

• 中药现代化论坛 •

支持向量机与中药研究

龙 伟¹, 刘培勳¹, 曾 平², 徐 阳¹

(1. 中国医学科学院 清华大学医学部北京协和医学院 放射医学研究所, 天津 300192;

2. 湖南商学院 图书馆信息部, 湖南 长沙 410205)

摘 要:近年来越来越多的人工智能技术开始在中药研究领域得到应用并取得令人鼓舞的成果。支持向量机是近十余年发展起来的人工智能技术, 包含了最大间隔超平面、Mercer核、凸二次规划、稀疏解和松弛变量等多项技术, 它的出现弥补了以往技术的不足并表现出很强的发展与应用潜力。中药现代化研究完全可以借助支持向量机的研究成果开创一片新的天地。尽管如此, 支持向量机在中药研究领域的应用仍然不多见, 一方面可能与支持向量机理论正处在发展上升的阶段有关, 另一方面则可能是由于该项技术在中药研究的这片处女地上埋藏着巨大应用潜力, 尚未引起人们的足够重视。总结近年来支持向量机在中药研究领域应用的基础上, 讨论目前存在的问题, 展望未来的发展趋势, 探讨可能的应用方向, 并以此激励更多的研究力量参与其中。

关键词:支持向量机; 中药; 分类; 识别; 预测

中图分类号:R28 **文献标识码:**A **文章编号:**0253-2670(2008)10-1441-05

Support vector machine and Chinese materia medica research

LONG Wei¹, LIU Pei-xun¹, ZENG Ping², XU Yang¹

(1. Institute of Radiation Medicine, Chinese Academy of Medical Sciences and Peking Union Medical College,

Medical College of Tsinghua University Tianjin 300192, China; 2. Information Center of Library,

Hunan Commercial College, Changsha 410205, China)

Abstract: Recently more and more artificial intelligent technologies have been applied in the researches of Chinese materia medica (CMM) and some results have been gained. Support vector machine (SVM) is a new artificial intelligent technology that has been developed in the latest ten years, including a lot of technologies, such as the largest interval hyperplane, Mercer's nuclear, convex quadratic programming, sparse solution, slack variable and so on. Comparing to the previous ones, this technology is more advanced and has powerful potential development and application worth. The modernization studies of CMM will probably approach a new way to thrive based on the development of SVM. At this time some farsighted researchers have been studying on it. However, the application of SVM in CMM research is not widespread. This may point to the fact that the theory of SVM is developing. On the other hand, the importance of SVM, as a powerful tool to CMM research, has not been realized. This article is trying to summarize the current application of SVM in CMM researches. Its potential application in the future has been discussed and more researchers who could participate in this study will be expected.

Key words: support vector machine (SVM); Chinese materia medica (CMM); classification; identification; prediction

中药是中华民族的瑰宝, 在世界科技相互交融却又相互竞争的今天, 继承与发扬中华民族所特有的文明成果显得弥足珍贵。我国的中药现代化研究几十年来取得了丰硕的成果, 但是一些关键问题仍

然没有得到解决, 中药研究与国际接轨某种程度上依然还显得不够。近年来, 中医中药复杂性、系统论的思想得到广大认同, 但是如何将理论付诸现实, 是迫切需要解决的问题。众所周知, 复杂体系、系统论

收稿日期: 2008-05-05

基金项目: 科技部科研院所研究开发专项基金(2004EG136193)

作者简介: 龙 伟(1979-), 男, 湖南益阳人, 硕士, 研究方向为计算机辅助药物设计。

Tel/Fax: (022)85683042 E-mail: longway_long@yahoo.com.cn

的研究必须借助数学工具,而现代计算机技术的迅猛发展为此提供了绝佳的机会。越来越多的人工智能技术开始在中药研究领域得到应用并取得令人鼓舞的成果。支持向量机是最近十余年发展起来的人工智能技术,它的出现弥补了以往技术的不足并表现出强大的发展与应用潜力。中药现代化研究完全可以借助支持向量机的研究成果开创一片新的天地,而国内一些颇有远见的科研人员已经并正在努力。尽管如此,支持向量机在中药研究领域的应用仍然不多见,一方面可能与支持向量机理论正处在发展上升的阶段有关,另一方面则可能是由于该项技术在中药研究的这片处女地上埋藏着巨大应用潜力尚未引起人们的足够重视。本文在总结近年来支持向量机在中药研究领域应用的基础上,讨论目前存在的问题,展望未来的发展趋势,探讨可能的应用方向,并以此激励更多的研究力量参与其中。

