

DOI: 10.13382/j.jemi.2017.07.014

基于电子舌和模式识别的中成药品辨识方法研究*

史庆瑞¹ 马泽亮¹ 周智² 贺宪权¹ 王志强¹ 马云霞³

(1. 山东理工大学计算机科学与技术学院 淄博 255000; 2. 山东淄博市中西医结合医院 淄博 255026;
3. 山东淄博昌国医院 淄博 255000)

摘要:为了实现不同中成药品的快速区分辨识,采用基于虚拟仪器技术的伏安电子舌系统对治疗感冒病症的4种不同中成药进行了检测分析。分别采用特征点提取(FPE)法和离散小波变换(DWT)法对电子舌输出信号进行预处理,以样本点的聚集性和分类效果为依据,确定较佳的特征提取方法为以db4为母小波进行的8层离散小波变换。在此基础上,分别采用主成分分析法(PCA)、聚类分析法(CA)和BP神经网络(BPNN)对不同中成药进行区分辨识。结果表明,PCA结果中PC1和PC2累计贡献率为95.6%,除羚羊感冒片和银翘解毒片有重叠趋势外,其余各类得到有效区分;CA能够有效地观察出4种中成药之间的差异程度,但4种药品最终被分成两类,区分效果较差;非线性分类模型BPNN对不同中成药区分效果较好。通过优化实验,分别确定了模型的训练算法、激活函数和隐含层节点数目等参数,测试集验证表明,BPNN模型对4种中成药的分类正确率达到100%。本研究结果可为中成药品的非感官质量评价和快速辨识研究提供技术参考。

关键词:虚拟仪器;电子舌;离散小波变换;主成分分析;聚类分析;BP神经网络

中图分类号: TP212.9; TP391 **文献标识码:** A **国家标准学科分类代码:** 510.40

Research on Chinese patent medicine identification method based on electronic tongue technology and pattern recognition

Shi Qingrui¹ Ma Zeliang¹ Zhou Zhi³ He Xianquan¹ Wang Zhiqiang¹ Ma Yunxia²

(1. College of Computer Science and Technology, Shandong University of Technology, Zibo 255000, China;
2. Shandong Hospital of Chinese Traditional and Western Medicine, Zibo 255026, China;
3. Shandong Changguo Hospital, Zibo 255000, China)

Abstract: An electronic tongue system based on virtual instrument technology was developed and used to distinguish and analyze 4 kinds of Chinese patent medicines in the treatment of cold symptom. The response signal of electronic tongue was first preprocessed by the feature point extraction (FPE) method and discrete wavelet transform (DWT) method, respectively. According to clustered property and classification results of sample points, the DWT applied "db4" as mother wavelet and decomposed 8 levels was selected as a recommended feature extraction method. The principal component analysis (PCA), cluster analysis (CA) and back propagation neural network (BPNN) were then used to distinguish and identify the 4 kinds of Chinese patent medicines. The results showed that the cumulative contribution rate of PC1 and PC2 was reached 95.6% when PCA was employed. All medicines were effectively distinguished except that Lingyang cold tablet and Yingqiao antidotal tablet had an overlapping trend. The CA could obviously observe the dissimilarity of the 4 kinds of Chinese patent medicines, but the classification result of CA was so poor that 4 kinds of medicines were classified into 2 groups, while nonlinear model BPNN exhibited a better result than other classification model. The parameters of BPNN such as the training algorithm, the activation function and the number of hidden layer nodes were optimized and determined for improving the model performance. The validation set results indicate that all samples are perfectly discriminated by BPNN with the correct classification rate reaching 100%. This research can provide a technical reference for the research on non-sensory quality evaluation and identification of Chinese patent medicines.

Keywords: virtual instrument; electronic tongue; discrete wavelet transform; principal component analysis; cluster analysis; back propagation neural network

1 引言

中药是中华民族瑰宝,是我国千百年来人民用于预防、诊断、治疗疾病的有效药物,同时还兼具调节人体新陈代谢、优化各项人体机能的作用。中成药则是以中药为制作原料,按照一定相应的处方和相关工艺提纯或合成制作的剂型药物,具有现成可用、服用方便等优点。然而,中成药的种类繁多,治疗同一种病症的剂型可能有许多种,其疗效和价格都存在着一定的差距。有些不法厂家以次充好,不但降低了疗效,而且严重损害了消费者经济和健康利益。因此,需要一种快速、准确的检测方法对不同种类的中成药品质量和品质以及产品种类进行区分和辨别。

传统中药辨识以“四气五味”为物质基础,通过人体感官来进行辨别。但是,此种方法受个体的感官差异影响较大,具有主观性强、重复性差等缺点。近年来,一些研究人员采用近红外光谱法^[1]、液相色谱-串联质谱法(LC-MS/MS)^[2]和高效液相色谱法(HPLC)^[3]等方法对中药进行区分辨识,但此类技术仪器体积大、价格昂贵、分析时间长、流程复杂,同时由于中药药效是由其内部多种成分整体作用产生的,传统技术只能检测样本中的单一组分,而无法对药品从整体上给与评价。

电子舌是一种利用传感器技术、仪器技术和模式识别技术实现的味觉仿生系统,能够从整体上对复杂成分液体、半液体物质进行定性或定量分析^[4],具有检测速度快、使用简便、客观性强、重复性好等优点。目前,电子舌技术已经成功应用在食品^[5,6]、环境分析^[7]等领域中。近些年,一些学者也将电子舌技术应用到药品的辨识与区

