

DOI: 10.13652/j.spjx.1003.5788.2024.80051

基于卷积神经网络的三聚氰胺太赫兹光谱定量分析

刘洋硕 燕芳 李文文 郭以恒

(内蒙古科技大学自动化与电气工程学院, 内蒙古 包头 014010)

摘要: [目的] 结合卷积神经网络与太赫兹时域光谱技术针对奶粉中的非法添加剂三聚氰胺进行定量分析。[方法] 使用透射式太赫兹时域光谱系统测得三聚氰胺与奶粉单质及混合物的太赫兹吸收谱, 分别采用 S-G 平滑、高斯平滑、滑动平均和 R-Loess 平滑等方法对原始光谱数据进行校正, 并建立偏最小二乘 (PLS) 回归模型, 通过对比模型评价标准以确定最佳的太赫兹光谱校正预处理方法; 选择 S-G 平滑校正处理后的 PLS 模型作为混合样片的定量分析模型; 分别建立了基于偏最小二乘 (PLS)、最小二乘支持向量机 (LS-SVM)、反向传播神经网络 (BPNN) 及卷积神经网络 (CNN) 的定量回归模型, 并对混合样片中的三聚氰胺含量进行了预测。[结果] PLS、LS-SVM、BPNN、CNN 4 种模型的预测集相关系数分别为 0.997 1, 0.997 7, 0.998 1, 0.998 7, 预测集均方根误差分别为 0.551%, 0.494%, 0.437%, 0.374%。[结论] 与其他 3 种模型相比, CNN 回归模型的预测精度最高, 更适用于准确检测奶粉中三聚氰胺的含量。

关键词: 太赫兹时域光谱; 定量分析; 光谱校正; 卷积神经网络

Quantitative analysis of melamine in terahertz spectra based on convolutional neural network

LIU Yangshuo YAN Fang LI Wenwen GUO Yiheng

(School of Automation and Electrical Engineering, Inner Mongolia University of Science and Technology, Baotou, Inner Mongolia 014010, China)

Abstract: [Objective] Combining convolutional neural networks and terahertz time-domain spectroscopy for quantitative analysis of the illegal additive melamine in milk powder. [Methods] The terahertz absorption spectra of melamine, milk powder both individually and in mixtures were measured using a transmission-type terahertz time-domain spectroscopy system. Various methods such as Savitzky-Golay (S-G) smoothing, Gaussian smoothing, moving average, and R-Loess smoothing were employed to correct the original spectral data. A partial least squares (PLS) regression model was established, and the optimal terahertz spectroscopic correction preprocessing method was determined by comparing model evaluation criteria. The PLS model corrected with S-G smoothing was chosen for the quantitative analysis of the mixed samples. Quantitative regression models based on partial least squares (PLS), least squares support vector machine (LS-SVM), backpropagation neural network (BPNN), and convolutional neural network (CNN) were separately established, and the content of melamine in the mixed samples was predicted. [Results] The correlation coefficients of the prediction set for the PLS, LS-SVM, BPNN, and CNN models were 0.997 1, 0.997 7, 0.998 1, and 0.998 7, respectively, with prediction set root mean square errors of 0.551%, 0.494%, 0.437%, and 0.374%, respectively. [Conclusion] Compared to the other three models, the CNN regression model has the highest prediction accuracy and is more suitable for accurately detecting the content of melamine in milk powder.

Keywords: terahertz time domain spectroscopy; quantitative analysis; spectral correction; convolution neural network

三聚氰胺是一种含氮有机化合物。食用三聚氰胺含量超标的配方奶粉和乳制品会导致婴儿患上尿路结石, 对人体健康造成极大危害。GB 10765—2010 规定, 婴幼儿配方乳粉中三聚氰胺不得超过 0.1 mg/kg^[1]。

目前, 传统的食品添加剂检测方法包括高效液相色谱法 (HPLC 法)、液相色谱—质谱/质谱法 (LC-MS/MS 法) 和气相色谱—质谱联用法等^[2-4]。GB/T 22388—2008 中规定了使用气相色谱法测定婴幼儿奶粉中三聚氰胺的