1 支持向量机

支持向量机(support vector machine, SVM)是一种人工智能技术的机器学习新方法,能非常成功地处理回归问题以及模式识别与分类等诸多问题,用于数据挖掘,并可推广于预测和综合评价等领域。20世纪60年代末Vapnik等^[1]开始致力于统计学习理论的研究,20世纪90年代随着该理论的成熟,诞生了SVM。SVM是机器学习领域若干技术集大成者,它包含了最大间隔超平面、Mercer核、凸二次规划、稀疏解和松弛变量等多项技术,在许多具有挑战性的应用中取得了迄今为止最优的结果。与传统方法基于经验风险最小化原则不同,SVM以结构风险最小化为目的,追求模型的预测性能和泛化能力,从而能够较好地解决小样本、非线性、高维数和局部最小等实际问题,因此成为20世纪90年代末发展最快的研究方向之一。到目前为止,SVM已被成功地应用到语音识别、灾害控制、手写体辨别、金融风险评估、基因微阵列分类及蛋白质空间结构预测等诸多模式识别领域中^[2]。进入21世纪后,SVM开始在药物研究领域得到应用,且研究成果与日俱增。最近几年,SVM开始应用于中药研究,包括药材识别、复方组方、方剂识别、中药制剂工艺优化、中药化学性质预测等。

SVM包括支持向量分类(support vector classification, SVC)和支持向量回归(support vector regression, SVR)。SVC主要应用于模式识别与分类以及差别分析等;SVR主要用于数据的拟合并产生回归模型,用于相关预测等。

1.1 SVC:假设有一个两类样本的分类问题,已知有一组样本 $\{x_i, y_i\}, i=1, \dots, n, x_i \in R^d, y_i \in \{-1, +1\}$,分类问题的目的就是找出一个决策函数,使得对于给定的向量能够准确判断其分属于哪一类。如果两类样本属于线性可分,则存在一个最优的超平面,可以将两类样本分布在这一超平面的两侧。SVC的基本思想就是找到这样一个超平面,使两类样本实现最大的分离,即最优超平面。最优超平面就是要求超平面不仅可以使两类无错误地分开,而且要使两类间隔最大。超平面的方程可表示为 $w \cdot x + b = 0$ 。而构造最优超平面的问题转换为如下的约束优化问题:

$$\min \Phi(w) = \frac{1}{2} \|w\|^2 = \frac{1}{2} (w^T w) \\ s. t. y_i (x_i \cdot w + b) \geq 1, i=1, \dots, n$$

以上两个公式的含义是在满足第二式的条件下,求解第一式的最小值。余下公式以此类推。其中 w, b 两个参数来自超平面方程。

然后,将原问题转换为如下凸二次规划的对偶问题:

$$\max \sum_{i=1}^n a_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n a_i a_j y_i y_j (x_i^T x_j) \\ s. t. \sum_{i=1}^n a_i y_i = 0, a_i \geq 0, i=1, \dots, n$$

a_i, a_j 为Lagrangian乘数

根据Kuhn-Tucker条件,这个最优解还必须满足:

$$a_i [y_i (w^T x_i + b) - 1] = 0 \quad (1)$$

该对偶问题存在唯一最优解,令最优解为 a_i^* ,则 $w^* = \sum y_i a_i^* x_i, b^*$ 可由式(1)求解,由此可得最优分类函数: $f(x) = \text{sgn}(\sum y_i a_i^* x_i^T x + b^*)$ 。对于线性不可分情况,可引入非负的松弛变量。具体求解方法和求线性可分的情况类似。若在原始空间中不能得到满意的分类效果时,则可通过非线性变换 Φ 将输入空间映射到高维空间,在高维空间求得最优线性分类超平面。具体实现方法是通过定义适当的核函数 $K(x_i, x_j) = \langle \Phi(x_i) \cdot \Phi(x_j) \rangle$ 来代替最优分类平面中的点积 $x_i^T x_j$,此时优化函数和差别函数中的点积也随之改变。对于多类分类问题,有多种实现方式,目前常用的是一对一或一对多两种。