分中。盛良^[8]利用电子舌对12种治疗消化性溃疡的中西药物进行了分辨;熊萧萧等人^[9]利用电子舌对不同年份的中药柑橘红进行了识别与分类;武琳等人^[10]利用电子舌对6种不同辛味中药材种类、产地、批次进行了区分;Lorenz等人^[11]利用电子舌选择了一种较佳药品苦味掩味配方并建立其苦度预测模型;Woertz等人^[12]利用电子舌对药品的掩盖配方进行了分析,并建立了得分评价模型。

众多研究结果表明,电子舌在药品领域具有较大的应用潜能和价值。然而,利用电子舌对中成药品进行分析辨识,国内外尚未见相关报道。本文以4种不同中成感冒药为研究对象,利用一种基于虚拟仪器技术构建的电子舌系统对其进行辨识分析,该仪器具有体积小、成本低、结构简单等优点。针对电子舌输出数据量大、信号复杂的问题,分别采用特征点提取和离散小波变换进行信号预处理,以样本点的聚集性和分类效果为依据,获得了一种较佳的数据预处理方法;在此基础上,分别采用主成分分析法(principal component analysis, PCA)、聚类分析法(cluster analysis, CA)和BP神经网络(back propagation neural network, BPNN)对不同中成药品进行了差异性分析,研究了电子舌系统对中成药品进行辨识的可行性。

2 材料与方法

2.1 实验材料

本实验选取4种中成感冒药(金感、精制银翘解毒片、双黄连、羚羊感冒片)作为实验对象。4种药品均购于本地药店,且密封完好,未超过保质期。其基本情况如表1所示。

表1 药品基本情况
Table 1 Basic information of drugs

名称	剂型	药量	主要成分	生产厂家
金感胶囊	胶囊	0.45 g/粒	金银花、穿心莲、板蓝根、蒲公英、对乙酰氨基酚、盐酸金刚烷氨、马来酸氯苯那敏	贵州百灵企业集团天台山药业有限公司
羚羊感冒片	片剂	0.3 g/片	羚羊角、牛蒡子、淡豆豉、金银花、荆芥、连翘、淡竹叶、桔梗、薄荷油、甘草	商丘市金马药业有限公司
双黄连胶囊	胶囊	0.4 g/粒	金银花、黄芩、连翘	河南天方药业中药有限公司
精制银翘解毒片	片剂	0.26 g/片	桔梗、连翘、淡豆豉、甘草、淡竹叶、金银花、牛蒡子、荆芥穗、薄荷脑、对乙酰氨基酚	陕西盘龙药业集团股份有限公司

实验时每种药品取相同剂量,其中胶囊类药品除掉胶囊壳而取其药用部分;片剂类药品则去掉糖衣后碾碎至粉末状。将处理后药品置入到100 mL纯净水中,搅拌

均匀,待全部溶解后,静置10 min,然后取其上清溶液用于电子舌检测。

2.2 电子舌系统

本研究采用自行设计的一种基于虚拟仪器技术的伏安型电子舌系统,其结构如图1所示。电子舌系统实物

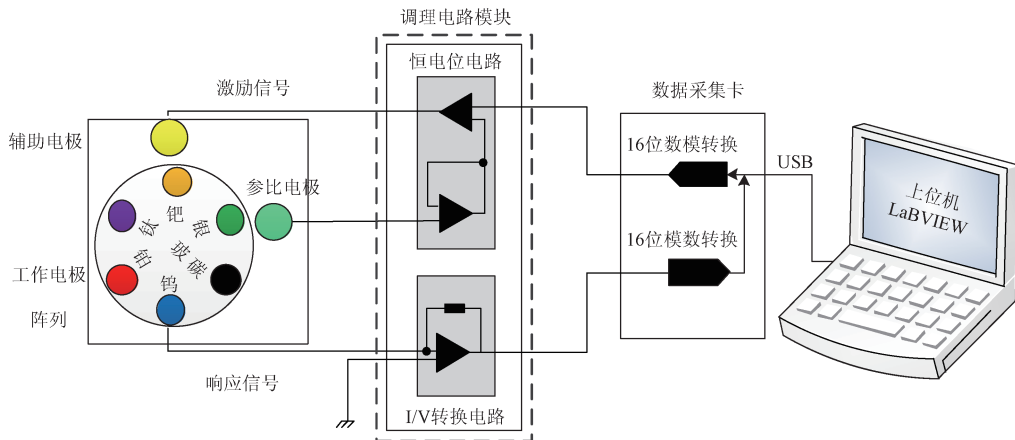


图1 电子舌系统结构

Fig. 1 Schematic diagram of electronic tongue system structure

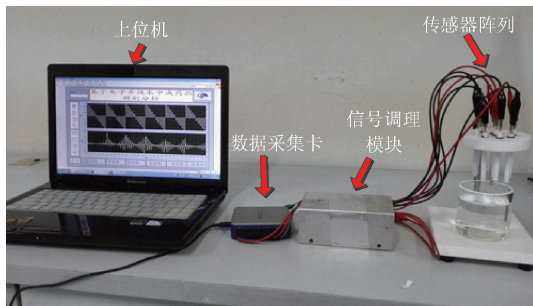


图2 电子舌系统实物

Fig. 2 Physical diagram of electronic tongue system

传感器阵列由钼、铂、银、玻碳、钛、钨6种非修饰贵金属工作电极以及1个参比电极(饱和KCl溶液)和1个辅助电极(金电极)组成。仪器工作时,基于LABVIEW设计的上位机工作软件可以产生如图3所示的大幅脉冲激励信号。该信号经NI_USB6002数据采集卡进行D/A转换后通过信号调理电路施加在传感器阵列上。在该激

