

文章编号: 1672-8785(2012)08-0009-07

人工神经网络在近红外光谱建模中的应用及研究现状

王圣毫 李 智 郑维平 张 旭 高学伟

(沈阳工程学院仿真中心, 辽宁沈阳 110136)

摘 要: 对国内外近十年来人工神经网络在近红外光谱建模中的应用和研究进行了详细的综述, 包括误差反向传播网络、径向基网络、支持向量机、自组织特征映射网、广义回归神经网络、概率神经网络、小波神经网络、模糊神经网络以及集成神经网络等的应用和研究。概括了这些网络的基本工作原理及优缺点。最后根据神经网络的发展方向和工农业的发展需求, 提出了今后人工神经网络在近红外建模方面的发展方向。

关键词: 近红外光谱; 误差反向传播网络; 径向基网络; 支持向量机; 自组织特征映射网; 广义回归神经网络; 概率神经网络; 小波神经网络; 模糊神经网络; 集成神经网络

中图分类号: O6-1 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3969/j.issn.1672-8785.2012.08.002

Research and Application of ANN Method in Near Infrared Spectrum Modeling

WANG Sheng-hao, LI Zhi, ZHENG Wei-ping, ZHANG Xu, GAO Xue-wei

(Center of Simulation, Shenyang Institute of Engineering, Shenyang 110136, China)

Abstract: The research and application of Artificial Neural Network (ANN) in the modeling of near infrared spectrum at home and abroad in recent years are overviewed. The ANN includes back-propagation network, radial-basis function network, support vector machine, self-organizing feature mapping, generalized regression neural network, probabilistic neural network, wavelet neural network, fuzzy network and neural network ensemble etc.. The basic operation principles, advantages and disadvantages of these networks are summarized. Finally, the trend of ANN in near infrared spectrum modeling in the future is proposed according to the development of ANN and the demands in industry and agriculture.

Key words: near infrared spectrum; BP network; RBF network; SVM; SOMF network; GRNN; PNN; Wavelet network; Fuzzy network; neural network ensemble

0 引言

20 世纪 80 年代后期, 随着化学计量学方法的不断应用, 近红外 (Near Infrared, NIR) 分析技术迅速发展成一门独立分析技术。该技术具有测试速度快、效率高、分析成本低、易于实现在线分析以及对样品无损等优点, 因而已被快速

普及于农产品、饲料、饮料、药物和石油化工等领域^[1-2]。

但是在实际工作中, 由于被测物质的复杂性, 特别是样品的含量范围较大、样品各组分相互作用以及仪器的噪声或基线漂移等原因, 近红外吸收光谱参数与样品的含量化学测定值之

收稿日期: 2012-05-17

作者简介: 王圣毫 (1981-), 男, 河南郑州人, 助理工程师, 硕士, 主要研究方向为自动化装置与智能仪器仪表。

E-mail: wangyiwzzy@sina.com

间会呈现明显的非线性。以往在建立复杂物质的近红外模型时,人们通常采用非线性偏最小二乘法(Non-linear Partial Least Squares, NPLS)和局部权重回归法(Locally Weighted Regression, LWR)等方法。但是其效果不佳,分析步骤繁琐,所以这些方法逐渐被人们所淡忘。目前,比较适合解决这类问题的方法是人工神经网络(Artificial Neural Network, ANN),它具有自学习、自组织、自适应、强容错性、分布存储、并行计算以及非线性表达能力非常强等特点^[3]。近年来,我国众多研究人员在此方面开展了大量的工作,使人工神经网络在近红外分析技术中得到了长足发展,并使近红外人工智能分析方法日臻完善。本文对国内外近十年来人工神经网络在近红外分析技术中的研究与应用进行较为详细的综述,并根据当前人工神经网络的发展趋势,提出今后近红外分析技术的发展方向。

1 人工神经网络在近红外分析技术中的应用现状

1.1 BP 网络

多层感知器引入误差反向传播算法后就构成了反向传播(Back-Propagation Network, BP)网络。Kolmogorov 定理指出,一个三层前向神经网络只要隐含层含有足够多的神经元个数,就可以完成任意的 n 维到 m 维的映射。这是目前在近红外分析技术中应用最为广泛且最成熟的一