1.2 SVR:支持向量回归与支持向量分类思想类似,即通过一个回归超平面 $y = (w \cdot x) + b$ 最佳拟合空间中的样本。它通过事先确定 ϵ 来控制算法大致希望达到的精度,其主优化问题是:

$$\min \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^n (\xi_i + \xi_i') \\ s. t. (w^T \Phi(x_i) + b) - y_i \leq \epsilon + \xi_i \\ y_i - (w^T \Phi(x_i) + b) \leq \epsilon + \xi_i'$$

$$\xi_i, \xi_j^* \geq 0, i=1, \dots, n$$

其中 ξ_i, ξ_j^* 为松弛变量, C 为惩罚参数, 主要在提高泛化能力和减小误差之间起调控作用。

转换为对偶问题:

$$\begin{aligned} \max \quad & \sum_{i=1}^n y_i (a_i - a_i^*) - \epsilon \sum_{i=1}^n (a_i + a_i^*) \\ & - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (a_i - a_i^*) (a_j - a_j^*) K(x_i, x_j) \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^n (a_i - a_j) = 0, 0 \leq a_i, a_i^* \leq C \end{aligned}$$

判别函数: $f(x) = \sum (a_i - a_i^*) K(x_i, x) + b$

SVM 通过将数据映射到特征空间并计算其内积, 是满足 Mercer 条件的核函数。目前, 在 SVM 中使用的核函数的形式主要有 4 种:

线性核 $K(x, x_i) = x \cdot x_i$

多项式核 $K(x, x_i) = (a_1 x + a_2)^d$

径向基函数(RBF)核 $K(x, x_i) = \exp(-\gamma \|x - x_i\|^2)$

Sigmoid 核 $K(x, x_i) = \tanh(a_1 x + a_2)$

其中 x, x_i 是特征空间中的支持向量; d 为多项式的幂; γ 为 RBF 核的核参数; a_1, a_2 为常数。

2 SVM 在中药研究中的应用现状

2.1 中药材识别: 中药材产地、真伪的识别在现今中药材市场鱼目混杂的环境下显得尤为重要。以往以经验判断为主的传统方法在市场运作模式下越来越力不从心。利用 SVM 的分类功能对中药材光谱数据进行分类以达到药材识别目的的方法已开始受到重视。

刘沐华等^[3]采用 Ronan Collobert 的 SVM Torch 支持向量机多类分器进行中药材的红外光谱分类, 对来自 4 个不同产地的 269 个白芷样本和 6 个不同产地的 380 个丹参样本进行了产地鉴别。白芷和丹参样本的产地鉴别的准确率分别达到 99.6% 和 99.2%, 鉴别野生和栽培丹参的准确率达到 97.8%。

汪劲等^[4]采用 RBF 支持向量机对玄参及其赝品草乌和川乌的傅里叶变换红外光谱的扫描数据进行分类, 从而鉴别玄参药材的真伪, 实验结果达到很高的精确度。

张录达等^[5]通过 SVM-近红外光谱法建立了大黄样品真伪识别模型。将大黄各样品粉末的傅里叶变换近红外漫反射光谱进行一阶求导, 利用一阶导数光谱 4 000~8 000 cm 的 1 037 个数据点进行主成分分析, 提取了 15 个主成分。以 33 个建模样品的 15 个主成分信息作为 SVM 学习的输入因子, 选取 3 种核函数通过 MATLAB 语言设计 SVM 建模分析程序。所建 SVM 识别模型对学习集的正确识别率为 100%; 对 70 个预测样品, 选择不同的核函数有相同的识别结果。除去 5 个有争议样品, 正品全部识别正

