的测量

应用岛津 UV-3150 型紫外可见近红外分光光度计,使用 ISR-3100 积分球附件,波长扫描范围为 800~2500 nm,狭缝设置为 12 nm,以 BaSO₄ 标准品为空白对 51 个样本进行漫反射光谱扫描,每个样品扫描 3 次光谱取其平均值为样品光谱。

2.4 模型的性能参数

采用留一交互验证法(LOO)。评价模型的稳定性的参数为交互验证均方根误差(RMSECV)表示为

$$T_{\text{RMSECV}} = \sqrt{\frac{\sum_{i=n}^n (C_{\text{Nic}} - C_{\text{Ric}})^2}{n}}, \quad (1)$$

式中 n 为用于建模的样品数, C_{Nic} 和 C_{Ric} 分别为用模型建立样本的 LOO 含量和真实含量。

当模型建立以后,以模型对预测集的 RMSEP 为参数优化模型的预测性能。预测均方根误差可表示为

$$T_{\text{RMSEP}} = \sqrt{\frac{\sum_{i=n}^n (C_{\text{Ni}} - C_{\text{Ri}})^2}{m}}, \quad (2)$$

式中 m 为用于建模的样品数; C_{Ni} 和 C_{Ri} 分别为用模型预测的样品含量和测定样品的真实含量。 T_{RMSECV} 和校正集的相关系数 R_{cv} 用来优化模型, T_{RMSEP} 和预

测集的相关系数 R_p 用来对模型的预测性能进行检验^[24,25]。

3 结果与讨论

3.1 云芝样品活性成分含量测定的结果

样品蛋白采用全自动凯氏定氮仪测定^[3],多糖采用蒽酮硫酸法^[5]测定总糖减去 DNS 法测定还原糖的方法,表 1 为 51 个批次云芝样品中蛋白和多糖测定值的统计结果。

表 1 Coriolus Versicolor 样品活性成分的统计学分析
Table 1 Statistical analysis of active content of coriolus versicolor samples

Components	Samples numbers	Max / %	Min / %	Average / %
Protein	51	28.408	15.507	21.899
Polysaccharide	51	20.094	5.483	12.387

由表 1 可以看出,所集样品各组分含量的范围较大,云芝蛋白含量的最大值和最小值分别为 28.408% 和 15.507%,51 个样品的平均值为 21.899%;云芝多糖含量的最大最小值分别为 20.094% 和 5.483%,51 个样品的平均值为 12.387%。基本上包含了云芝活性成分含量的跨度范围,样本具有合理的代表性。

3.2 云芝样品的近红外光谱图

图 1 为 51 个云芝菌粉在 800~2500 nm 波段的扫描光谱,从图中可以看出光谱具有很好的代表性,在近红外波段光谱含有多个吸收峰,为建模的定量分析提供了丰富的信息。

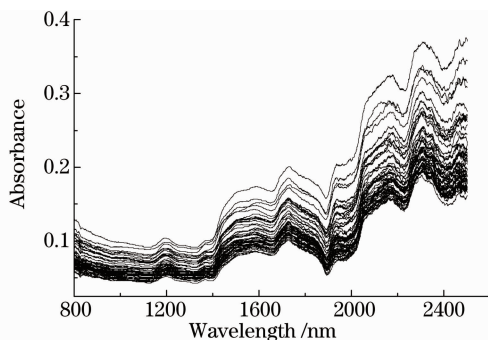


图 1 51 个样品的原始近红外光谱

Fig. 1 Original NIRS spectra of 51 samples

3.3 云芝活性成分分析近红外光谱径向神经网络模型的建立

为了克服近红外光谱信息量大、非特异性吸收强和重叠峰严重等缺点,实验中对云芝的近红外光谱进行了窗口为 50 个点的,包括平滑、快速傅里叶变换、一阶导数和二阶导数的算法以及不同尺度(Scale:3~8)的小波变换和小波包变换处理过程。为了进一步