种人工神经网络。特别是当 BP 网络采用一些有效的改进算法后,比如增加动量项,自适应调节学习率,引入陡度因子、拟牛顿法、共轭梯度法、LM 法、动态规划法、遗传混沌算法和模拟退火算法,其学习效率低、收敛速度慢以及容易陷入局部极小点等缺陷即可得到一定程度的改善^[3]。

基于 BP 网络的近红外分析技术可以将原始光谱的数据^[5]、傅里叶变换的系数^[6-7]和小波变换的系数^[8]作为网络的输入,或者采用离散余弦变换^[9],但人们大多通过 PCA^[10]和 PLS^[11]等手段将存在严重多重共线性的近红外光谱数据降维之后的数据作为网络的输入。另外,也有研究人员提出利用基于独立组分分析^[12]或 BP 网络压缩技术^[13]实现数据降维,然后根据输入和输出变量个数来适当调整隐层神经元个数,最后经过校正集的训练进而实现预测未知样本的能力。此外,结合遗传算法的 BP 网络也是一条有效的建模途径^[14]。其中,遗传算法被用于优化 BP 网络的权值或阈值^[15-16],提取特征波长^[17]或者优化网络结构。表 1 列出了 BP 网络在近红外分析中的典型应用。

1.2 RBF 网络

径向基网络(Radial Basis Function, RBF)属于局部逼近网络。人们已经证明,利用基于正则化理论的 RBF 网络得到的解具有最佳逼近性(

表 1 BP 网络在近红外分析中的应用

分析项目	网络输入数据的预处理方法
大豆脂肪酸	原始光谱数据 ^[5]
小麦和汽油等	PCA ^[7]
杉木棕纤维素和木质素等	SGM、SGD1、WT ^[8]
玉米成分和淀粉等	DCT ^[9]
乙醇和生物柴油	PCA、MC、OSC、SGD1/SGD2 ^[10]
三水合氨苄青霉素	PCA、SNV ^[14]

* 其中, PCA 是指 PCA 数据压缩, SGM 是指 Savitzky-Golay 平滑滤波, SGD1 是指 Savitzky-Golay 一阶导数, WT 是指小波数据压缩, DCT 是指离散余弦变换, MC 是指均值中心化, OSC 是指正交信号校正, SGD2 是指 Savitzky-Golay 二阶导数, SNV 是指标准正态变量变换。下文不再对此进行说明。

同时满足样本逼近误差和逼近曲线平滑性)。与 BP 网络相类似, RBF 网络在近红外分析中也经常采用 PCA^[18] 和 PLS 提取的主成分, 或者小波压缩后^[19] 的光谱数据作为其输入变量。另外, 李智等人以 FFT 变换的系数作为网络的输入时也取得了良好的拟合效果^[20]。但是 RBF 网络的隐层节点数和扩展常数 (spread) 的设置却是该网络应用中最为复杂的地方。目前, 绝大多数

研究都以尝试法对其进行遴选, 比如 spread 可以某一确定步长从 1 取到 10, 隐层节点也可以一定步长从 1 个取到最大样本点。文献 [19] 提出先大致估计一个较宽的范围, 然后从低到高逐渐增加隐层节点数, 直至网络收敛, 可得到最优解。表 2 列出了 RBF 网络在近红外分析中的典型应用。

表 2 RBF 网络在近红外分析中的应用

分析的项目及模型性能	网络输入数据的预处理方法
土壤有机质	SGM、SGD1、PCA ^[18]
汽油、煤炭	FFT、SGM、MSC、SGD1 ^[20]

1.3 支持向量机

Vapnik 提出的支持向量机 (Support Vector Machine, SVM) 是一种通用的前馈神经网络, 其思想在于建立一个最优决策超平面, 使得该平面两侧距离平面最近的两类样本的直接距离最大化, 从而提供良好的泛化能力。这种网络不依赖于设计者的经验知识, 而且其最终得到的是全局最优解, 不会出现过学习现象; 特别是基于循环迭代的思想 (Vapnik 的块算法、Qsuna 的分解算法和 Platt 的 SMO 算法) 被提出后, 其训练速度得到了一定改善。于是支持向量机在近红外分析应用中得到了迅速发展, 近年来国际上在复杂物质的模式识别和定量分析方面已发表了大量研究报告。