确, 伪品识别大部分正确, 样品识别的准确率为 96.77%。

从以上实例不难看出采用 SVM 的分类方法对中药材进行鉴别的精确度都很高, 而且具有自动识别的特点, 方法具有推广性。但是同时也应该看到目前的 SVM 方法均局限于红外光谱数据的分类, 未来其对中药材的鉴别须基于更宽、更广的技术支持, 如紫外光谱数据的分类鉴别、中药指纹图谱的分类鉴别等, 并采用多方法识别的模式加强识别精度。

2.2 中药复方识别: 中药复方是中医治病用药的主要实现方式, 中药复方的研究在整个中药研究领域起着举足轻重的作用。从古至今中华民族通过实践积累了大量有效的中药复方, 如何对这些复方进行识别与分类, 如何在前人的基础上开发新的有效复方, 是十分重要的课题。

孙燕等^[6]采用 SVM 应用软件 CMSVM, 以 RBF 作为核函数, 对《伤寒论》中的方子按主从方进行分类识别建模, 参与建模的数据是由随机抽取的 25 个桂枝汤的加减方及麻黄汤类方、小青龙汤、大青龙汤、葛根黄芩黄连汤等共 35 个样本数据组成, 最优模型交叉验证的正确率为 94.29%。用训练建立的最优模型对 5 个未参与训练建模的桂枝汤类方和 8 个白虎汤加减方进行识别, 正确率达 100%。除此之外, 他们还将研究范围扩展到从不同的角度如方剂的主治征、治法、病历等对《伤寒论》方进行训练学习建模, 实现对方剂的模式识别^[7]。

蔡从中等^[8]根据大量的文献资料, 收集并整理出一套多味传统中药复方, 作为 SVM 的正样本, 通过计算机随机产生负样本。利用传统中药的性味归经特点, 构建出复方草药的特征向量, 并结合中药配伍禁忌和妊娠禁忌, 利用 SVM 机分别对 4 味、5 味、6 味、7 味、8 味、9 味和 10 味复方进行分类, 得到了较好的分类效果。通过这种方法, 可以在一定程度上有效区分正、负样本, 即有效药方和无效药方。另一方面, 特别是被预测为假阳性的随机负样本有可能是迄今为止人们尚未发现的新药药方, 有进一步研究的价值。

新加坡国立大学 Wang 等^[9]运用 SVM 的方法也进行了同样的尝试。他们通过用 575 个名方作为正样本。1 961 个不同的中药单味药随机组合方作为负样本进行训练, 然后测试训练模型, 72 个名方正测试集测试准确率为 73.6%, 5 039 个假复方负测试集测试准确率为 99.9%。并对近年来新报道的有效复方 48 个进行测试, 阳性率为 68.7%。

以上研究说明采用SVM对中药复方剂模式和有效性进行识别是可行的。但是,目前的研究深度还不够,复方模式的识别与分类应更倾向实用性,而对复方有效性识别的精度也需要提高。

2.3 中药制剂工艺参数优化:中药制剂是中药现代化的重要内容,其工艺参数的优化对药品质量、降低成本以及中药走向国际市场都起着决定性的作用。一些国内科研工作者利用支持向量机技术探索了中药制剂工艺参数的优化。

朱恒民等^[10]从中药提取工艺的历史数据中,挖掘确定提取参数的相关知识,用于指导工艺人员选择正交试验的影响因素及各因素水平。他们搜集整理出110条中药的提取工艺数据,每条数据包含有关提取信息的8个属性,即溶媒量、提取时间、提取次数、溶媒类别、药的功效、性味、药用部位和正交试验考核指标。采用决策树ID3算法和SVC算法,构建了提取次数的分类器;采用SVR算法分别为提取时间和溶媒量建立了回归预测模型。实验结果表明,尽管ID3算法的结果可理解性较好,但SVC算法有更高的精度,SVR算法建立的预测模型更加可靠。

李军等^[11]利用软件LIBSVM详细推导了滴丸含水量的SVM建模,较好地预测了滴丸含水量,给出了各工艺参数取值范围。理论分析和仿真结果表明,与BP神经网络建立的软测量模型相比,SVM具有学习能力强、泛化能力好、对样本的依赖程度低等优点,较好地跟踪了滴丸含水量的变化趋势,显示出其在中药工艺研究领域中巨大的应用潜力。