基金项目: 内蒙古自治区关键技术攻关计划项目 (编号: 2021GG0361); 内蒙古自治区直属高校基本科研业务费项目

通信作者: 燕芳 (1980—), 女, 内蒙古科技大学教授, 硕士生导师, 博士。E-mail: 0472yanfang@163.com

收稿日期: 2024-01-15 改回日期: 2024-05-29

方法和要求,但成本高昂,效率较低,具有破坏性,无法实现在生产线上的快速和实时监测。

太赫兹 (THz) 的光谱范围处于微波和红外之间,其波谱具有安全性高、穿透力高、能量低等优点,在食品等行业中作为一种快速、无损可靠的分析方法具有巨大的潜力^[5-6]。胡军等^[7]使用太赫兹光谱结合 PLS、LS-SVM 和 BPNN 方法测定了面粉中苯甲酸浓度。结果表明, BPNN 模型效果最优,其预测相关系数为 0.994 5,预测均方根误差为 0.66%,表明太赫兹光谱结合 BPNN 在定量检测上较 PLS 与 LS-SVM 更为有效。郭以恒等^[8]使用多种回归模型预测奶粉中三聚氰胺浓度,其中 LSSVR 的效果更好,通过群智能算法优化后的 LSSVR 模型精度有所提高,可实现基于太赫兹时域光谱技术对奶粉中非法添加剂三聚氰胺的定量检测。马卿效等^[9]结合太赫兹时域光谱和机器学习算法,研究了食品添加剂混合物的定量分析。结果表明,非线性模型 LS-SVM 和 BPNN 在多元混合物定量分析中具有优势,验证了太赫兹光谱在此方面的应用潜力。Sun 等^[10]使用太赫兹光谱技术和广义回归神经网络 (GRNN) 方法,对小麦面粉中的苯甲酸添加剂进行了定量分析, GRNN 模型预测集相关系数为 0.85,均方根误差为 0.1%。综上,太赫兹时域光谱技术结合机器学习方法对食品添加剂定量检测具备可行性,以上研究大多使用传统机器学习算法,而传统机器学习算法在大数据集上的表现较差,而且大多只能处理有限复杂度的非线性关系。

目前,课题组已利用太赫兹光谱技术结合量子化学理论分析,解析了三聚氰胺的吸收峰,但用其对奶粉样本中三聚氰胺进行定量检测时出现了精度不高的问题。太赫兹光谱与卷积神经网络相结合的方法,相比于其他机器学习方法,卷积神经网络在太赫兹光谱定量分析中通过自动学习特征和适应非线性关系,可提高对奶粉中三聚氰胺的定量检测精度。研究拟使用透射式太赫兹时域光谱系统对奶粉与三聚氰胺混合物进行光谱测试,获取 0.4~2.4 THz 频率内的吸收系数;从吸收谱数据预处理方法以及算法角度对奶粉中三聚氰胺定量检测模型进行优化,分别建立 PLS 回归模型、LS-SVM 回归模型、BPNN 回归模型和 CNN 回归模型,并对比模型的性能,旨在探索出最优的预测模型以满足后续的定量检测需求。

1 材料与方 法

1.1 试验仪器与设备

聚乙烯 (PE)、三聚氰胺 (Mel): 纯度 >99%, 阿拉丁试剂 (上海) 有限公司;

品牌奶粉: 市售;

透射式太赫兹时域光谱系统: TPS1000 型, 太赫兹波的产生和探测方式为光电导天线结构法, MaiTaiHP 钛—蓝宝石飞秒激光器输出用以产生和探测太赫兹波的超快红外激光, 激光中心波长设定为 800 nm, 激光器红外光平均功率为 2.95 W, 脉冲宽度低于 100 fs, 重复频率为 79.3 MHz, GaAs (砷化镓) 晶体为太赫兹波辐射源, 系统频

带范围为 0.3~2.8 THz, 美国 Bruker Corporation 公司。

1.2 样品制备及数据采集

采用压片法制备样品, 将称量后的样品于玛瑙研钵中研磨成粉末后放入压片机中, 在 5 MPa 压力下将样品压制成直径 13 mm, 厚约 1.35 mm 的圆形样片, 将制作好的样片放入干燥箱内保存待测。按上述方法依次制备 28 组 (包含质量浓度分别为 0%, 1%, 2%, 3%, ..., 20%, 共计 21 组训练集和质量浓度分别为 2%, 6%, 9%, 11%, 15%, 17%, 共计 7 组测试集) 不同质量浓度梯度的奶粉和三聚氰胺的混合样品以及 3 组奶粉和三聚氰胺单质样品, 每种质量浓度均制备 3 个样片, 共得混合样片 84 个, 采用 K-S 算法将样品按 3:1 比例划分为训练集和预测集, 用于后续建模 (见表 1)。每个样片均再次制备两组重复样片, 将 3 个样片的测试数据取平均值后得到该物质最终的太赫兹光谱数据, 总采集 252 条混合片吸收谱数据用于后续建模与定量分析研究。