结合径向神经网络建立模型,在不减少光谱信息的基础上提高径向基网络的计算速度和建模的效率,采用三层径向基神经网络,对活性成份的蛋白和多糖分别建立模型,对处理后的光谱进行了主成份的提取,以光谱的主成份作为径向基神经网络的输入节点,进而探讨径向基神经网络模型中的径向基隐含层神经元数和径向基网络的宽度常数(SC),得到云芝活性成份的近红外光谱径向基神经网络模型。径向基神经网络模型参数表示方法为:输入节点数,中间神经元数,输出节点数和径向基宽度常数。

3.3.1 光谱的主成份提取

使用 Matlab7.0 软件中的 Princomp 对光谱进行主成份提取,前 20 个主成份得分对光谱的贡献率中前三个主成份的贡献率分别为 95.665%,3.512%,0.403%,累计达 99.580%,前 15 个主成份的累计到达了 99.947%,基本上代表了原始光谱的主要有效信息,为了节约建模的计算时间实验中使用前 15 个主成份得分代替原始光谱作为探讨径向基神经网络模型的输入节点是合理可行的。

3.3.2 异常样本的剔除

为了检验用于建模样本的可信性,需要对建模数据库中的异常样本进行剔除,实验初期选择网络模型为(8-5-1,1.2),应用 LOO 对所有样本进行检验,检查异常样本。

图 2 给出了云芝活性成分模型分析中的多糖和蛋白含量的 LOO 分析误差绝对值柱状图。

从图 2 中可以看出水平黑线表示在此模型预测下的平均误差绝对值的 3 倍。多糖含量分析的误差绝对值的 3 倍为 0.04294;7,14,44 号样本的误差绝对值分别为 0.05391,0.0457,0.05168;均大于平均误差绝对值的 3 倍;同样的结果在蛋白含量的预测和测定值中也存在,故认为云芝的 7,14,44 号样本为奇异样本,为了不影响建模的准确度和精确性应该剔除这 3 个样本,建模样本剩下 48 个。

3.3.3 云芝样本建模校正集和预测集的分布情况

图 3 为预测集样本和校正集样本第一和第二主成份空间分布作图,由图 3 可以看出,12 个预测集的点均匀分布在 36 个校正集的点之中,校正集和预测集样本的空间分布合理表明实验中校正集和预测集样本的分配合理。

3.3.4 最佳模型的建立

对使用 36 个校正集样品进行径向基模型的建立,各个模型的径向基神经网络参数(输入节点、中间神经元数和径向基宽度常数)进行了优选。表 2

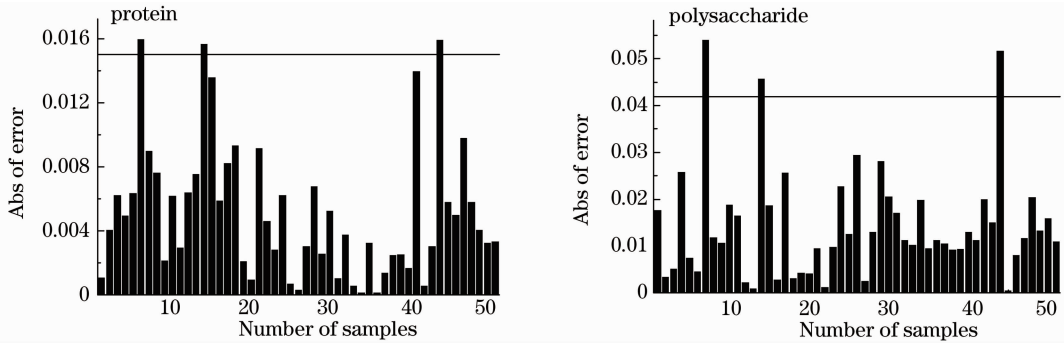


图 2 所有样本蛋白和多糖含量的交互验证的真值和预测值的误差绝对值

Fig. 2 Abs of error between actual values and NIRS predicted values obtained by cross-validation from all samples