2.4 中药化学性质的预测:化合物可以形成聚集体,这种分子聚集体可能对靶点具有复杂抑制活性。在中药中已经发现这种现象,为了进一步研究这种现象,黄钦等^[12]采用SVM方法对分子的聚集情况建立了预测模型,使用筛选出的10个有效的描述符,通过留一法所建立的预测模型具有较好的预测能力,对训练集和测试集的预测准确率达到89.6%和90.4%。用这个模型对中药有效成分三维结构与性质数据库(CHDD)的分子进行了预测,数据库的9 820个分子中,有6 024个分子形成聚集体,这可能有助于解释中药治疗机制,特别是对复杂疾病和慢性疾病的治疗机制的阐释。最后,对预测结果验证,发现该模型对一些常见的中药成分可以正确进行预测。研究表明,这个模型具有良好的预测能力,并且具有稳定性以及良好的推广能力。这个模型被用于对中药有效成分三维结构与性质数据库(CHDD)中的分子的预测。

运用SVM对中药化学性质进行预测是一项非常有开创意义的工作,除了中药聚集体之外,将来很有可能将其推广至更多中药化学性质的预测与研究。

2.5 中药化学成分的构效关系研究:袁福星等^[3]用SVR方法研究了48个黄酮类化合物的醛糖还原酶抑制活性的定量构效关系,建模过程中利用留一法交叉验证优化了核函数的类型、惩罚系数和不敏感函数,所建模型最终采用了227个变量中的7个,所得SVM模型的预测相对误差为0.062 2,小于多元线性回归和偏最小二乘法以及文献报道模型的预测相对误差。

菊酯类化合物最初是从除虫菊中提取得到的具有杀虫功效的天然化合物。刘太昂等^[14]将SVC方法用于醚菊酯类似物构效关系的研究,所用分子描述符为物理化学参数,包括该类化合物的两个取代基的Hammett常数 σ_A 、 σ_B ,摩尔折射 M_A 、 M_B ,疏水值之和 Π 。建立了醚菊酯类似物生物活性预报的SVM预报模型,其留一法交叉检验的预报正确率为90.3%。将支持向量机的预报结果与主成分分析(PCA)、人工神经网络(ANN)、最近邻算法(KNN)的预报结果进行比较,所得SVM的预报正确率高于PCA、ANN、KNN的结果。

到目前为止,SVM已经被认为是研究药物构效关系的又一个有力手段,这对于中药化学成分的药效预测也是一个不可多得的工具,它对推动中药化学的研究具有一定的作用。

3 未来应用方向展望与探讨

3.1 用于中药复杂系统的研究:如今中医学是复杂性科学的观点已得到大多数人的认同,而中药复方是中医治病的主要方式,中药复方的气味合和、君臣佐使、辨证施药、随症加减的特点无不透射出其本身固有的复杂性^[16~17]。中药尤其是中药复方由于其本身所特有的复杂性与系统性,使得一般还原论的科研方法很难对其做出科学合理的分析与判断。SVM具备坚实的数学基础,在解决问题时不回避事物固有的复杂性,而其分类与回归的方法又十分适于系统论的研究,这些都说明SVM与复杂系统有着天然的联系,用于中药复杂体系的研究将在不久的将来得到实现。

3.2 用于中药药性物组学的研究:中药药性理论是中医药理论的精髓,是中华民族乃至世界的宝贵财富,对中药药性理论加以现代诠释,让全人类共享中华文明的成果,是当务之急。本实验室在几十年中药研究的基础上率先提出了“中药药性物组学”的新概

念,认为中药药性物组学是研究中药药性物质组成、作用及其相互关系的科学,它又可分为四气物组学、五味物组学、归经物组学、毒性物组学和比较药性物组学。一种物质组学的研究必然基于多学科的综合与多技术的应用之上,中药药性物组学也不例外。运用SVM可以对四气物质组、五味物质组和归经物质组进行分类与识别,SVR又可以用于毒性物质组的毒性预测和比较物质组的统计测算。总而言之,由于SVM在中药研究中所表现出来的巨大应用潜力,它必然成为中药药性物组学研究的一个强有力的工具。