表 1 0~20% 三聚氰胺掺杂奶粉样品的数据统计

Table 1 Data statistics of melamine-adulterated milk powder samples at 0~20% concentration

数据集	样品数	样品质量浓度范围/%
训练集	63	0~20
测试集	21	2, 6, 9, 11, 15, 17, 19
合计	84	

经过太赫兹时域光谱系统获得样片的时域信号后, 根据 Dorney 等^[11-12]提出的光学参数提取模型, 结合快速傅里叶变换 (FFT) 计算样片的折射率与吸收系数^[13], 如式 (1)、式 (2) 所示。

$$n(\omega) = \frac{\varphi(\omega)c}{\omega L} + 1, \quad (1)$$

$$\alpha(\omega) = \frac{2}{d} \ln \left\{ \frac{4n(\omega)}{\rho(\omega)[n(\omega) + 1]^2} \right\}, \quad (2)$$

式中:

$n(\omega)$ ——样片的折射率;

$\alpha(\omega)$ ——样片的吸收系数;

$\varphi(\omega)$ ——相位差, rad;

d ——厚度, mm;

c ——光速, m/s;

$\rho(\omega)$ ——样品信号和参考信号的振幅比。

1.3 光谱校正处理

对太赫兹时域光谱数据进行校正平滑处理可以提高信噪比^[14], 为后续定量分析奠定良好的基础。分别采用 S-G 平滑、R-Loess 平滑、高斯滤波、滑动平均平滑方法对试验获取的吸收谱数据进行校正处理。

S-G (Savitzky-Golay) 平滑是一种多项式拟合方法^[15], 如式 (3) 所示, 通过在每个数据点周围的窗口内拟合多项式来实现平滑。与 S-G 平滑不同, R-Loess 平滑 (局部加权

散点平滑)的核心思想是在每个数据点周围的局部区域内进行加权多项式回归^[16],并进行数据拟合,其权重计算如式(4)所示。

$$\hat{y}_i = \sum_{j=-n}^n c_j x_{i+j}, \quad (3)$$

$$W_{ij} = \frac{K(d_{ij}/h)}{\sum_{k=1}^n K(d_{ik}/h)}, \quad (4)$$

式中:

- \hat{y}_i ——在位置 i 处的平滑值;
- x_{i+j} ——滑动窗口内的数据点;
- c_j ——S-G 滤波核的系数;
- W_{ij} ——权重;
- K ——核函数;
- d_{ij} —— x_i 与 x_j 之间的距离;
- h ——带宽。

高斯滤波是使用高斯函数作为卷积核,对信号进行卷积操作^[17],以减小噪声,其数学表达式见式(5)。滑动平均平滑则通过计算每个数据点及其周围数据点的平均值来减小噪声^[18],其数学表达式如式(6)所示。

$$G(x, y) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} e^{-\frac{x^2+y^2}{2\sigma^2}}, \quad (5)$$

$$f(t) = \frac{X_{t-1} + X_{t,f} + X_{t+1,f} + \dots + X_{t+n-1,f}}{n}, \quad (6)$$

式中:

- $G(x, y)$ ——高斯滤波核的值;
- x, y ——像素坐标;
- σ ——高斯核的标准差;
- $f(t)$ ——在时间点 t 处频率维度上的滑动平均值;
- $X_{t,f}$ ——在时间点 t 处、频率 f 处的原始数据值;
- n ——滑动窗口大小。