表 2 不同的光谱预处理方法构建的 RBFNN 模型的结果比较

Table 2 Results of the RBFNN models which was constructed by different pretreated spectra

Components	Method	Numbers of input data	Numbers of hidden layer neurons	SC	RMSECV	R_{cv}	
Protein	Origin	11	17	3.0	0.006816	0.98252	
	SGS	12	15	3.0	0.006082	0.98647	
	FFT	11	16	2.8	0.006701	0.98286	
	1st Derivative	12	5	1.8	0.009449	0.9666	
	2nd Derivative	15	17	1.2	0.025644	0.74292	
	3	11	12	3.2	0.006654	0.98543	
	4	10	17	3.4	0.006371	0.98889	
	The scale of WT	5	10	2.8	0.006081	0.99053	
	6	12	10	3.0	0.005320	0.99228	
	7	14	18	3.0	0.009616	0.96422	
	8	9	8	3.6	0.013603	0.92843	
	3	11	12	3.2	0.006554	0.987401	
	4	10	17	3.4	0.006275	0.99086	
	The scale of WPT	5	10	2.8	0.005989	0.99251	
	6	12	10	3.0	0.005240	0.99426	
	7	10	16	3.0	0.009244	0.96624	
8	8	11	3.6	0.012358	0.94008		
Polysaccharide	Origin	9	12	3.4	0.012165	0.95216	
	SGS	5	10	3.0	0.011619	0.95732	
	FFT	8	12	3.2	0.011310	0.96907	
	1st Derivative	7	5	1.2	0.014603	0.93185	
	2nd Derivative	6	5	2.5	0.036495	0.44933	
	3	9	11	3.4	0.012008	0.95391	
	4	9	11	2.6	0.011994	0.95402	
	The scale of WT	5	9	12	3.0	0.011435	0.95826
	6	7	12	3.2	0.010202	0.97384	
	7	5	11	3.4	0.013527	0.94110	
	8	9	17	3.0	0.016913	0.90868	
	3	9	11	3.4	0.0117678	0.96344	
	4	9	11	2.6	0.0117541	0.96356	
	The scale of WPT	5	9	12	3.0	0.0112063	0.967843
	6	7	12	3.2	0.009897	0.98357	
	7	13	17	3.4	0.013111	0.94627	
8	9	13	2.6	0.015508	0.92296		

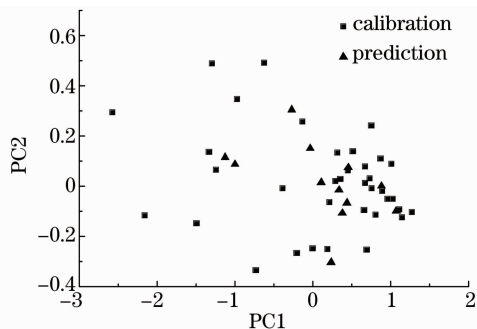


图3 样品第一和第二主成份的分布

Fig. 3 Score plot of first and second components

给出的是光谱不同预处理方法(卷积平滑、傅里叶变换、一阶变换、二阶变换、不同尺度小波变换和小波包变换)处理后的云芝近红外光谱建立的 NIRS-RBFNN 模型经过优选后的结果。

