

模式识别及其在中药质量评价中的应用

王露露¹, 孙倩怡², 杨慧海², 张 晶^{2*}

1. 长春科技学院医药学院, 吉林 长春 130061

2. 吉林农业大学中药材学院, 吉林 长春 130118

摘 要: 近年来我国中药产业发展迅速, 但中药质量控制的方法仍不全面, 是阻碍其发展的主要因素。模式识别法于 20 世纪 80 年代引入化学研究领域, 同时也被应用于中药研究领域, 目前, 许多学者以模式识别理论为基础, 建立了多种中药的有效且科学的质量评价方法。通过对模式识别法的基本原理和方法及其几种分析技术, 如主成分分析、聚类分析、判别分析、灰色关联分析、偏最小二乘法、直观推导式演进特征投影法和人工神经网络技术等在中药质量控制及评价方面的应用进行综述, 以期模式识别法在中药质量评价中的进一步应用提供参考。

关键词: 中药; 模式识别; 主成分分析; 人工神经网络; 质量评价

中图分类号: R286.02 文献标志码: A 文章编号: 0253-2670(2016)23-4282-07

DOI: 10.7501/j.issn.0253-2670.2016.23.027

Pattern recognition and its application in quality assessment of Chinese materia medica

WANG Lu-lu¹, SUN Qian-yi², YANG Hui-hai², ZHANG Jing²

1. College of Medicine, Changchun University of Science and Technology, Changchun 130061, China

2. College of Traditional Chinese Medicinal Materials, Jilin Agricultural University, Changchun 130118, China

Abstract: In recent years, with the development of Chinese materia medica (CMM) industry, the problem of quality control method is not comprehensive. It becomes the most important factor to block the development of CMM. Many scholars look for some new methods, by which the quality of CMM could be assessed objectively and accurately. Since 1980s, the pattern recognition was introduced to the chemical field and was applied to CMM at the same time. And there were some CMM quality assessment methods based on the pattern recognition established so far. In this article, the latest research progress in the pattern recognition, basic principle, and technology, was introduced and the applications in principal component analysis, cluster analysis, discriminant analysis, grey correlation analysis, partial least squares, heuristic evolving latent projections and artificial neural networks of CMM quality assessment have been reviewed, so as to provide the reference for further studies and application in CMM.

Key words: Chinese materia medica; pattern recognition; principal component analysis; artificial neural networks; quality assessment

中药来源于自然界, 是天然的有机体, 其化学组成是复杂的体系, 具有多靶点和多作用机制的特点, 药材本身的质量受诸多因素的影响, 因具有本草学属性, 其承载品种、产地的传承沿革, 功效的延伸和更迭, 都会导致其质量的优劣差异; 产地加工和储存、炮制、提取、分离、纯化、制剂成型等制备过程中, 其化学物质的组成会发生变化, 使中药质量发生改变, 因此, 在对中药质量进行评价和

质量控制时, 仅分析一个或者几个“有效成分”, 并不能完全表现出中药的内在质量, 所以应建立更加全面和系统的评价方法对中药安全性和有效性相关的一切化学指征进行把握, 从而整体认识和评价中药质量。目前, 许多新技术方法和现代分析仪器不断运用于鉴定中药的质量, 我国中药质量标准也逐步趋于完善^[1]。模式识别是 20 世纪 60 年代发展起来的一门学科, 由于其具有对高维数据降维、分类

收稿日期: 2016-06-17

基金项目: 吉林省科技计划发展项目 (20140204063YY)

作者简介: 王露露 (1990—), 女, 在读硕士, 研究方向为天然产物化学。Tel: 13196039176 E-mail: relulu2015@163.com

*通信作者 张 晶 (1971—), 女, 硕士生导师, 教授, 研究方向为天然产物化学。Tel: 13353144693 E-mail: zhjing0701@163.com

和识别等功能^[2],在中药质量控制领域得到越来越广泛的应用。

1 模式识别简介

模式识别原指将已知信息的某一样本,按照一定的准则确定其类别属性^[3]。随着计算机技术的发展,模式识别的理论方法与计算机技术深入结合,模式识别现发展为是一门用计算机替代人对模式(所研究的系统)进行描述、分类和决策的学科^[4]。