1.4 算法原理

PLS 模型结合了主成分分析和线性回归方法^[19],通过提取代表预测变量和响应变量关系的潜在变量来建立回归模型,实现对高维数据的降维处理和响应变量的预测。与 PLS 模型不同,LS-SVM 是通过 Kernel 方法将输入映射到高维特征空间进行线性回归^[20],并用最小二乘法求解模型参数,从而实现简单高效的非线性回归,其数学表达式如式(7)、式(8)所示。

$$y(x) = w^T * \varphi(x) + b, \quad (7)$$

$$L = \frac{1}{2} * \sum (y(x_i) - t_i)^2, \quad (8)$$

式中:

- $y(x)$ ——预测的输出标签;
- w ——权重向量;
- $\varphi(x)$ ——输入特征 x 的非线性映射函数;
- b ——偏置项;
- L ——损失函数。

BPNN 是一种多层前馈神经网络^[21],其通过前向传播

计算网络输出并计算均方误差损失函数,然后利用后向传播算法更新网络参数以最小化损失函数,经过迭代训练可以对新样本进行前向计算以输出回归预测结果。图1为简单的BP神经网络拓扑结构,其中包含1个输入层、2个隐含层和1个输出层。

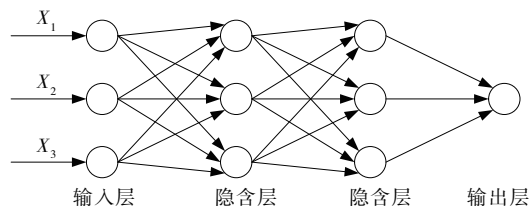


图1 BPNN 拓扑结构图

Figure 1 BPNN topology diagram

CNN 通过卷积层提取特征、池化层提高鲁棒性、全连接层综合特征进行回归^[22],使用均方误差等作为损失函数,并采用梯度下降和反向传播算法训练模型参数,迭代优化后得到能对新样本进行回归预测的卷积神经网络。图2为卷积神经网络结构图。

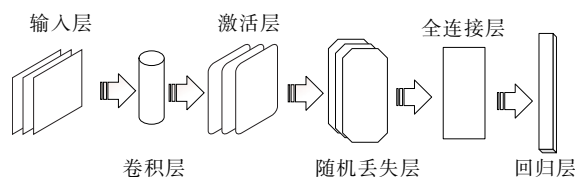


图2 CNN 结构图

Figure 2 CNN structure diagram

在回归问题中,CNN 通常包含输入层、卷积层、激活层、随机丢失层、全连接层和回归层。卷积层主要用于从输入数据中提取特征,卷积操作如式(9)所示。

$$Y = f(X * W + b), \quad (9)$$

式中:

- X ——卷积层的输入;
- Y ——输出;
- W ——卷积核;
- b ——偏置;
- f ——激活函数;
- $*$ ——卷积操作。

其中,激活层的作用为引入非线性;Dropout 层用于随机丢弃一部分神经元,以防止过拟合;全连接层将所有输入连接到输出,每个输入均与输出相连,如式(10)所示。最后的回归层用于进行回归任务,输出一个连续值。

$$Y = f(X * W + b), \quad (10)$$

式中:

- X ——输入(即卷积层的输出);
- Y ——输出;
- W ——卷积核;
- b ——偏置;

f ——激活函数。

2 结果与分析

2.1 奶粉与三聚氰胺及其混合物的太赫兹光谱吸收特性

根据朗伯比尔定律,太赫兹吸收谱中吸收峰强度与样品中物质质量浓度成正比,说明可以通过太赫兹吸收谱实现物质浓度的定量分析。由图3可知,纯奶粉单质在1.48 THz处存在较为明显的吸收峰,三聚氰胺单质分别在2.01,2.26 THz处存在较为明显的两个吸收峰,二者混合物的吸收谱分别在1.48,2.01,2.26 THz处存在吸收峰。奶粉与三聚氰胺混合物的吸收峰包含了奶粉和三聚氰胺单质的吸收峰,且吸收峰强度随着混合物中三聚氰胺质量浓度的增加而增大,说明通过太赫兹吸收谱分析来定性及定量分析奶粉中存在的三聚氰胺是完全可行的。