从表 2 中可以看出,对云芝蛋白含量分析 NIRS-RBFNN 模型的结果表明卷积平滑和傅里叶变换的光谱同样表现出了一定的优势,SGS 光谱当模型参数为(12-15-1,3.0),对云芝蛋白的含量分析模型的 $T_{\text{RMSECV}}=0.006082$, $R_{\text{cv}}=0.98647$ 。一阶变换和二阶变换建模的结果不比原始光谱更有优势,可能是数据处理的过程中光谱的信息也被消除了。对云芝多糖的含量建立模型的结果表明卷积平滑和傅里叶变换的光谱表现出了一定的优势,FFT 光谱分析模型建立结果中模型的 $T_{\text{RMSECV}}=0.011310$, $R_{\text{cv}}=0.96907$ 。分析近红外光谱经小波变换和小波包变换后的重构光谱对云芝蛋白分析的建模,结果中可以看出当分解尺度从 3 到 6 时,校正模型的结果变好, T_{RMSECV} 从 0.006654 减小到 0.005320;校正集的相关系数 R_{cv} 从 0.98543 增加到 0.99228。但是当小波变换的分解尺度从 6 再加大时, T_{RMSECV} 变大,同时校正集的相关系数也相应的减少。在小波变换和小波包的分解光谱在云芝多糖分析建模中出现了同样的效果,当取得分解尺度为 6 时,建模效果最好。表明多尺度分析的小波变换和小波包变换在近红外光谱的去噪分析中,存在合适的尺度可以对原始光谱进行信噪比的最大提取。提取尺度较小时虽然能够消除部分噪音提高信噪比,但是建立的模型不能达到最优;提取尺度过大时,光谱的有用信息也遭到了破坏。云芝多糖和蛋白的含量测定校正模型均以小波包分解的 6 尺度重构光谱为最好。得到的对云芝多糖的最优分析模型为 WPT-NIRS-RBFNN(7-12-1,3.2),此时模型的 $T_{\text{RMSECV}}=0.009897$,模型的校正集相关系数 $R_{\text{cv}}=0.98357$;对云芝蛋白含量分析的最优的模型为 WPT-NIRS-

RBFNN(12-10-1,3.0),此时模型的 $T_{\text{RMSECV}}=0.005240$,模型的校正集相关系数 $R_{\text{cv}}=0.99426$ 。

3.3.5 最佳云芝蛋白多糖分析模型的外部检验

使用预测集的 12 个云芝样本进对建立的最佳模型进行检验,结果如表 3 所示。

表 3 最优 RBFNN 模型的预测结果

Table 3 Predicted results of the optimal NIRS-RBFNN

Components	Model (Parameters)	RMSEP	R_p
Protein	WPT-NIRS-RBFNN (12-10-1,3.0)	0.00998	0.98246
Polysaccharide	WPT-NIRS-RBFNN (7-12-1,3.2)	0.00909	0.98283

在最优的 WPT-NIRS-RBFNN 模型中,对多糖的预测集预测中最优模型的 T_{RMSEP} 和 R_p 分别为 0.00909 和 0.98283;对蛋白的预测集预测分析中,模型的 T_{RMSEP} 和 R_p 分别为 0.00998 和 0.98246。

3.3.6 最佳模型的重现性实验

随机选取校正集中的样品,按 1.3 所述方法在不同时间扫描其 NIRS 光谱 10 次,并应用所建的最佳模型对样品中蛋白和多糖含量进行预测,10 次扫描结果所得的相对标准偏差(RSD)值分别是蛋白为 0.125%、多糖为 0.216%。由此可见,该方法具有良好的重现性。

3.3.7 最佳模型的回收率实验

对预测集的 12 个样品分别利用最优的模型进行云芝蛋白和多糖含量的分析,得到最佳的模型计算结果,并与真实的含量比较,计算回收率,结果表明预测模型对预测集的蛋白和多糖样品的平均回收率分别为 101.0865% 和 101.6038%。结果表明应用 WPT-NIRS-RBFNN 所建的最佳模型分别预测云芝多糖和蛋白含量其误差较小,平均回收率接近 100%。

4 结 论

以药用真菌云芝的活性成分蛋白和多糖为研究对象,采用卷积平滑,傅里叶变换、一阶变换、二阶变换、不同尺度小波变换和小波包变换对光谱进行预处理。并对处理后的光谱进行了主成份的提取,结合径向神经网络的参数优选,完成了云芝的活性成分蛋白和多糖近红外光谱定量分析模型的建立。实验中小波包变换的 6 尺度分析建立云芝蛋白和多糖的近红外光谱径向基分析模型达到最佳。对模型

