

中药质量的人工神经网络评价方法

中国科学院上海冶金研究所(200050) 蔡煜东* 宫家文 程兆年 陈念貽

摘要 提出中药质量的人工神经网络评价方法,并对中药厚朴按其气相色谱分析得到的各组分相对含量,运用该方法作了尝试,成功率达100%。结果表明,神经网络方法性能好,可望成为中药质量评价的有效手段。

关键词 厚朴 人工神经网络 反向传播模型

中药所含化学成分复杂,其疗效有时是由几个成分协同作用,所以只凭某一有效成分含量多少确定其质量是不够科学的。但逐一提取、分离、结构测定及含量分析,是麻烦、困难的。近年来文献^[1,2]报道,避开化学成分分离鉴定,运用数学方法分析对中药进行化学测量得到的数据,以评价中药质量,取得较好效果。

本文对中药厚朴经气相色谱分析后得到的样品组分的相对含量^[2],运用人工神经网络对这些样品进行分析和评价,建立了中药厚朴质量评价的计算机智能专家系统。有关这方面的研究工作尚未见报道。

1 人工神经网络——“反向传播”模型

人工神经网络(ANN)是80年代中期迅速兴起的一门非线性科学,它在模式识别、数据处理及自动化控制等领域已得到了初步的应用,取得了很好的效果^[3]。

1985年,美国MIT的PDP(并行分布处理)小组提出的“反向传播”模型是近年来用得最多的网络之一(图)。它具有很强的自组织、自适应能力,通过对有代表性例子的学习、训练,能够掌握事物的本质特征,许多问题都可由它来解决,例如XOR问题, T-C匹配,对称性判断等^[3],目前对神经网络的研究热潮,B-P模型是起了重要作用的模型之一。

设 $T(p,j)$ 、 $O(p,j)$,分别是第 p 个样本的期望输出与实际输出,则B-P网络学习算法为:

$$\Delta p W(j,i) = \eta \cdot D(p,j) \cdot O(p,j),$$

例1 $O(p,j)$ 为输出节点的输出时, $D(p,j) = F'[\text{NET}(p,j)] \cdot [T(p,j) - O(p,j)]$

例2 $O(p,j)$ 为隐蔽层节点的输出时, $D(p,j) = F'[\text{NET}(p,i)] \cdot \sum W(m,j) \cdot O(p,m)$

其中, $F' = F \cdot (1-F)$, $F = 1.0 / [1 + \exp(-x)]$

此处, $W(j,i)$ 是某层的第 i 个节点与上一层第 j 个节点间连线的权, $O(p,j)$ 是第 j 个节点的输出, $\text{NET}(p,j) = \sum W(p,j) \cdot O(p,j)$ 是第 j 个节点收到的信息总和, $D(p,$

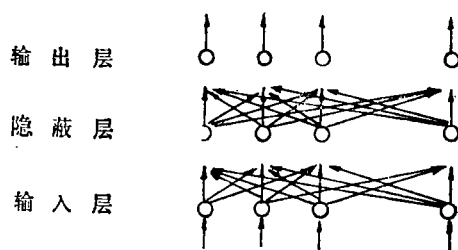


图 反向传播网络

*Address: Cai Yudong, Shanghai Institute of Metallurgy, Chinese Academy of Sciences, Shanghai

j) 是第j个节点的输出误差, $\eta > 0$ 是增益。

这样一个网络的学习过程, 就是一个网络的权系数的自适应、自组织过程, 经过多次训练后, 网络具有了对学习样本的记忆、联想的能力。

2 应用与讨论

2.1 研究实例: 文献[2]报道了不同产地的厚朴样品共12种, 经专家用植物分类学方法确认, 见表1。

表1 厚朴样品产地及品种

序号	产地	品种	序号	产地	品种
1	沈阳药材采购站提供	厚朴	7	四川	厚朴
2	沈阳药材采购站提供	凹叶厚朴	8	湖北宜昌	厚朴
3	湖南	厚朴	9	湖北鹤峰	厚朴
4	浙江金华	厚朴	10	湖北宜都	厚朴
5	云南怒江	大叶木兰	11	湖北利川	厚朴
6	湖南龙山	厚朴	12	湖北宜恩	厚朴