设计 SVM 的难点在于误差精度 ε 、正则化系数 C 、径向基核函数的宽度 σ 以及核函数的

选择。对于 C 和 σ , 一般采用格点搜索法 (只要能够确定正确的参数取值区间, 通过在该区间内不断进行试算, 最终就可以找到该区间内接近真实值的参数似然值), 即固定其中一个, 在规定的范围内遍历剩余的另一个变量。文献 [21] 结合粒子群算法 (PSO) 对参数 C 和 σ 进行了优化, 并且得到了比较满意的研究成果。SVM 的训练样本可以采用无信息变量消去法 (Uninformative Variable Elimination, UVE) 选择的波长, 也可以采用由 PCA^[22] 或 PLS^[23] 提取的主成分, 或者是通过独立成分分析 (ICA) 提取的光谱特征^[24]。文献 [25] 专门针对该方法的参数优化问题进行了系统的研究。表 3 列出了 SVM 在近红外分析中的典型应用成果。

表 3 SVM 网络在近红外分析中的应用

分析的项目及模型性能	网络输入数据的预处理方法
烟草还原糖和总糖等	SGM、MF、UVE、PSO ^[21]
火炬松的木材性质	PCA、SNV、SGD1、SGD2、MSC ^[22]
醇烯比定量分析	sd、PLS ^[23]
肉样品中水分和脂肪等	ICA ^[24]

* 其中, MF 是指均值滤波, UVE 是指无信息变量消去法。下文不再对此进行说明。

1.4 自组织特征映射网络

自组织特征映射 (Self-Organizing Feature Mapping, SOFM) 网络是根据人脑自组织特征设计而成的。人们可采用 Kohonen 算法对其连接权进行调整, 但训练样本一定要充足, 这样才能使得输出层神经元成为特定模式类敏感的神经细胞。对应的内星权成为输入模式类的中心向量, 而且当两个输入模式特征比较接近时, 两类神经元在位置上也接近。特别的是, 当输入模式不属于网络训练时的任何模式时, 网络将其归入最接近的模式类。

近红外建模时, SOFM 网络的输入变量一般采用原始光谱^[26]或 PCA^[27]、PLS 压缩光谱, 输出层被设计成二维平面阵。其中, 平面阵中神经元个数的选择原则是, 神经元个数不少于训练集样本模式的数量 (然而神经元个数过多将会导致两种不良后果, 要么样本分类过细, 要么出现过多的死神经^[31])。当某些样本集中于高维空间的某个区域时, 最好把权向量初始化位置置于样本群中, 否则训练的结果很可能聚为一类。SOFM 网络大多用于聚类分析, 也有文献巧妙地通过对网络二维拓扑平面图上的每一个

神经元定量标定来实现定量分析的目的^[26], 其得到的内燃机机油粘度指数模型为 $R=0.978$ 。刘雪松等人研究了基于自组织映射神经网络的中药注射剂质量快速鉴别方法, 其效果令人满意^[27]。Emilio Marengo 利用 SOFM 网络选择训练集样本, 然后使用 BP 网络成功实现了羟基数和酸度的建模^[28]。

1.5 广义回归神经网络

广义回归神经网络 (Generalized Regression Neural Network, GRNN) 是一种径向基网络, 具有很强的非线性映射能力和柔性网络结构。它在逼近能力和学习速度上较 RBF 网络更具优势, 甚至在样本数较少或者样本数据不稳定时也能得到相对较好的结果。GRNN 网络的结构包括输入层、模式层、求和层和输出层。