的径向基神经网络参数进行了优选,得到最佳模型。最佳模型对预测集研究的预测均方根误差 T_{RMSEP} 和预测集相关系数 R_p 表明,最佳近红外光谱径向基神经网络模型具有较强的预测性能,完全满足常规药用真菌云芝分析的精度。重现性和回收率实验结果为此模型的进一步扩展和替代常规方法的应用,实现药用真菌的绿色、无损和快速分析具有重要的意义。

参 考 文 献

- 1 S. C. Jong, Richard don vick; anttumour and antiviral substances form fungi [J]. *Advances in Applied Microbiology*, 1989, **34**: 183~262
- 2 Luan Xiaofeng. Economic Fungi of China[M]. Beijing: Sciences press, 1998. 56~78
卯晓岚. 中国经济真菌[M]. 北京: 科学出版社, 1998. 56~78
- 3 Boyer, Rodney F. Modern experimental biochemistry [M]. Beijing: Sciences Press, 1986. 55~59
- 4 T. K. Ghose. Measurement of cellulase activities [J]. *Pure Appl. Chem.*, 1996, **59**: 257~268
- 5 G. Ashwell. Methods in enzymology[M]. New York: Academic Press, 1957, **3**: 87~95
- 6 M. Dubis *et al.*. Colorimetric method for determination of sugar and related substances[J]. *Anal. Chem.*, 1956, **28**: 350~365
- 7 McClure W. Review; 204 years of near infrared technology; 1800-2003[J]. *Near Infrared Spectroscopy*, 2003, **11** (6): 487~518
- 8 Lu Jiahui, Zhang Yibo, Zhang Zhuoyong *et al.*. Application of wavelet transform-radial basis function neural network in NIRS for determination of rifampicin and isoniazide tablets [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2008, **28**(6): 1264~1268
逯家辉, 张益波, 张卓勇等. 小波变换近红外光谱结合径向基神经网络快速分析异福片[J]. *光谱学与光谱分析*, 2008, **28**(6): 1264~1268
- 9 Chen Quansheng, Zhao Jiewen, Zhang Haidong *et al.*. Identification of authenticity of tea with near infrared spectroscopy based on support vector machine[J]. *Acta Optica Sinica*, 2006, **26**(6): 933~937
陈全胜, 赵杰文, 张海东等. 基于支持向量机的近红外光谱鉴别茶叶的真伪[J]. *光学学报*, 2006, **26**(6): 933~937
- 10 A. Espinosa-Mansilla, M. Valenzuela. de la Pena AM *et al.*. Comparative study of partial least squares and a modification of hybrid linear analysis calibration in the simultaneous spectrophotometric determination of rifampicin, pyrazinamide and isoniazid[J]. *Anal. Chim. Acta*, 2001, **427**: 129~136
- 11 Rao Zhenhong, Li Minzan, Ji Haiyan. Simultaneous determination of glucose, fructose and sucrose in aqueous solution by short-wavelength near infrared spectroscopy[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2006, **26**(4): 633~646
饶震红, 李民赞, 吉海彦. 短波近红外光谱法同时定量分析水溶液中葡萄糖、果糖和蔗糖[J]. *光谱学与光谱分析*, 2006, **26**(4): 633~646
- 12 Jiahui Lu, Weiliang Guo, Yibo Zhang *et al.*. Application of principal component analysis-artificial neural network in near infrared spectroscopy for determination of compound rifampicin tablets[J]. *ICNC*, 2007, **3**: 262~267
- 13 Ma Shumin, Liu Sidong, Zhang Zhuoyong. Identification of official rhubarb samples based on IR spectra and temperature constrained cascade-correlation networks[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2005, **25**(6): 874~883
- 马书民, 刘思东, 张卓勇. 温度限制串联相关网络-红外光谱法用于中药大黄样品的鉴定分类[J]. *光谱学与光谱分析*, 2005, **25**(6): 874~883