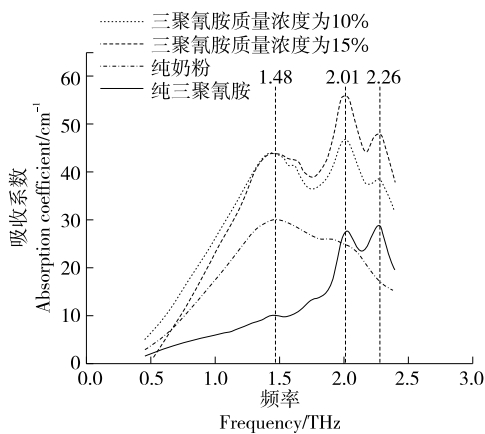


图3 奶粉和三聚氰胺单质以及不同浓度的三聚氰胺与奶粉混合样片吸收谱

Figure 3 Absorption spectra of pure milk powder, pure melamine, and mixtures of milk powder adulterated with melamine at different concentrations

2.2 混合样片的太赫兹光谱校正

图4中右下方子图为三聚氰胺单质样片在0.4~2.4 THz范围内的原始吸收谱与经过4种平滑处理后的吸收谱对比,为了便于对比各平滑方式的处理效果,将各条平滑后的曲线均向上平移2个单位。由图4可知,各平滑处理方法对吸收谱曲线的趋势并无影响,仅减小了吸收谱中的基线及噪声等干扰因素的影响,更利于后续的精确定量分析。对奶粉与三聚氰胺混合物的太赫兹光谱数据进行S-G平滑后建立的PLS模型训练集 R_c 为0.998 1,预测集RMSEC为0.467%;预测集 R_p 为0.997 1,预测集RMSEP为0.551%,说明经S-G校正处理后的数据更适合建立预测模型。

2.3 回归模型建立及定量预测结果对比分析

2.3.1 回归模型的建立 在建立回归模型进行预测前,由于数据维度过高,先使用主成分分析(PCA)进行降维,

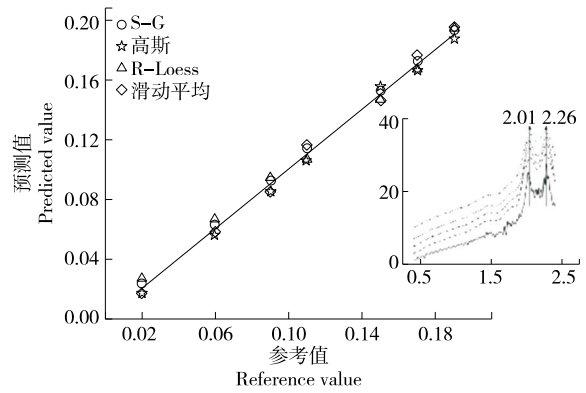


图4 PLS建模预测结果

Figure 4 Results of PLS modeling and prediction

为了确定最佳累计贡献率的阈值,分别选择累计贡献率达到80%,85%,90%,95%的主成分数结合回归模型进行交叉验证。由图5可知,当选择累计贡献率达到95%的主成分数时,模型精度最高。后续使用同样的交叉验证方法进一步验证80%,85%,90%,95%阈值在BPNN、CNN回归模型中的表现,当选择累计贡献率达到95%的主成分数时,各模型精度均为最高。

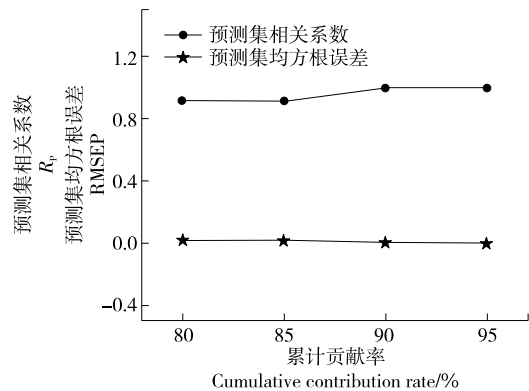


图5 不同累计贡献率下的LS-SVM模型预测精度比较

Figure 5 Comparison of prediction accuracy of LS-SVM model under different cumulative contribution rates

试验基于PLS的线性回归模型的建模思路是通过分解和投影数据,以较少的主成分来预测输入变量和输出变量之间的关系。在其他3种非线性模型中,LSSVM回归模型使用RBF核函数,并使用留一法寻找最优的参数,以优化模型性能。试验建立的BPNN回归模型包含两个隐含层,在训练参数设置方面训练周期数为1 000、目标误差为 $5e-3$ 、学习率为0.01。在建立的CNN回归模型中,首先对数据进行归一化处理,构建了一个包含卷积、批归一化、Relu激活、Dropout和全连接层的神经网络结构,在神经网络模型训练中,利用SGD(随机梯度下降)算法,设置最大迭代次数为1 200次,每次迭代使用的迷你批次大