设计 GRNN 网络时仅需调整光滑因子 σ (这个特征可以最大程度地避免设计者的主观假定对结果的影响)。当 σ 非常大时, 网络的估计值 $\hat{Y}(X)$ 接近于所有样本的均值; 反之, 将会非常接近于训练样本, 从而失去泛化能力。但是, 目前其选择方法仅为尝试法。表 4 列出了 GRNN 网络在近红外分析中的典型应用。

表 4 GRNN 网络在近红外分析中的应用

分析的项目及模型性能	网络输入数据的预处理方法
樱桃糖度	小波变换 ^[29]
发动机润滑油粘度与含水率的预测	直接输入 ^[30]
近红外光谱舌诊的识别模型	PCA ^[31]

1.6 概率神经网络

概率神经网络 (Probabilistic Neural Network, PNN) 也是由径向基网络发展而来的一种前馈神经网络, 其结构类似于 GRNN 网络。该网络的理论基础为贝叶斯最小风险准则, 非常适合于模式识别。与 BP 网络相比, 它具有以下优点: (1) 过程简单, 收敛速度快; (2) 总收敛于 Bayes 优化结, 稳定性高; (3) 样本追加能力强, 可容忍个别错误样本。

在用 PNN 进行近红外聚类分析时, Spread

值大小的选择至关重要。当 Spread 值较大时, 可以构成对几个训练样本的临近分类器; 反之, 则可构成最邻分类器。Roman M B 在研究汽油分类时应用了这种网络, 其识别率为 100 %^[32]。

1.7 小波神经网络

小波神经网络 (Wavelet Neural Network, WNN) 是以 BP 网络拓扑结构为基础的, 其权值修正算法也是 BP 算法。它的隐层节点的传递函数为小波基函数, 如 Morlet wavelet、Mexican wavelet、Symlets 和 Meyer 等。这种网络设计的

难点也是对隐层神经元个数的确定。若个数太少, 不足以表达隐含规律; 反之则会增加训练时间, 从而产生过拟合现象。在目前的应用中人们大都采用尝试法。小波神经网络的输入层神经元个数通常也是由 PCA 或 PLS 提取的主成分个数决定的^[33-34]。例如, Roman M B 在研究汽油品质时, 对其密度、苯含量和乙醇含量分别构建了 16-5-1、14-3-1 和 10-3-1 的 WNN 网络, 其拟合效果远远高于一般的 BP 网络^[34]。

1.8 模糊神经网络

模糊神经网络 (Fuzzy Neural Network, FNN) 擅长解决边界比较模糊的模式识别问题, 也是一种前向神经网络。它的输入层与输入向量 x_i 连接, 模糊化层采用式 (1) 对输入值进行模糊化后得到模糊隶属度值 $u_{A_j^i}$, c_j^i 和 b_j^i 为隶属度函数的中心和宽度; 模糊计算层采用式 (2) 计算得到 ω ; 输出层采用式 (3) 得到网络的输出。

$$u_{A_j^i} = \exp[-(x_j - c_j^i)^2 / b_j^i], j = 1, 2, \dots, k; i = 1, 2, \dots, n \quad (1)$$

$$\omega^i = u_{A_1^i}(x_1) \times u_{A_2^i} \times \dots \times u_{A_k^i}(x_k), i = 1, 2, \dots, n \quad (2)$$

$$y_i = \sum_{j=1}^n \omega^j (p_0^i + p_1^i x_1 + \dots + p_k^i x_k) / \sum_{j=1}^n \omega^j \quad (3)$$

文献 [35] 采用由 PCA 提取的主成分实现了对中药药品质量的快速分类, 其预测识别率为 94.2%, 该结果令人满意。

1.9 集成神经网络

针对现实工作中神经网络类型选择困难及其泛化能力有时相对较低的问题, Hansen 提出了神经网络集成 (Neural Network Ensemble, NNE)。其构建思路是, 首先训练一组神经网络, 然后通过以某种方式对这些网络进行组合来形成集成网络。假设集成网络的输入向量为 x , 那么该网络的输出为

$$\bar{h}(x) = g[\alpha_t, h_t(x, y)], t = 1, \dots, T \quad (4)$$

式中, $h_t(x, y)$ 为某个神经网络 t 的输出, α_t 为神经网络 t 的权重, g 为个体神经网络的结合方式。

文献 [36] 使用小波变换后, 通过对原始光谱数据进行滤波和压缩处理并将其输入到相应的集成网络中, 成功解决了对火药质量参数的检测问题。该技术明显优于 PLS 和单个 ANN 方式, 其选用的算法流程如下:

(1) 求集合 $H\{h_1, h_2, \dots, h_T\}$;

(2) 利用验证样本集 V 计算 T 个网络的误差 ($E_t^V = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^V [d(x_i) - h_t(x_i)]^2 = C_{tt}$, $t = 1, 2, \dots, T$);

(3) 选择 E_t^V 最小的网络作为初始网, 计算 $E_P^V = \sum_{m=1}^P \sum_{n=1}^P C_{mn}^V / P^2$, 其中 $C_{mn}^V = (\sum_{i=1}^V [d(x_i) - h_m(x_i)][d(x_i) - h_n(x_i)]) / V$;

(4) 加入 H 中的某一网络, 直到 E_P^V 不能减小为止, 从而得到第 j 个子集 $\{h_1, h_2, \dots, h_S\}$, 与之对应的选择性神经网络集成为 $h^j = \sum_{s=1}^S \omega_s h_s$, $\omega_s = 1/S$;

(5) 重复步骤 (3) 直至用户设定值, 便可组成一级集成神经网络;

(6) 将一级集成网络再次集成即可组成二次集成的神经网络; $\bar{h} = \sum_{j=1}^L a_j h^j$, $a_j = 1/L$ 。

2 人工神经网络在近红外建模中的关键设计步骤

2.1 输入变量的选择

人工神经网络在近红外建模时的变量选择可以分为两大步: 首先是数据集的划分, 其次是输入变量的预处理。数据集通常需要划分为校正集、验证集和测试集三类。其中, 校正集可以选用随机选择法、K-S 分类法 (可选马氏距离或欧氏距离)、D 最优选择法或者 SOFM 网络选择法^[6]。另外, 校正集还需要包含未知样品的所有化学成分和未知样品的浓度变换范围。均匀的组分浓度变化以及足够数量的样品能统计确定光谱变量与浓度或性质之间的数学关系。选择验证集时需要覆盖校正集样品浓度的 95%, 并且要均匀分布。同时, 假如模型选用了 k 个变量, 那么验证集的个数至少需要 $4k$ 个^[1]。测试集是用来统计模型优劣的, 其性质的分布应具有代表性。输入变量的预处理方法不仅可以采

用一般的近红外数据预处理方法,而且还可以根据实际情况选择 WT、FFT、DCT、ICA 等方法。

2.2 相关参数的优化

在近红外建模过程中,人工神经网络的参数优化可按照网络的不同采用不同的方法,大概可以分为隐层数和隐层神经元个数的确定和特定网络参数的确定(比如 RBF 网络的 spread、SVM 的正则化系数 C 以及径向基核函数的宽度 σ 的确定等)。大多数文献在优化时根据交互验证的误差均方根、模型的相关系数或决定系数,以栅格法尝试后获得了最佳参数值。然而最近越来越多的研究人员开始尝试用 GA、PSO 等人工智能方式来确定最佳参数值。

3 结束语

人工神经网络由于工农业的迫切需求而得到了快速发展,尤其是在结合了其他优化算法或人工智能算法之后,其发展势态变得更为乐观。然而由于人工神经网络只是对人脑在处理某方面知识的模拟,而且至今人类也未深知人脑的工作机理,所以用人工神经网络建立近红外模型尚未像 PCA 和 PLS 一样演变成一种统一且规范的建模方法。

目前, BP 网络、RBF 网络和 SVM 在近红外模型建立中应用得最为广泛。例如, BP 网络已经出现在某些商用软件中,然而在面对复杂的实际工作时,其隐层节点数的确定和优化算法的进一步改进仍然是近年来人们研究的前沿领域; RBF 网络在基函数和扩展常数的选择上缺乏理论指导,前者大都采用高斯型径向基函数,后者仅能依靠格点搜索或者 GA 等算法进行优化; SVM 是相对较新的一种网络,其相关理论尤其是实际应用研究相对比较欠缺。此外,在面临不同的问题时,采用的手段也应该是不同的,所以不能忽视其他网络的应用与研究。例如, PNN 稳定性高,可追加样本; Fuzzy ANN 善于解决边界比较模糊的模式识别问题;集成神经网络泛化能力强而且不用考虑网络结构;灰色 ANN 善