SVM作为一种近10年才出现的新型人工智能技术,其理论还在不断完善和发展之中,各种其他的技术正在与之相互融合,推动其向更高水平、更深程度的方向发展。同时,也应该注意到,SVM要在中药研究领域产生更深、更广的应用,需要其本身调整其架构,编写与中药研究相适应的专业软件,达成“无缝链接”,从而推动二者的相互发展。

参考文献:

- [1] Cortes C, Vapnik V. Support vector networks [J]. *Mach Learn*, 1995, 20: 273-293.
- [2] Flach P A. On the state of the art in machine learning: A personal review [J]. *Artific Intellig*, 2001, 131: 199-222.
- [3] 刘沐华, 张学工, 周 群, 等. 模式识别和红外光谱法相结合鉴别中药材产地 [J]. *光谱学与光谱分析*, 2005, 25(6): 878-881.
- [4] 汪 劲, 程存归. 傅立叶变换红外光谱的SVM快速中药鉴别 [J]. *仪器仪表学报*, 2005, 26(增刊): 710-711.
- [5] 张录达, 苏时光, 王来生. 支持向量机(SVM)在傅里叶变换近红外光谱分析中的应用研究 [J]. *光谱学与光谱分析*, 2005, 25(1): 33-35.
- [6] 孙 燕, 臧传新, 任廷革. 支持向量机分类器在中医方剂模式识别中的应用研究 [J]. *中医药管理杂志*, 2006, 14(11): 25-28.
- [7] 孙 燕, 臧传新, 任廷革, 等. 支持向量机方法在《伤寒论》方分类建模中的应用 [J]. *中国中医药信息杂志*, 2007, 14(1): 101-102.
- [8] 蔡从中, 袁前飞, 肖汉光, 等. 中药组方的计算机辅助分类与识别 [J]. *重庆大学学报: 自然科学版*, 2007, 29(10): 42-46.
- [9] Wang J F, Cai C Z, Kong C Y, et al. A computer method for validating traditional Chinese medicine herbal prescriptions [J]. *Am J Chin Med*, 2005, 33(2): 281-297.
- [10] 朱恒民, 刘文杰, 王宁生. 数据挖掘技术在优化中药提取工艺中的应用 [J]. *计算机与应用化学*, 2006, 23(3): 233-236.
- [11] 李 军, 黄海宽, 曹 琦. 基于支持向量机的中药工艺参数优化研究 [J]. *计算机工程与应用*, 2007, 43(36): 205-207.
- [12] 黄 钦, 庄 艳, 乔学斌, 等. 用支持向量机建立中药有效成分聚集体的预测模型 [J]. *物理化学学报*, 2007, 23(8): 1141-1144.
- [13] Yuan F X, Lu W C, Li G Z, et al. Using support vector regression for QSAR study on the aldose reductase inhibitory activity of some flavones [J]. *Comp Appl Chem*, 2007, 24(6): 720-724.
- [14] Liu T A, Lu W C, Zhang L M, et al. Using support vector classification for SAP of the ethofenprox analogous of pesticide [J]. *Comp Appl Chem*, 2004, 21(6): 795-799.
- [15] 龙 伟, 刘培勋, 高 静. 计算机虚拟筛选技术对“黄连解毒汤”药效物质功能分群的研究 [J]. *医药导报*, 2008, 27(1): 23-25.
- [16] 龙 伟, 刘培勋, 高 静. 现代信息技术在中药复方研究中的应用 [J]. *中国中药杂志*, 2007, 32(13): 1260-1263.
- [17] 龙 伟, 刘培勋. CADD技术在中药及复方研究中的应用探讨 [J]. *世界科学技术—中医药现代化*, 2007, 9(6): 22-24.
- [18] 刘培勋, 龙 伟. 中药药性与中药药性物组学 [J]. *中国中药杂志*, 2008, 33(13): 10-12.