根据厚朴样品的质量, 将其分为3类:

第1类: 正品厚朴、质量较高。第2类: 正品厚朴、质量较低。第3类: 厚朴代用品。

将其中8个样品作为神经网络的“学习”教材, 以其特征变量(样品各组分相对百分含量)作为输入。将3类样品的期望输出依次定为“0.9, 0.1, 0.1”(第1类); “0.1, 0.6, 0.1”(第2类); “0.1, 0.1, 0.9”(第3类)。神经网络的隐蔽层含8个单元, 训练集的收敛度为0.001。经过学习, 神经网络能完全正确地识别这些样品, 误判率为零, 建立了样品各组分相对含量与其质量之间的复杂对应关系见表2。

表2 8个“训练”样本

组分 序号	a	b	c	d	e	类别	神经网络学习结果		
1	0.11	0.04	1.6	0.0	2.32	1	0.900136	0.089251	0.105523
2	0.33	0.09	2.09	0.0	0.34	1	0.904633	8.095887	8.101279
3	0.60	0.15	2.92	0.0	0.42	1	0.898447	8.092695	0.114018
5	0.08	0.12	1.68	0.86	2.38	3	0.104981	8.102783	0.899831
7	0.04	0.11	1.46	0.0	0.28	1	0.906961	8.105066	0.092765
8	0.00	0.00	1.08	0.00	0.33	2	0.107725	8.898943	0.098401
9	0.04	0.00	0.78	0.00	0.70	2	0.109273	0.896686	0.098353
11	0.09	0.04	1.64	0.00	1.83	1	0.890786	0.097559	0.101976

为了考验所建立的模型, 将待测的4个样品作为“未知”样品, 由已掌握了知识信息的神经网络进行评价, 结果见表3。可见, 评价结果与实际情况完全一致。

表3 4个“未知”样本

组分 序号	a	b	c	d	e	神经网络预测结果			预测类别	实际类别
4	0.35	0.11	1.64	0.0	0.28	0.900559	0.104597	0.097790	1	1
6	0.18	0.05	2.28	0.00	2.13	0.901169	0.084736	0.112101	1	1
10	0.04	0.00	1.12	0.00	0.93	0.133143	0.867304	0.100082	2	2
12	0.04	0.00	1.22	0.00	1.23	0.263603	0.732728	0.093121	2	2

2.2 神经网络的容错能力：神经网络模型中，知识信息采取分布式存储，个别单元损坏不会引起错误，因此用神经网络进行预报识别容错能力强，可靠性高。

本研究中，将神经网络最后一个隐节点（隐蔽层第8个神经元）删去，即相关权重置为零，得到的神经网络模型记为模型B，原来的模型记为模型A，对4个“未知”样本的评价见表4。可见，神经网络具有较强的容错、抗干扰能力。

2.3 评价速度：训练好的神经网络在对未知样本进行评价时仅需作少量的加法和乘法，因此评价速度快。如果做成专用硬件或用并行机则速度更快。

表4 个别神经元损坏对网络性能的影响

神经网络A的预测结果			预测级别	神经网络B的预测结果			预测级别
0.900559	0.104597	0.097790	1	0.968387	0.036847	0.359765	1
0.901169	0.084736	0.112101	1	0.968595	0.029427	0.395605	1
0.133143	0.867304	0.100082	2	0.341896	0.681578	0.365709	2
0.263603	0.732728	0.093121	2	0.447673	0.673080	0.347405	2

3 结语

神经网络以其高度的识别能力，比较适合于中药质量的评价。其评价准确率高，容错能力强，速度快。如果能结合中药药理指标进行分析，则结果更客观。

可以预料，随着神经网络理论的进一步发展，可望开辟中药质量评价的新途径。

参 考 文 献

1 苏薇薇，等. 沈阳药学院学报，1988，5（2）：89

2 王 玺，等. 沈阳药学院学报，1990，71（1）：5

3 尹红凤，等. 人工神经网络原理，1990，3（1）：1

4 欧兴长，等. 药学通报，1984，19（7）：37

(1993-03-01收稿)