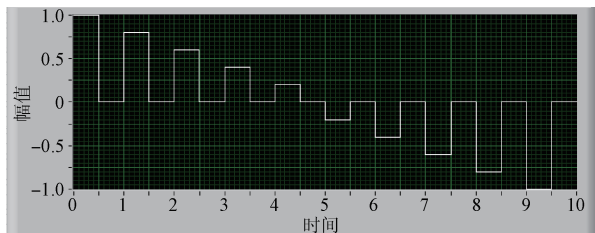


图3 大幅脉冲激励信号

Fig. 3 Stimulation signal of LAPV

如图2所示。系统由传感器阵列模块、信号调理模块、数据采集卡和LaBVIEW上位机软件组成。

励信号作用下,测试溶液在工作电极表面发生电化学反应,从而产生微弱的响应电流信号,该电流信号经信号调理电路进行I/V转换、放大、滤波后传输至数据采集卡,经A/D转换后,送上位机进行模式识别处理,工作过程中,上位机控制软件对整个电子舌系统检测流程进行控制。

2.3 样本检测流程

实验前所有工作电极在均采用Al₂O₃打磨粉和抛光布进行抛光预处理,直到电极表面没有划痕呈现镜面为止。为了确保实验数据的稳定性和可重现性,每个电极对每种药品分别进行连续13次平行检测,并去掉前3次检测数据。当更换检测药品时,采用纯净水对电极进行超声清洗,以去除吸附在电极表面的上的残留物。所有实验均在室温下进行,药品检测采用随机次序采集,每个工作电极针对一个样本可采集得到1 100个数据点,则电子舌采集样本总体为40×6 600数据矩阵。

3 数据处理与分析

3.1 数据预处理

伏安电子舌的输出数据量较大,同时由于传感器的低选择性和交互敏感性使得检测数据中存在大量的冗余信息以及外界噪音。若将这些数据直接输入分类模型,不但增大了系统的处理难度,而且会影响系统的分辨效果。因此需要首先对采集的数据进行预处理以降低信息维度。本文分别采用特征点提取(feature point extraction, FPE)和离散小波变换(discrete wavelet transform, DWT)

两种方法对电子舌输出数据进行预处理。

3.1.1 FPE

FPE 是以获得良好模式识别结果为宗旨,对能够反映研究对象基本信息的特征值进行选择 and 提取的方法。根据大幅脉冲伏安法的工作原理以及响应电流特点,分别选取传感器输出信号中最能反映溶液特性的峰值(充电电流)和拐点(氧化还原电流)作为特征值,以达到减小数据量,简化系统处理难度,实现较佳模式识别效果的目的^[13]。

3.1.2 DWT

小波变换是一种时频域联合分析方法,具有多尺度、自适应分析和“数学显微”特性。亦是一种高效、便捷的数据压缩、降噪和分析工具^[14]。DWT 是小波变换在其尺度和位移上的离散化,能够减少数据冗余、压缩数据,同时不会丢失原始信号中的有用信息^[15]。针对电子舌输出信号特点,本文采用 Mallat 算法对电子舌原始信号进行分解,其分解算法公式为:

$$P_k^j = \sum_{m \in Z} \alpha_{m-2k} P_m^{j-1} \quad (1)$$

$$r_k^j = \sum_{m \in Z} \beta_{m-2k} P_m^{j-1} \quad (2)$$

式中: α 为低通滤波器, β 为高通滤波器, j 为分解的层数。 P_k^j 为近似系数,即低频分量; r_k^j 为细节系数,即高频分量。经过多层分解后,剔除信号中的高频分量,保留其低频分量,不会造成电子舌主要信息的丢失,因此可以高效的对实验数据进行压缩。

DWT 的母小波和分解层数是影响其信号处理效果的两个重要因素。不同的母小波具有不同的时域和频域特征,可以从原始信号中提取出不同的特征信息。分解层数则决定了最终的数据规模,分解层数过大或过小都会影响分类模型性能和效果^[16]。为了对母小波和小波分解层数进行优化选择。本文引入相似系数 R 对 DWT 压缩效果进行量化评价。

相似系数 R 计算公式为:

$$R = \frac{\text{cov}(i,j)}{\sqrt{\text{cov}(i,i) \cdot \text{cov}(j,j)}} \quad (3)$$

式中: i 代表原始信号, j 代表经 DWT 压缩重构后的信号, $\text{cov}(i,j)$ 为两组信号的协方差。相似系数 R 越大,说明压缩重构后的信号与原始信号越相近,相似系数越小,则表明压缩重构后信号与原始信号相差较大。式(3)中的压缩重构信号 j 可采用 Mallat 逆变换算法获得,其公式为:

$$P_k^{j-1} = \sum_{m \in Z} \alpha'_{k-2m} P_m^j + \sum_{m \in Z} \beta'_{k-2m} r_m^j \quad (4)$$

式中: P_m^j 为 Mallat 重构下的低频分量, r_m^j 为高频分量, α'_{k-2m} 为 Mallat 重构下的低通滤波系数, β'_{k-2m} 为高通滤波系数。

为了消除数据的数量级和量纲差别对分析结果的

影响,对预处理后的数据采用归一化方法进行处理。归一化公式为:

$$X' = \frac{X - X_{\min}}{X_{\max} - X_{\min}} \quad (5)$$

式中: X_{\max} 为特征变量最大值, X_{\min} 为特征变量最小值, X 为特征变量, X' 为归一化后的特征变量。经过处理后,特征变量的数值范围变为 $[0,1]$ 。