《中国药学会百年史》出版发行

为庆祝我国最早成立的学术团体——中国药学会成立100周年,我会组织有关的药学史专家学者编写的《中国药学会百年史》一书,于近日由中国人口出版社正式出版发行。本书以翔实的学会史料为据,概述了地的百年辉煌发展史。全书从史学的角度,重点记录其活动史实,包括历届年会(代表大会)和相关的各种学术活动,以及各专业学术组织、各地方药学会、所主办刊物的活动概况;记载了早期创始人及历届理事会的理事长、副理事长及各个时期对药学事业做出过重要贡献的药学人物传略(201人)和百年大事记(1907~2007)。全面地反映了中国药学会的发展历史,堪称为是一本论述中国药学会的会史专著。本书可供广大药学会会员、药学科技工作者和药学史研究者参考。全书大16开本,76万字,装帧精美,每册定价人民币100.00元,中国药学会高级会员可享受8折优惠,凡需要订购者可向中国药学会组织工作部联系,并将书款、邮寄地址、邮编、收件人等详细信息一并寄至我会,我会收到书款后将发票与该书挂号寄至收件人;如银行汇款,请注明“购百年史书款”字样(我会开户银行:中国银行总行;银行帐号:00134308091001;收款单位:中国药学会)。

联系方式:北京市朝阳区建外大街四号建外SOHO 9号楼1802室 邮编:100022 电话:(010)58699270(Fax)
E-mail:cpa22@cpa.org.cn 或 cpa@cpa.org.cn

支持向量机与中药研究

作者: 龙伟, 刘培勋, 曾平, 徐阳, LONG Wei, LIU Pei-xun, ZENG Ping, XU Yang
作者单位: 龙伟, 刘培勋, 徐阳, LONG Wei, LIU Pei-xun, XU Yang(中国医学科学院, 清华大学医学部北京协和医学院, 放射医学研究所, 天津, 300192), 曾平, ZENG Ping(湖南商学院图书馆信息部, 湖南, 长沙, 410205)
刊名: 中草药 **ISTIC PKU**
英文刊名: CHINESE TRADITIONAL AND HERBAL DRUGS
年, 卷(期): 2008, 39(10)
被引用次数: 2次

参考文献(18条)

1. Cortes C; Vapnik V Support vector networks 1995

2. Flach P A On the state of the art in machine learning: A personal review[外文期刊] 2001(s1-2)

3. 刘沐华; 张学工; 周群 模式识别和红外光谱法相结合鉴别中药材产地[期刊论文]-光谱学与光谱分析 2005(06)

4. 汪劲; 程存归 傅立叶变换红外光谱的SVM快速中药鉴别[期刊论文]-仪器仪表学报 2005(zk)

5. 张录达; 苏时光; 王来生 支持向量机(SVM)在傅里叶变换近红外光谱分析中的应用研究[期刊论文]-光谱学与光谱分析 2005(1)

6. 孙燕; 臧传新; 任廷革 支持向量机分类器在中医方剂模式识别中的应用研究[期刊论文]-中医药管理杂志 2006(11)

7. 孙燕; 臧传新; 任廷革 支持向量机方法在《伤寒论》方分类建模中的应用[期刊论文]-中国中医药信息杂志 2007(01)

8. 蔡从中; 袁前飞; 肖汉光 中药组方的计算机辅助分类与识别[期刊论文]-重庆大学学报(自然科学版) 2007(10)

9. Wang J F; Cai C Z; Kong C Y A computer method for validating traditional Chinese medicine herbal prescriptions 2005(02)

10. 朱恒民; 刘文杰; 王宁生 数据挖掘技术在优化中药提取工艺中的应用[期刊论文]-计算机与应用化学 2006(03)

11. 李军; 黄海宽; 曹琦 基于支持向量机的中药工艺参数优化研究[期刊论文]-计算机工程与应用 2007(36)

12. 黄钦; 庄艳; 乔学斌 用支持向量机建立中药有效成分集合体的预测模型[期刊论文]-物理化学学报 2007(08)

13. Yuan F X; Lu W C; Li G Z Using support vector regression for QSAR study on the aldose reductase inhibitory activity of some flavones[期刊论文]-Computers and Applied Chemistry 2007(06)

14. Liu T A; Lu WC; Zhang L M Using support vector classification for SAP of the ethofenprox analogous of pesticide[期刊论文]-Computers and Applied Chemistry 2004(06)