小为 40,初始学习率为 0.01,且学习率在训练过程中会进行分段式调整,学习率下降周期为 400,下降因子为 0.1,对训练集进行训练,最终进行模型的评估与预测。

2.3.2 预测结果对比分析 由图 6 可知:4 种模型均能准确性检测出奶粉中的三聚氰胺,且均具有较好的定量预测能力。PLS 回归模型的表现相对不佳,其预测集相关系数为 0.997 1,预测集均方根误差为 0.551%,可能是作为线性回归模型 PLS 难以捕捉数据中复杂的非线性关系,导致预测性能下降。在其他 3 种非线性模型中,CNN 回

归模型的预测性能表现最优,其预测集相关系数为 0.998 7,预测集均方根误差为 0.374%。这得益于 CNN 通过卷积层、激活层和全连接层的堆叠,可以构建深层非线性模型以更好地拟合非线性关系。此外,LS-SVM 回归模型的精确度优于 BPNN 回归模型,可能是 LS-SVM 具有更高的鲁棒性,能够更好地处理数据中各种因素的干扰。总体而言,相较于其他 3 种模型,CNN 算法回归模型在基于太赫兹光谱的定量预测方面精度最高,更加满足奶粉中三聚氰胺含量的精确定量检测需求。

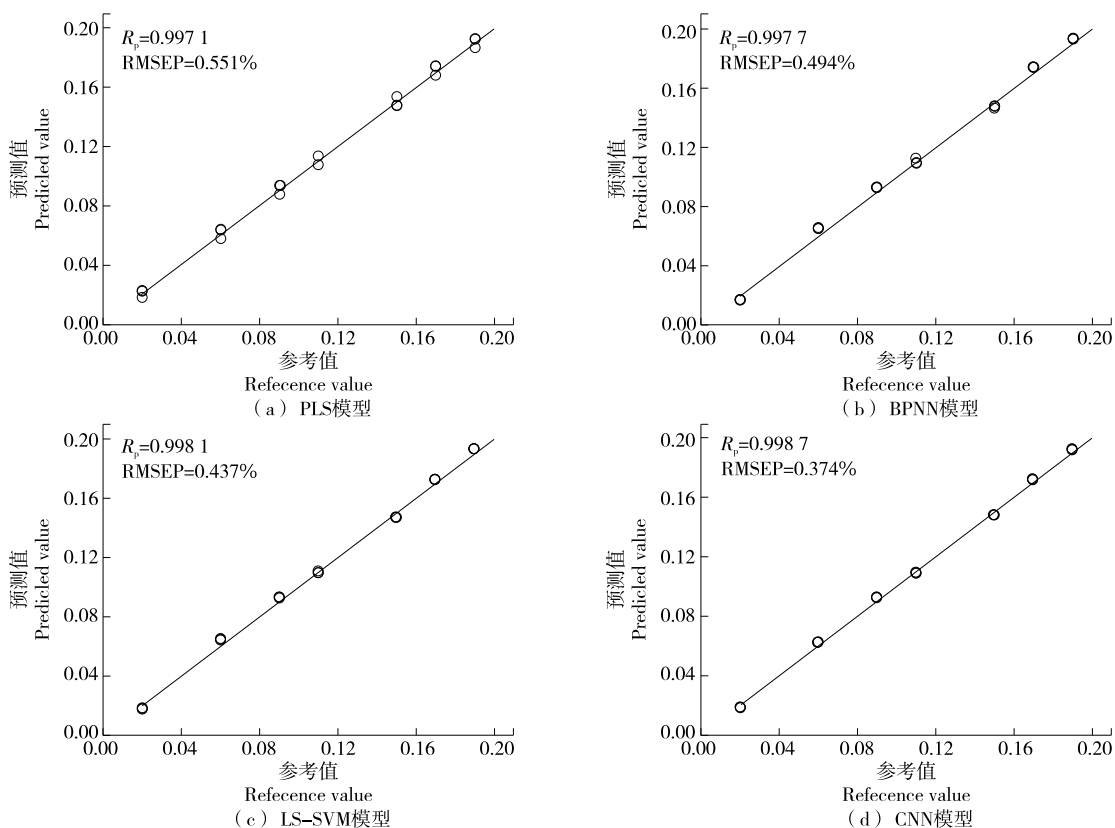


图 6 4 种回归模型的预测结果

Figure 6 Prediction results of four regression models

3 结论

以奶粉中的非法添加剂三聚氰胺为研究对象,采用机器学习与太赫兹光谱技术相结合的方法,建立了一种无损、定量检测奶粉中三聚氰胺含量的方法。结果表明,经 S-G 平滑处理后,建立的偏最小二乘回归模型的预测集相关系数为 0.997 1,预测集均方根误差为 0.551%。在此基础上,分别基于偏最小二乘、最小二乘支持向量机、反向传播神经网络、卷积神经网络建立了 4 种回归模型,其中卷积神经网络回归模型的预测效果最好,其预测集相关系数为 0.998 7,预测集均方根误差为 0.374%,说明卷积神经网络回归模型更适用于奶粉中三聚氰胺含量的检测。后续研究可着力于扩大奶粉样品数据集,加强在多

变环境下的测试,以提高模型泛化能力及灵敏度,确保检测能力达到低于法规限量的要求,并定期融入新技术与策略,持续优化算法与模型,以实现预测精度和效率的持续提升。

参考文献

- [1] 吕镭麟,何洪源,贾镇,等. 食品中三聚氰胺的光谱检测与分析技术研究进展[J]. 光谱学与光谱分析, 2022, 42(7): 1 999-2 006.
- LU R L, HE H Y, JIA Z, et al. Research progress on spectral detection and analysis techniques of melamine in food[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2022, 42(7): 1 999-2 006.
- [2] 伍依琪,梁志森,陈玉珍,等. 高效液相色谱法同时测定保健