3.2 模式识别方法

电子舌输出信号经预处理后,分别采用 PCA、CA 以及 BPNN 对电子舌特征数据进行多元统计和模式识别分析。

PCA 是一种“无导师监督”的多元统计方法。PCA 通过将一组相关的变量转换成少数几个线性无关的新变量,即主成分,可将数据从高维复杂空间转换到低维简化空间内,从而在不丢失原始数据信息的情况下达到降维和提高分类效果的目的^[17]。

CA 是一种“无导师监督”的模式识别方法。目前已广泛应用在数据挖掘、模式识别、数据分析等领域。其基本思想是将具有相同特征或者属性的样本聚为一类,使得同一样本内的相似性尽可能大,不同样本间的离散性尽可能大,从而达到分类的目的^[18]。

BPNN 是一种“有导师监督”的人工神经网络模型,具有结构简单、自适应能力强、灵活性好等特点,并且模型参数可以利用训练数据通过网络学习来确定。BPNN 的输入层和输出层之间存在非线性对应关系,可有效的对非线性的数据集做出有效解释。通过训练算法对网络的权值和阈值进行反复优化,可以不断缩小误差范围,使得网络输出尽可能逼近期望输出^[19-20]。

4 实验结果与讨论

本文所有的数据处理和分析方法均利用 MATLAB R2014a 实现。

4.1 电子舌响应信号

工作电极阵列在单个中成药样本中得到的检测结果如图 4 所示。从图中可以看出,在大幅脉冲伏安信号激发下 6 个工作电极的响应信号之间存在着明显的差异。这主要是由于不同材质的传感器对溶液中不同的化学组分具有不同电响应。通过对多个工作电极的信号进行组合,可以全面反映被测溶液的整体信息。检测结束后,每个中成药样本可得到 6 600 个数据点。

4.2 信号预处理

由于电子舌输出数据量大,难以直接作为模型输入用于分析,根据电子舌响应信号特点,分别采用 FPE 和 DWT 两种方法进行数据预处理。

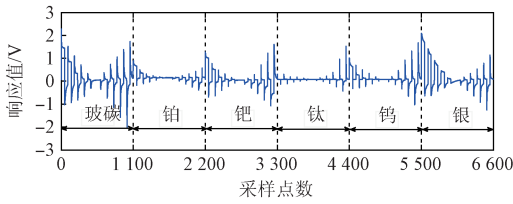


图4 工作电极阵列的响应信号

Fig.4 Respond signal of working electrode sarray

4.2.1 FPE

根据大幅脉冲响应信号特点,结合文献[21-22]方法对传感器响应信号进行特征点提取,其结果如图5所示。分别在每个脉冲的响应信号中,提取1个极大值,1个极小值和2个拐点,则一个传感器的脉冲序列可提取40个特征点,6个工作电极下共得到240个特征点,大大减少了用于模型输入的数据量。

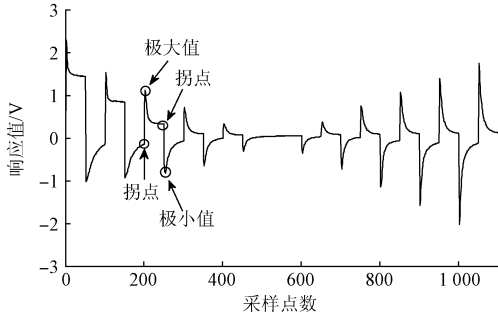


图5 单个传感器特征值提取结果

Fig.5 Feature extraction results from single sensor

4.2.2 离散小波变换

针对电子舌响应信号特点,分别采用 Biorthogonal3.9、Daubechies4、Daubechies5 和 Coiflets3 母小波函数对电子舌输出信号进行7~9层分解。将得到的逼近系数重构信号与原始信号进行对比,考察相似系数R的变化情况,结果如图6所示。从图6可以看出,就压缩重构信号与

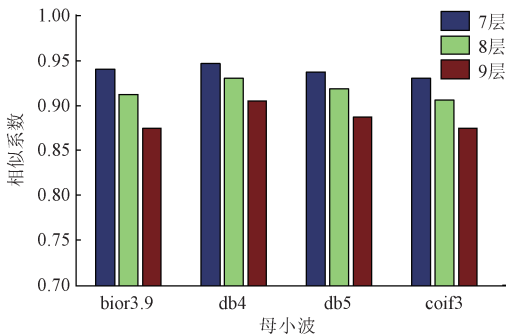


图6 不同母小波和分解层数对相似系数R的影响

Fig.6 Influence of different mother wavelet and decomposition level on similarity coefficient R

原始信号之间的相似程度来看,boir3.9、db4、db5、coif3之间差异性不大,但db4母小波整体相似度略高于其他3个母小波。所以选取db4作为母小波。从不同分解层数来看,压缩重构信号和原始信号之间的相似程度随着压缩层数的增加呈现递减趋势,说明压缩层数越大,越不利于对原始信号特征的表达。综合考虑压缩率以及建立的最佳分类模型的结构和规模,最终选取8层为小波分解的最佳分解层数。经过DWT压缩后的数据由6600个点变成32个点,大大减少了数据量。