- 14 Wang Di, Zhang Aili, Meng Qingfan *et al.*. Application of near infrared spectroscopy on rapid determination of essential components for cordyceps militaris[J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(10): 2795~2799
王迪, 张媛莉, 孟庆繁等. 近红外光谱在快速测定蛹虫草有效成分含量中的应用[J]. *光学学报*, 2009, **29**(10): 2795~2799
- 15 Qi Feng, Liu Wenqing, Zhou Bin *et al.*. Improving DOAS system measurement precision with artificial neural network method[J]. *Acta Optica Sinica*, 2002, **22**(11): 1345~1349
齐锋, 刘文清, 周斌等. 利用人工神经网络方法提高差分光学吸收光谱系统测量精度研究[J]. *光学学报*, 2002, **22**(11): 1345~1349
- 16 Zhang Haihong, Zhang Shujuan, Wang Fenghua *et al.*. Study on fast discrimination of seabuckthorn juice varieties using visible-nir spectroscopy[J]. *Acta Optica Sinica*, 2010, **30**(2): 574~578
张海红, 张淑娟, 王凤花等. 应用可见-近红外光谱快速识别沙棘汁品牌[J]. *光学学报*, 2010, **30**(2): 574~578
- 17 Li Xiang, Zhang Guangjun, Li Qingbo. An improved wavelet analysis preprocessing method applied to mid-IR blood glucose non-invasive measurement[J]. *Acta Optica Sinica*, 2010, **30**(2): 580~584
李响, 张广军, 李庆波. 一种血糖红外无创检测的改进小波预处理方法[J]. *光学学报*, 2010, **30**(2): 580~584
- 18 Meng Qingfan, Zhang Yibo, Lu Jiahui *et al.*. Application of wavelet transform-radial basis function neural network in NIRS for determination of rifampicin and isoniazide tablets[J]. *Chin. Pharm. J.*, 2007, **42**(4): 304~319
孟庆繁, 张益波, 逯家辉等. 小波变换近红外光谱结合径向基神经网络快速分析异福片[J]. *中国药理学杂志*, 2007, **42**(4): 304~319
- 19 Qu Haibin, Liu Quan, Cheng Yiyu. Determination of the coptis extract alkaloids using near-infrared diffuse reflectance spectroscopy[J]. *Chinese J. Anal. Chem.*, 2004, **32** (4): 477~489
瞿海斌, 刘全, 程翼宇. 近红外漫反射光谱法测定黄连浸膏粉中生物碱含量[J]. *分析化学*, 2004, **32**(4): 477~489
- 20 Y. Dou, Y. Ren, L. Teng *et al.*. Nondestruction quantitative analysis of cimetidine tablets using artificial neural networks in near-infrared spectroscopy [J]. *Spectrosc. Lett.*, 2005, **38**: 1~11
- 21 M. J. D. Powell, J. C. Mason, M. G. Cox. Algorithms for Approximation[M]. Oxford University Press, Oxford, England, 1987. 143~156
- 22 E. P. P. A. Derks, M. S. Sanchez Pastor, L. M. C. Buydens. Chemom[M]. Intell. Lab. Syst. 1995, **28**: 49~58
- 23 Huang Guangqun, Han Lujia. Near infrared reflectance spectroscopy analysis of compost products using nonlinear support vector machine with RBF nucleus[J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(12): 3556~3560
黄光群, 韩鲁佳. 基于非线性径向基核函数支持向量机的堆肥产品近红外光谱分析[J]. *光学学报*, 2009, **29**(12): 3556~3560
- 24 M. Blanco, J. Coello, H. Iturriaga. NIR calibration in nonlinear systems: different PLS approaches and artificial neural networks[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2000, **50**: 75~98
- 25 Yin Jianzhong, Xiu Zhilong, Bi Mingshu *et al.*. Simulations for supercritical fluid extraction by use of artificial neural networks [J]. *J. Chem. Engng. of Chin. Univ.*, 2002, **16**(6): 691~695
银建中, 修志龙, 毕明树等. “人工神经网络”方法用于超临界流体萃取模拟[J]. *高校化学工程学报*, 2002, **16**(6): 691~695