于解决样本匮乏的问题,而且其建模简单,运算方便;混沌神经网络自学习能力非常强,具有优良的容错性,并且可以根据学习样本不断提高模式识别能力。随着人工神经网络在近红外分析中的不断应用,人们将会逐步对其进行深入研究,人工神经网络也必将会给近红外模型的建立带来新的生机。

参考文献

- [1] 陆婉珍. 现代近红外光谱分析技术 [M]. 北京: 中国石化出版社, 2007.
- [2] Blanco M. NIR Spectroscopy: a Rapid-response Analytical Tool [J]. *Trends in Analytical Chemistry*, 2002, **21**(4): 240-250.
- [3] 韩力群. 人工神经网络教程 [M]. 北京: 北京邮电大学出版社, 2006.
- [4] Wu W. Artificial Neural Networks in Classification of NIR Spectral Data: Design of the Training Set [J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1996, **21**(33): 35-46.
- [5] Igor V K. Measurement of Soybean Fatty Acids by Near-infrared Spectroscopy: Linear and Nonlinear Calibration Methods [J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2006, **83**(5): 421-427.
- [6] Wu W. Artificial Neural Networks in Classification of NIR Spectral Data: Selection of the Input [J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1996 **21**(35): 127-135.
- [7] Estienne F. A Comparison of Multivariate Calibration Techniques Applied to Experimental NIR Data Sets: Part III: Robustness against Instrumental Perturbation Conditions [J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2004, **29**(73): 207-218.
- [8] 丁丽, 相玉红, 黄安民, 等. BP 神经网络与近红外光谱定量预测杉木中的综纤维素、木质素、微纤丝角 [J]. *光谱学与光谱分析*, 2009, **29**(7): 1784-1787.
- [9] 林敏, 吕进. 基于神经网络与近红外光谱的玉米成分检测方法 [J]. *红外技术*, 2004, **26**(3): 78-81.
- [10] Roman M B. Neural Network (ANN) Approach to Biodiesel Analysis: Analysis of Biodiesel Density, Kinematic Viscosity, Methanol and Water Contents Using Near Infrared (NIR) Spectroscopy [J]. *Fuel*, 2011, **90**: 2007-2015.
- [11] Janik L J. The Prediction of Total Anthocyanin Concentration in Red-grape Homogenates Using Visible-near-infrared Spectroscopy and Artificial Neural Networks [J]. *Janik Analytica Chimica Acta*, 2007, **594**: 107-118.