4.3 数据分析

4.3.1 PCA

针对FPE和DWT两种不同特征提取方法,分别采用PCA对中成药品质电子舌检测数据进行分析,以样本点的聚集性和分类效果为依据,选取较佳的特征提取方法。

图7(a)所示为采用FPE处理后的数据得到的PCA得分图。从图7(a)可以看出,第1主成分贡献率为34.70%,第2主成分贡献率为24.59%。PC1和PC2仅表达了原始数据59.29%(远小于85%)的信息量。从分类效果上来看,每种药品的10个样本点之间,聚集性较差,双黄连和银翘解毒片两种药品在PCA得分图上发生了重

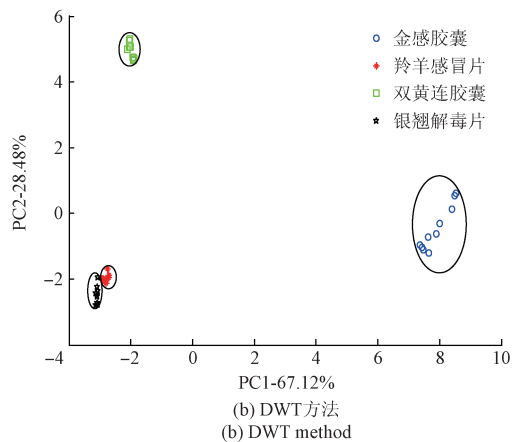
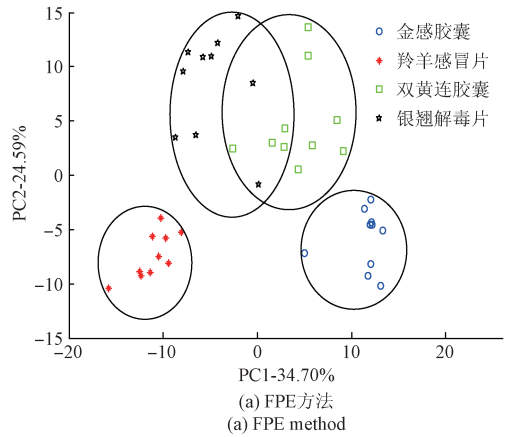


图7 两种不同特征提取方法下的PCA得分图

Fig.7 PCA score plot in two feature extraction methods

叠现象,无法较好区分,但这两种药品其主要成分上仅有金银花、连翘两种成分相同,其余成分均不相同。而金感和羚羊两种药品分别与其他3种药品的距离较远,离散性较大,得到了较好的区分。

图7(b)所示为利用DWT处理后的数据得到的PCA得分图。从图7(b)可知,第1主成分贡献率为67.12%,第2主成分为28.48%。前两个主成分的信息占有率达到了95.6%(大于85%)较FPE下的PCA贡献率提高36.31%,更好的反映出原始数据中的特征信息。从分类效果上来看,每种药品的10个样本点之间,聚集性上有了较好提升,每种药品都基本上聚集在同类别区域内。除羚羊和银翘片外,不同中成药之间的距离也有所增加,差异性上更加明显,尤其是FPE下的PCA无法区分的双黄连和银翘片,得到了很好的区分。但羚羊和银翘片之间距离相当接近,有重叠的趋势,这可能是由于这两种药品主要成分相似性较大的原因造成。

综合上述实验结果,FPE下的PC1和PC2综合贡献率较小,样本点离散程度较大,且有重叠现象,未能达到理想的分类效果。而经过DWT后的PC1和PC2综合贡献率达到95.6%,样本点聚集性得到提升,除羚羊感冒片和银翘解毒片外,类间距离明显增大,分类效果更加明显。另一方面,从特征提取的数据点数来看,DWT后的

数据点数(32个)要远少于FPE后的数据点数(240个),在减小了系统运算量的同时提高了模型分类效果。所以本文采用DWT处理后的数据对4种中成药做进一步的分析。

4.3.2 CA

采用DWT对4种药品的40个样本(1~10代表金感胶囊,11~20代表羚羊感冒片,21~30代表双黄连胶囊,31~40代表银翘解毒片)检测结果进行预处理,然后进行聚类分析,利用欧式距离作为样本之间的分类距离,以最短距离法建立相应的聚类树,结果如图8所示。从图8可知,4种药品最终被分成两大类,金感胶囊单独一类,其余3种药品聚为一类。每种药品的10个样本之间没有发生被误判的情况,均坐落在同一区域下。羚羊感冒片和银翘解毒片在2.1个单位处最先聚为一类,说明两种药品之间差异性较小,这与离散小波变换下的主成分分析结果一致。这两类在6.5个单位处又与双黄连胶囊聚为一类,说明双黄连胶囊与羚羊感冒片和银翘解毒片具有一定的相似性。金感胶囊虽为中成药但其成分中包含了对乙酰氨基酚、盐酸金刚烷氨、马来酸氯苯那敏3种西药的成分,这使其与其他三种药品的差异性最为明显,因此被单独聚为了一类。从总体区分效果来看,CA无法对双黄连胶囊、羚羊感冒片和银翘解毒片这3种中成药给予明确区分。