15. 龙伟; 刘培勋; 高静 计算机虚拟筛选技术对“黄连解毒汤”药效物质功能分群的研究[期刊论文]-医药导报 2008(01)

16. 龙伟; 刘培勋; 高静 现代信息技术在中药复方研究中的应用[期刊论文]-中国中药杂志 2007(13)

17. 龙伟; 刘培勋 CADD技术在中药及复方研究中的应用探讨[期刊论文]-世界科学技术-中医药现代化 2007(06)

18. 刘培勋; 龙伟 中药药性与中药药性物组学[期刊论文]-中国中药杂志 2008(13)

本文读者也读过(10条)

1. 唐斌, 杜曦, 胡昕, Tang Bin, Du Xi, Hu Xin 基于血常规支持向量机应用于肾病模型的预测[期刊论文]-中国组织工程研究与临床康复 2008, 12(52)

2. 李超峰, 刘燕, 胡珊, 何荣, LI Chao-feng, LIU Yan, HU Shan, HE Rong 基于支持向量机的骨肉瘤X线图像中病变区域的自动识别研究[期刊论文]-医学信息学杂志 2010, 31(9)

3. [谭建奇](#), [廖贤平](#), [黄孝庭](#), [陈振洲](#) [SVM在临床医学中的应用](#)[期刊论文]-[海南医学](#)2009, 20 (9)
4. [曾明飞](#), [潘林梅](#), [朱华旭](#), [张启春](#), [郭立玮](#) [黄连解毒汤药动力学实验研究及数据挖掘技术的应用](#)[会议论文]-2008
5. [王志刚](#), [赖丽娟](#), [熊冬生](#), [吴效明](#), [WANG Zhi-Gang](#), [LAI Li-Juan](#), [XIONG Dong-Sheng](#), [WU Xiao-Ming](#) [基于AR模型和支持向量机的急性低血压预测](#)[期刊论文]-[中国生物医学工程学报](#)2011, 30 (2)
6. [张永生](#) [支持向量机在害虫预测预报中的应用](#)[期刊论文]-[现代农业科技](#)2009 (14)
7. [向昌盛](#), [周子英](#), [张林峰](#), [XIANG Chang-sheng](#), [ZHOU Zi-ying](#), [ZHANG Lin-feng](#) [支持向量机在害虫发生量预测中的应用](#)[期刊论文]-[生物信息学](#)2011, 09 (1)
8. [葛家怡](#), [周鹏](#), [赵欣](#), [刘海婴](#), [王明时](#), [GE Jia-yi](#), [ZHOU Peng](#), [ZHAO Xin](#), [LIU Hai-ying](#), [WANG Ming-shi](#) [基于支持向量机的睡眠结构分期研究](#)[期刊论文]-[计算机工程与应用](#)2008, 44 (8)
9. [杨振森](#), [李传富](#), [施俊](#), [周康源](#), [贺礼](#), [YANG Zhen-sen](#), [LI Chuan-fu](#), [SHI Jun](#), [ZHOU Kang-yuan](#), [HE Li](#) [基于SVM的前列腺超声图像病变分析](#)[期刊论文]-[中国医疗器械杂志](#)2008, 32 (6)
10. [谢松云](#), [张海军](#), [赵海涛](#), [张振中](#), [杨金孝](#), [XIE Song-yun](#), [ZHANG Hai-jun](#), [ZHAO Hai-tao](#), [ZHANG Zhen-zhong](#), [YANG Jin-xiao](#) [基于SVM的脑功能分类与识别方法研究](#)[期刊论文]-[中国医学影像技术](#)2007, 23 (1)

引证文献(2条)

1. [齐岩磊](#), [陈娟](#), [杨祺](#), [祁欣](#) [基于SVM的葛根素提取软测量系统的设计](#)[期刊论文]-[电子测量与仪器学报](#) 2012 (8)
2. [何伟](#), [程淼](#), [乔文彪](#), [田丙坤](#), [邢玉瑞](#) [证候要素及其演变规律研究方法探析](#)[期刊论文]-[中医杂志](#) 2013 (11)

本文链接: http://d.g.wanfangdata.com.cn/Periodical_zcy200810001.aspx