- 食品中 6 种黄酮类化合物[J]. 食品与机械, 2022, 38(8): 70-75.
- WU Y Q, LIANG Z S, CHEN Y Z, et al. Simultaneous determination of six flavonoid compounds in health foods by high performance liquid chromatography[J]. Food & Machinery, 2022, 38(8): 70-75.
- [3] 边海涛, 张雨萌, 勇艳华, 等. 高效液相色谱—串联质谱法快速测定保健食品中 4 种降血糖类药物[J]. 食品与机械, 2022, 38(2): 46-50, 87.
- BIAN H T, ZHANG Y M, YONG Y H, et al. Rapid determination of four hypoglycemic drugs in health foods by high performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry[J]. Food & Machinery, 2022, 38(2): 46-50, 87.
- [4] 徐志飞, 吴宇伉, 蒋瑜宏, 等. 气相色谱质谱联用法测定白酒中 4 类风味物质[J]. 食品与机械, 2022, 38(11): 76-81, 124.
- XU Z F, WU Y K, JIANG Y H, et al. Determination of four types of flavor substances in Baijiu by gas chromatography-mass spectrometry[J]. Food & Machinery, 2022, 38(11): 76-81, 124.
- [5] HUANG S T, DENG H X, WEI X, et al. Progress in application of terahertz time-domain spectroscopy for pharmaceutical analyses[J]. Frontiers in Bioengineering and Biotechnology, 2023, 11: 1219042.
- [6] DATTA S, PRASERTSUK K, KHAMMATE N, et al. Terahertz spectroscopic analysis of lactose in infant formula: implications for detection and quantification[J]. Molecules, 2022, 27(15): 5 040.
- [7] 胡军, 刘燕德, 孙旭东, 等. 基于 BP 神经网络的太赫兹时域光谱对面粉中苯甲酸的定量检测研究[J]. 激光与光电子学进展, 2020, 57(7): 302-308.
- HU J, LIU Y D, SUN X D, et al. Quantitative detection of benzoic acid in flour based on BP neural network and terahertz time-domain spectroscopy[J]. Progress in Laser and Optoelectronics, 2020, 57(7): 302-308.
- [8] 郭以恒, 燕芳, 赵渺钰, 等. 基于太赫兹光谱的三聚氰胺定量分析[J]. 光学学报, 2023, 43(19): 297-303.
- GUO Y H, YAN F, ZHAO M Y, et al. Quantitative analysis of melamine based on terahertz spectroscopy[J]. Acta Optica Sinica, 2023, 43(19): 297-303.
- [9] 马卿效, 李春, 李天堂, 等. 基于太赫兹光谱和机器学习算法的二元及三元混合物定量分析[J]. 激光与光电子学进展, 2022, 59(19): 370-375.
- MA Q X, LI C, LI T Y, et al. Quantitative analysis of binary and ternary mixtures based on terahertz spectroscopy and machine learning algorithms[J]. Progress in Laser and Optoelectronics, 2022, 59(19): 370-375.
- [10] SUN X, LIU J, ZHU K, et al. Generalized regression neural network association with terahertz spectroscopy for quantitative analysis of benzoic acid additive in wheat flour[J]. R Soc Open Sci, 2019, 6(7): 190485.
- [11] DORNEY T D, BARANIUK R G, MITTLEMAN D M. Material parameter estimation with terahertz time domain spectroscopy[J]. Journal of the Optical Society of America A, 2001, 8(7): 1 562-1 571.