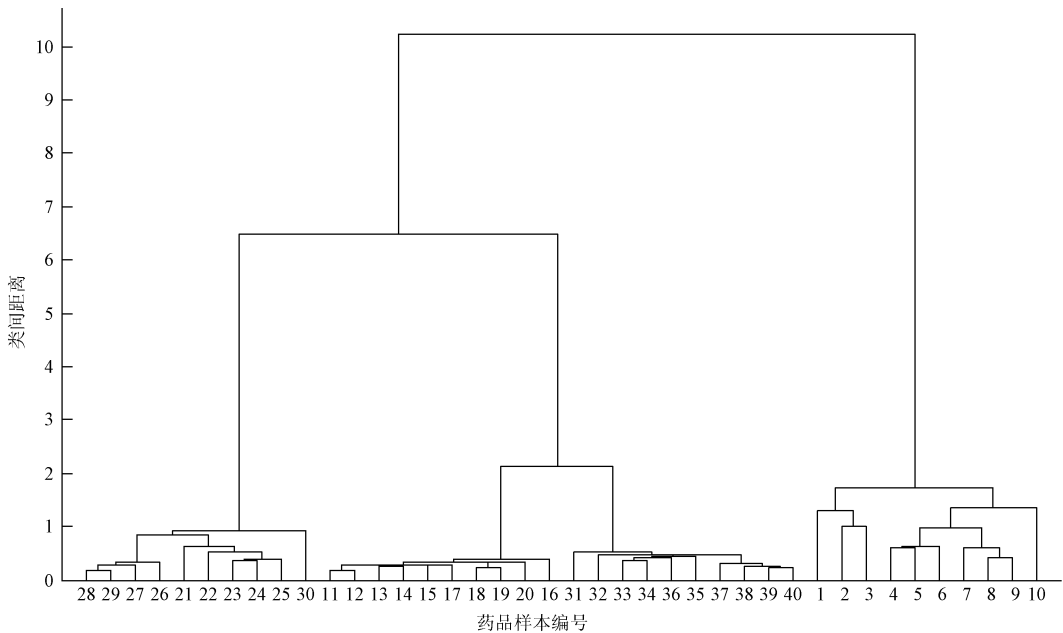


图8 不同中成药DWT下的CA结果

Fig. 8 CA results in different Chinese patent medicines based on DWT

4.3.3 BPNN

线性分类模型PCA和CA对于品质差异明显的中成药的区分效果较好,但对品质相似的中成药未能给

出明显的区分结果。这可能是由于品质相似的中成药之间存在着一一定的非线性关系,而线性分类模型对非线性关系分类效果较差。为了更为精确地对这4种中成药

进行区分辨别,选用非线性 BPNN 模型,以 DWT 处理后的数据作为模型输入,对这 4 种不同中成药品质进行分析。采用的 BPNN 模型由 3 层神经元层组成,其结构如图 9 所示。分别选取 28 组(每组 7 个,共 4 组)样本用于模型的训练,剩余的 12 组(每组 3 个,共 4 组)样本作为测试集用于验证模型的预测精度。

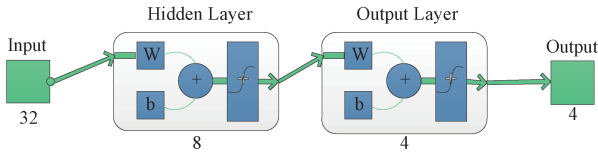


图 9 BPNN 结构

Fig.9 Schematic diagram of BPNN structure

BPNN 的隐含层节点数、训练算法、激活函数对模型分类效果具有较大影响^[23]。为了得到最佳参数优化组合以及网络模型,分别选取 tansig、purelin、logsig 作为传递函数,然后分别采用 Traingd(梯度下降算法)、Traingdx(动量反传和动态自适应学习率的梯度下降算法)作为训练算法对网络进行训练。隐含层的节点数目范围根据经验公式确定:

$$n_c = \sqrt{n_m + n_n} + l \quad (6)$$

式中: n_c 是隐含层的节点数, n_m 为输入层节点数, n_n 为输出层节点数, l 为常数(1~10)。依据此公式,隐含层节点的数目选择范围被确定为 7~16 个。采用上述网络参数对 BPNN 模型进行优化训练,其训练集的分类误差结果如图 10 所示。从图 10 可以看出,当训练算法为 Traingdx,激活函数为 tansig-tansig 时,DWT—BPNN 模型的整体分类错误率相对较低。同时隐含层节点数在 8 个和 10 个时,分类的错误率为 0,但当隐含层节点数过多

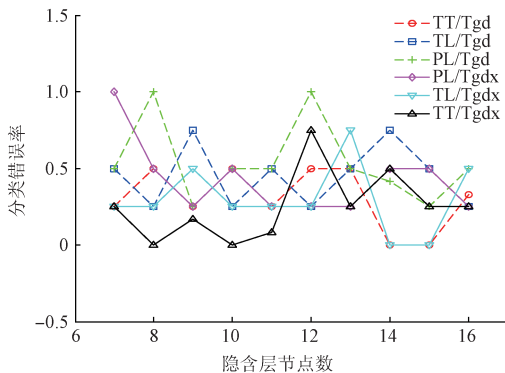


图 10 不同隐含层节点数、训练算法、激活函数对 BPNN 模型分类效果的影响

Fig.10 Influence of different hidden layer nodes, training algorithm, and activation function on BPNN model classification effect

时,有可能会导导致训练时间的增加和过度拟合现象。因此,BPNN 选取 8 个隐含节点。

利用测试集样本对优化后的 BPNN 模型性能进行验证。图 11 所示为测试集样本的混淆矩阵(Confusion Matrix),其中横坐标为目标类别(Target Class),纵坐标为模型的预测类别(Output Class),1 代表金感胶囊、2 代表羚羊感冒片、3 代表双黄连胶囊、4 代表银翘解毒片。从图中可以看出测试集中没有样本发生混淆行为,12 组样本均被正确分类,测试集样本的识别率达到 100%,说明 BPNN 模型具有良好的区分辨别能力,可以对不同中成药品质进行有效鉴别。