(上接第186页)

计算式：

$$\text{含量}(\%) = \frac{C \times V \times D}{W} \times 100\%$$

式中W为样品重量

(mg)，C为样品葡萄糖浓度(μg/ml)，V为采样量(ml)，D=10.00

2 讨论与小结

2.1 本法的原理为多糖在强酸作用下水解生成单糖，并迅速脱水成糠醛，糠醛与酚性物质如苯酚缩合成有色化合物。用分光光度法在适当波长处测定多糖含量，本法简便易行，灵敏度高，最低检出量为0.5μg/ml。

2.2 本法应特别注意操作中酸的加入方式。将酸直接加到溶液表面产生的颜色较沿容量瓶壁加入产生的颜色深，故笔者用前者加法。

2.3 配制好的5%苯酚溶液应冷藏避光保存，否则以苯酚-浓硫酸作空白时颜色变深，影响测定。

2.4 应用蒽酮法分别测定样品含量并与本法进行对照，其中P₃含量无法测出，故笔者认为对于油松果多糖的含量测定，苯酚-硫酸法优于蒽酮法。

参 考 文 献

1 张永恒，等. 中草药，1987，18（9）：13

2 朱立文，等. 中成药研究，1987（6）：11

3 冯青然，等. 中药通报，1988，13（11）：36

4 李满飞，等. 中草药，1990，21（10）：10

5 李向高，等. 中药通报，1987，12（6）：40

6 贺正全，等. 中药材，1987（3）：40

7 李铁林，等. 分析化学，1982，10（5）：272

(1993-06-02收稿)

the content of baicalin in this preparation. As a result of stability test, the shelf life at 25°C is estimated to be 1.97 years.

(Original article on page 182)

Studies on Effective Compositions of Pinecone Ⅱ. Determination of Polysaccharides in Cone of Chinese Pine (*Pinus tabulaeformis*)

Li Haozhi, Lu Yongjun, Bai Gang, et al

Quantitative determination of polysaccharides in pine cones by phenol-sulfuric acid method was studied, and the effects of concentration of phenol-sulfuric acid and reaction temperature on color formation were investigated. It was found that the absorbance is linearly correlated to polysaccharide concentrations between 10~78μg/ml ($r=0.9999$). The analytical recovery was 99.8%, CV% was 1.2% and the minimal detectable concentration was 5μg/ml.

(Original article on page 185)

Artificial Neural Network Method for Quality Estimation of Traditional Chinese Medicine

Cai Yudong, Gong Jiawen, Cheng Zhaonian, et al

An artificial neural network method for quality estimation of traditional Chinese medicine was suggested, and quality of Hou-Po was estimated by the proposed method in comparison with the analytical results of gas-liquid chromatography. The successful rate reached 100%. The results showed that the neural network method is reliable, and therefore may be referred to as an effective technique for the quality estimation of traditional Chinese medicine.

(Original article on page 187)

Protective Effect of Paeonol Against Ischemia Reperfusion Damage in Cardiac Mitochondria Membrane of Rats

Zhang Weiguo and Zhang Zhishan

60mg/kg·d ip, of paeonol were given to rats for 15 days. The myocardial ischemia reperfusion injury model was produced by occluding the left coronary artery and releasing the occlusion in rats. This significantly decreased myocardial Ca^{++} -ATPase activities and CH/PL radical, FFA content, improved mitochondrial membrane fluidity and kept them away from oxygen free radical damage. These results indicated that paeonol has membrane protective effect on myocardial ischemia reperfusion injury probably by inhibiting the oxygen free radicals and subsequent lipid peroxidation.

(Original article on page 193)

An Inquiry into Preparing Diarrhea Model of Mice and Application of Diarrhea Index

Zhou Gannan, Hu Zhihua, Wang Yaxian, et al

In Order to screen antidiarrhea drugs, the standard operation of mice diarrhea model replicated with leave of *Cassia angustifolia* vahl was introduced. In experiments, diarrhea index expressed with loose stool incidence rate multiplied by loose stool grade was used as main index. It thoroughly mirrors indi.