- [12] 邵咏妮, 何勇, 鲍一丹. 基于独立组分分析和 BP 神经网络的可见 / 近红外光谱蜂蜜品牌的鉴别 [J]. *光谱学与光谱分析*, 2008, **28**(3): 602–605.
- [13] 袁高林, 任丽, 高玉振, 等. 基于近红外光谱的人工神经网络研究 STR 基因座分型方法 [J]. *分析测试学报*, 2009, **28**(11): 1245–1249.
- [14] Sanchez M S. Quality Control Decisions with Near Infrared Data [J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2000**34**(53): 69–80.
- [15] 谭克竹, 张长利, 柴玉华. 基于遗传多层前馈神经网络的大豆脂肪酸含量近红外光谱检测 [J]. *东北农业大学学报*, 2008, **39**(7): 112–117.
- [16] 雷萌, 李明, 徐志彬. 遗传神经网络在近红外光谱煤质分析中的应用研究 [J]. *工矿自动化*, 2010, **22**(2): 41–43.
- [17] 陈永明, 林萍, 何勇. 基于遗传算法的近红外光谱橄榄油产地鉴别方法研究 [J]. *光谱学与光谱分析*, 2009, **29**(3): 671–674.
- [18] Paulo H F. Determination of Organic Matter in Soils Using Radial Basis Function Networks and Near Infrared Spectroscopy [J]. *Analytica Chimica Acta*, 2002, **453**: 125–134.
- [19] 于晓辉, 张卓勇, 马群, 等. 径向基函数神经网络和近红外光谱用于大黄中有效成分的定量预测 [J]. *光谱学与光谱分析*, 2007, **27**(3): 481–485.
- [20] 李智, 王圣毫, 郑维平, 等. 基于傅立叶变换的人工神经网络近红外光谱定量分析法 [J]. *分析测试学报*, 2012, **31**(3): 343–346.
- [21] 程志颖, 孔浩辉, 张俊, 等. 粒子群算法结合支持向量机回归法用于近红外光谱建模 [J]. *分析测试学报*, 2010, **29**(12): 1215–1219.
- [22] Christian R M. Kernel Regression Methods for the Prediction of Wood Properties of Pinus Taeda Using Near Infrared Spectroscopy [J]. *Wood Sci Technol*, 2010, **44**: 561–578.
- [23] Chauchard F. Application of LS-SVM to Non-linear Phenomena in NIR Spectroscopy: Development of a Robust and Portable Sensor for Acidity Prediction in Grapes [J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2004, **71**: 141–150.
- [24] 侯振雨, 姚树文, 谷永庆, 等. 独立成分分析支持向量机回归模型及其在近红外光谱分析中的应用 [J]. *河南师范大学学报*, 2006, **34**(2): 75–78.
- [25] Olivier Devos. Support Vector Machines (SVM) in Near Infrared (NIR) Spectroscopy: Focus on Parameters Optimization and Model Interpretation [J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2009, **96**: 27–33.
- [26] 冯新沪, 罗平亚, 李子存, 等. 自组织神经网络定盆分析内燃机油粘度指数 [J]. *石油炼制与化工*, 2003, **34**(12): 44–48.
- [27] 刘雪松, 施朝晟, 程翼宇, 等. 基于自组织映射神经网络的中药注射剂质量快速鉴别方法 [J]. *分析化学研究简报*, 2007, **35**(10): 1483–1486.
- [28] Emilio Marengo. Hydroxyl and Acid Number Prediction in Polyester Resins by Near Infrared Spectroscopy and Artificial Neural Networks [J]. *Analytica Chimica Acta*, 2004, **511**: 313–322.
- [29] 郭卫东, 倪开诚, 孙旭东, 等. 基于 CWT 和 GRNN 的可见 – 近红外漫反射光谱检测樱桃糖度的研究 [J]. *食品科学*, 2009, **30**(12): 140–143.
- [30] 张瑜, 吴迪, 蒋璐璐, 等. 发动机润滑油品质的可见 – 近红外光谱快速检测 [J]. *光谱实验室*, 2010, **27**(4): 1629–1632.
- [31] 严文娟, 李刚, 林凌. 基于近红外光谱的舌诊疾病识别的研究 [J]. *红外技术*, 2010, **32**(8): 487–490.
- [32] Roman M B. Gasoline Classification Using Near Infrared (NIR) Spectroscopy Data: Comparison of Multivariate Techniques [J]. *Analytica Chimica Acta*, 2010, **671**: 27–35.
- [33] 汤守鹏, 姚鑫锋, 姚霞, 等. 基于主成分分析和小波神经网络的近红外多组分建模研究 [J]. *分析化学研究报告*, 2009, **37**(10): 1445–1450.
- [34] Roman M B. Wavelet Neural Network (WNN) Approach for Calibration Model Building Based on Gasoline Near Infrared (NIR) Spectra [J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2008, **93**: 58–62.
- [35] 刘雪松, 程翼宇. 用于中药药品质量快速检测的近红外光谱模糊神经元分类方法 [J]. *化学学报*, 2005, **63**(24): 2216–2220.
- [36] 施彦, 黄聪明. 选择性神经网络二次集成在火药近红外分析中的应用研究 [J]. *兵工学报*, 2006, **27**(2): 244–247.