	1	2	3	4	
1	3 25.0%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	100% 0.0%
2	0 0.0%	3 25.0%	0 0.0%	0 0.0%	100% 0.0%
3	0 0.0%	0 0.0%	3 25.0%	0 0.0%	100% 0.0%
4	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	3 25.0%	100% 0.0%
	100% 0.0%	100% 0.0%	100% 0.0%	100% 0.0%	100% 0.0%
	1	2	3	4	

图 11 BPNN 测试集样本混淆矩阵

Fig.11 Confusion matrix of BPNN test set sample

5 结 论

采用基于虚拟仪器技术的大幅脉冲伏安电子舌对 4 种不同中成药品质进行了辨别和品质差异分析。通过比较 PCA 效果确定了以 db4 为母小波进行的 8 层 DWT 更适合于中成药品质电子舌信号的特征提取。DWT-CA 可以有效观察到 4 种中成药品质之间的品质差异程度,但从区分效果来看,DWT-CA 未能对 4 种中成药品质进行明确的区分。采用非线性分类模型 BPNN 对 4 种中成药品质做进一步研究。分别确定了训练算法、激活函数、隐含层节点数的参数优化组合。实验表明,DWT-BPNN 对 4 类中成药品质具有较强的辨别能力。训练集和测试集的预测正确率均为 100%。说明非线性的分类模型更适合用于中成药品质的辨别分析。上述结果证明了电子舌系统对中成药品质的检测分析具有可行性。该研究成果亦可为今后中成药品质研究提供技术支持。

参考文献

- [1] 沈海龙. 近红外漫反射光谱法快速鉴别地骨皮和伪品荜皮大青根皮[J]. 辽宁中医杂志, 2010(6): 1103-1104.
SHEN H L. Rapid identification of cortex lycii and its adulterants[J]. Liaoning Journal of Traditional Chinese Medicine, 2010, (6): 1103-1104.
- [2] 严爱花, 李贤良, 郗存显, 等. 液相色谱-串联质谱法同时检测中成药及保健食品中非法添加的 22 种苯二氮卓类药物[J]. 分析化学, 2013, 41(4): 509-516.
YAN AI H, LI X L, XI C X, et al. Simultaneous determination of 22 Benzodiazepines in Chinese patent drugs and health-care foods by liquid chromatography-tandem mass spectrometry [J]. Chinese Journal of Analytical Chemistry, 2013, 41(4): 509-516.
- [3] 陈胡兰, 汤沛然, 张梅, 等. 紫花地丁药材及其混淆品的 HPLC 指纹图谱研究[J]. 中国药学杂志, 2010, 45(18): 1372-1375.
CHEN H L, TANG P R, ZHANG M, et al. Studies on viola yedoensis Makino and its adulterants by HPLC fingerprint chromatogram [J]. Chinese Pharmaceutical Journal, 2010, 45(18): 1372-1375.
- [4] 王莉, 惠延波, 王瞧, 等. 电子舌系统结构及其检测技术的应用研究进展[J]. 河南工业大学学报: 自然科学版, 2012, 33(3): 85-90.
WANG L, HUI Y B, WANG Q, et al. Electronic tongue system and application research on detection technology thereof[J]. Journal of Henan University of Technology: Natural Science Edition, 2012, 33(3): 85-90.
- [5] 田晓静, 王俊, 崔绍庆. 羊肉纯度电子舌快速检测方法[J]. 农业工程学报, 2013, 29(20): 255-262.
TIAN X J, WANG J, CUI Sh Q. Fast discriminating of purity on minced mutton using electronic tongue [J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2013, 29(20): 255-262.
- [6] 高利萍, 王俊, 崔绍庆. 不同成熟度草莓鲜榨果汁的电子鼻和电子舌检测[J]. 浙江工业大学学报: 农业与生命科学版, 2012, 38(6): 715-724.
GAO L P, WANG J, CUI Sh Q. Evaluation of fresh juice of strawberries at different degrees of ripeness using electronic nose and electronic tongue [J]. Journal of Zhejiang University: Agricultural & Life Science, 2012, 38(6): 715-724.
- [7] 哈达. 电子舌在环境监测和药物评价中的应用研究[D]. 杭州: 浙江大学, 2014.
HA D. The research on electronic tongue and its application in environmental monitoring and pharmaceutical assessment [D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2014.
- [8] 盛良. 用电子鼻、电子舌检测中西药物共同药效物质基础[J]. 现代中西医结合杂志, 2008, 17(18): 2778-2780.
SHENG L. Electronic nose and tongue detection for common pharmacodynamic substance foundation of Chinese-western drugs [J]. Modern Journal of Integrated Traditional Chinese and Western Medicine, 2008, 17(18): 2778-2780.
- [9] 熊萧萧, 王鲁峰, 徐晓云, 等. 基于电子舌技术对不同年份的化橘红的识别[J]. 宁波大学学报: 理工版, 2012, 25(3): 21-24.
XIONG X X, WANG L F, XU X Y, et al. Discrimination of exocarpium citri grandis indifferent years based on electronic tongue techniques [J]. Journal of Ningbo University: NSEE, 2012, 25(3): 21-24.
- [10] 武琳, 骆德汉, 邵雅雯, 等. 基于电子舌技术的辛味中药材鉴别研究[J]. 传感器与微系统, 2012, 31(10): 48-50.
WU L, LUO D H, SHAO Y W, et al. Research on distinguish of Chinese herbal medicine based on electronic tongue technology [J]. Transducer and Microsystem Technologies, 2012, 31(10): 48-50.
- [11] LORENZ J K, REO J P, HENDL O, et al. Evaluation of a taste sensor instrument (electronic tongue) for use in formulation development [J]. International Journal of Pharmaceutics, 2009, 367(1-2): 65-72.
- [12] WOERTZ K, TISSEN C, KLEINEBUDDE P, et al. A comparative study on two electronic tongues for pharmaceutical formulation development [J]. Journal of Pharmaceutical & Biomedical Analysis, 2011, 55(2): 272-281.
- [13] 韦真博. 伏安型电子舌的研发及其在食品检测中的应用[D]. 杭州: 浙江大学, 2011.
WEI ZH B. Development of a voltammetric electronic tongue and its application to the detection of several kinds of foods [D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2011.
- [14] 曲正伟, 张坤, 王云静, 等. 基于小波-原子分解的超短期风电出力预测模型[J]. 仪器仪表学报, 2016, 37(10): 2251-2258.
QU ZH W, ZHANG K, WANG Y J, et al. Ultra short-term wind power output forecast model based on wavelet decomposition and atomic decomposition [J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2016, 37(10): 2251-2258.
- [15] 王剑平, 张捷. 小波变换在数字图像处理中的应用[J]. 现代电子技术, 2011, 34(1): 91-94.