- [12] DUVILLARET L, GARET F, COUTAZ J L. Highly precise determination of optical constants and sample thickness in terahertz time-domain spectroscopy[J]. Applied Optics, 1999, 38(2): 409-415.
- [13] 于洋, 张朝晖, 赵小燕, 等. 表面粗糙样品的太赫兹光谱参数提取方法研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2022, 42(2): 386-391.
- YU Y, ZHANG Z H, ZHAO X Y, et al. Research on terahertz spectral parameter extraction method for surface rough samples [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2022, 42(2): 386-391.
- [14] 胡军, 徐振, 李茂鹏, 等. 基于神经网络算法与太赫兹光谱检测技术的奶粉三聚氰胺含量测定[J]. 激光与光电子学进展, 2020, 57(22): 370-377.
- HU J, XU Z, LI M P, et al. Determination of melamine content in milk powder based on neural network algorithm and terahertz spectroscopy detection[J]. Progress in Laser and Optoelectronics, 2020, 57(22): 370-377.
- [15] 宁鸿章, 谭鑫, 李宇航, 等. 空一谱维联合 Savitzky-Golay 高光谱滤波算法及其应用[J]. 光谱学与光谱分析, 2020, 40(12): 3 699-3 704.
- NING H Z, TAN X, LI Y H, et al. Spatial-spectral joint Savitzky-Golay hyperspectral filtering algorithm and its application[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2020, 40(12): 3 699-3 704.
- [16] SAEED A, HAMIDZADEH R M. Robust data smoothing algorithms and wavelet filter for denoising sonic log signals[J]. Journal of Applied Geophysics, 2022, 206: 104836.
- [17] FU H Y, GUO J W, YU Y J, et al. A simple multi-scale Gaussian smoothing-based strategy for automatic chromatographic peak extraction[J]. Journal of Chromatography A, 2016, 1 452: 1-9.
- [18] AL-MBAIDEEN A A. Application of moving average filter for the quantitative analysis of the NIR spectra[J]. Journal of Analytical Chemistry, 2019, 74(7): 686-692.
- [19] 李扬. 最小二乘法、 ϵ -支持向量回归机与最小二乘支持向量回归机的对比研究[D]. 上海: 华东师范大学, 2019: 8-13.
- LI Y. Least squares method ϵ -comparative study of support vector regression machine and least squares support vector regression machine[D]. Shanghai: East China Normal University, 2019: 8-13.
- [20] DAN S. NIR spectroscopy fruit quality detection algorithm based on the least angle regression model[J]. International Journal of High Performance Systems Architecture, 2020, 9(2/3): 128-135.
- [21] MA Q X, TENG Y, LI C, et al. Simultaneous quantitative determination of low-concentration ternary pesticide mixtures in wheat flour based on terahertz spectroscopy and BPNN[J]. Food Chemistry, 2022, 377: 132030.
- [22] 王璨, 武新慧, 李恋卿, 等. 卷积神经网络用于近红外光谱预测土壤含水率[J]. 光谱学与光谱分析, 2018, 38(1): 36-41.
- WANG C, WU X H, LI L Q, et al. Convolutional neural network for near-infrared spectroscopy prediction of soil moisture content[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2018, 38(1): 36-41.