- WANG J P, ZHANG J. Application of wavelet transform in digital image processing [J]. Modern Electronics Technique, 2011, 34(1):91-94.
- [16] 胡耀垓, 赵正予, 王刚. 基于小波的光谱信号基线校正和背景扣除[J]. 华中科技大学学报: 自然科学版, 2011, 39(6):36-40.
- HU Y G, ZHAO ZH Y, WANG G. Baseline correction and background elimination using wavelet transforms [J]. Journal of Huazhong University of Science and Technology: Natural Science Edition, 2011, 39(6):36-40.
- [17] 胡帅, 程迎新, 顾艳. PCA 和 Elman 网络在移动学习策略分类中的应用[J]. 电子测量技术, 2016, 39(5):182-186.
- HU SH, CHENG Y X, GU Y. Application of PCA and Elman network in mobile learning strategy classification [J]. Electronic Measurement Technology, 2016, 39(5):182-186.
- [18] 王梦馨, 薄晓培, 韩善捷, 等. 不同防冻措施茶园茶汤滋味差异的电子舌检测 [J]. 农业工程学报, 2016, 32(16):300-306.
- WANG M X, BO X P, HAN SH J, et al. Difference of taste among streaming tea soup from tea plantations under different measures against frost based on electronic tongue [J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2016, 32(16):300-306.
- [19] 丁硕, 巫庆辉, 常晓恒, 等. 基于灰色 BP 神经网络的实验材料供应预测 [J]. 国外电子测量技术, 2016, 35(12):78-82.
- DING SH, WU Q H, CHANG X H, et al. Prediction of laboratory equipment support based on grey relation analysis and BP neural network [J]. Foreign Electronic Measurement Technology, 2016, 35(12):78-82.
- [20] 周宇晴, 秦梦芝, 马志宏. 支持向量机和 BP 神经网络在可见-近红外光谱检测药品中的比较与应用 [J]. 天津农学院学报, 2016, 23(2):49-52.
- ZHOU Y Q, QIN M ZH, MA ZH H. Comparison and application of support vector machine and BP neural network in visible-near infrared spectroscopy detection of drugs [J]. Journal of Tianjin Agricultural University, 2016, 23(2):49-52.
- [21] 丁春晖. 多频脉冲电子舌对昌黎原产地干红葡萄酒的检测 [D]. 咸阳: 西北农林科技大学, 2008:22-23.
- DING CH H. The identification on the wines from geographic origin of changli using multi-frequency amplitude pulse electronic tongue [D]. Xianyang: Northwest A&F University, 2008:22-23.
- [22] 钟海军, 田师一, 邓少平. 智能型电子舌的虚拟仪器构建技术 [J]. 仪表技术与传感器, 2009(10):31-34.
- ZHONG H J, TIAN SH Y, DENG SH P. Virtual instrument construction technology for smart tongue [J]. Instrument Technique and Sensor, 2009(10):31-34.
- [23] 吴成中, 王耀南, 冯明涛, 等. 基于神经网络的医药微弱异物视觉检测机器人 [J]. 电子测量与仪器学报, 2015, 29(12):1746-1756.
- WU CH ZH, WANG Y N, FENG M T, et al. Neural network based pharmaceutical insoluble foreign matter inspection robot [J]. Journal of Electronic Measurement and Instrumentation, 2015, 29(12):1746-1756.

作者简介



史庆瑞, 2015 年于菏泽学院获得工学学士学位, 现为山东理工大学硕士研究生, 主要研究方向为模式识别, 数字信号处理等。

E-mail: 782579519@qq.com

Shi Qingrui received B. Sc. from Heze University in 2015. He is currently a M. Sc. candidate in Shandong University of Technology. His main research interest is pattern recognition, digital signal processing, etc.



王志强 (通讯作者), 2014 年于中国农业大学获得博士学位, 现为山东理工大学副教授, 硕士生导师, 主要研究方向为智能计算, 智能信息系统等。

E-mail: wzq@sdu.edu.cn

Wang Zhiqiang (Corresponding author) received Ph. D. from China Agricultural University in 2014. Now, he is an associate professor and M. Sc. supervisor in Shandong University of Technology. His main research interests are intelligent computing, intelligent information system, etc.