目前主流的模式识别理论主要包括统计模式识别、模糊模式识别、句法模式识别及人工智能识别^[5]。统计模式识别发展较早、理论最为完善、应用较多,它可对大量样本进行统计分析,选取最有代表性的统计特征作为分类决策的依据。模糊模式识别是以模式信息的隶属关系为依据,建立隶属度函数,计算样本的隶属度,实现对模糊子集、模糊特征和模糊关系的分析,产生分类和决策,主要用于非标准语音的理解、字符的识别等方面。句法模式识别也被称为结构法模式识别,通过采用基元选择,根据一定的结构关系,建立相应的文法,对文法进行剖析从而分类决策,常用于细胞分析和机器翻译等领域;智能模式识别是信息时代对传统的分析方法的进一步拓宽^[4-9]。

模式识别技术应用于中药质量评价中通常被称为化学模式识别^[10],是利用现代化的分析手段,如 GC-MS、HPLC、UPLC、UV 等,获取中药复杂的化学数据,然后采用模式识别的理论方法对数据进行特征提取,进而对药材进行鉴别和分析。常用的方法包括主成分分析(principal component analysis, PCA)、聚类分析(hierarchical cluster analysis, HCA)、判别分析(discriminate analysis)和人工神经网络技术(artificial neural networks, ANNs)等,在研究过程中,一般会采用一种或者多种方法联合使用。另外,除人工神经网络技术外,其他各方法均属于传统模式识别,而人工神经网络技术是近年来刚刚兴起,被用于中药质量评价中的一种新方法,可称之为新兴的模式识别理论。

2 传统模式识别在中药质量评价中的应用进展

2.1 基于 PCA 的模式识别

中药化学成分种类丰富,且很多成分均在其药效中共同发挥作用,故综合评价中药的质量应以多个成分作为指标同时进行分析,然而多指标分析问题往往过于复杂,很难得出明确的结论。在分析中药化学成分过程中发现,其中某些成分间具有一定

的相关性^[11]。故通过 PCA 选用较少的几个综合指标,来代替原来较多的指标,这些较少的指标能综合地反映原来较多指标的信息,并且相互间独立无关,被称为原指标的主成分^[12]。

PCA 法是中药质量评价中最常用的方法之一,且较为成熟,其多与中药的化学成分分析和指纹图谱技术相结合。尚晓娜等^[13]以甘肃省内 35 批不同产地甘草样品中甘草苷、甘草素、异甘草素、甘草查耳酮 A、甘草酸和甘草次酸 6 种成分为指标,PCA 对其质量进行判别,发现野生甘草质量普遍优于人工种植品,该方法可用于甘草的质量控制。Sun 等^[14]对酸枣仁质量评价方法进行研究,采用 HPLC 指纹图谱技术结合 PCA 法,分析得 2 个主成分,累计贡献率 91.42%,可有效鉴别掺假的酸枣仁。王莉等^[15]建立了杜仲叶的指纹图谱,采用 PCA 法对 4 个不同产地 20 个批次杜仲叶的质量进行评价,并发现咖啡酸、绿原酸以及 2 个未知成分为其主要的主成分组分,可显著区别不同产地的杜仲叶。任洪耀等^[16]建立石菖蒲 GC-MS 指纹图谱,采用 PCA 法对 10 批石菖蒲质量进行分析,显示不同批次的石菖蒲之间质量存在差异,该方法可以作为石菖蒲质量控制的有效方法。

PCA 法适用于中药多种化学指标的分析,通过 PCA 法即可使复杂的多指标问题简单化,且结果准确,有说服力,但其对指标的选择以及指标的准确测定要求较严格,故在选用 PCA 法分析时,需研究人员对指标进行谨慎选择,同时需多次重复测定,以保证方法的准确性。

2.2 基于 HCA 的模式识别

目前,在研究中药的过程中,都会选取多个指标和样品,对其进行聚类,研究它们间的相互关系,建立表达这种关系的聚类计量。HCA 法是以“物以类聚”为基本原则来研究事物分类的一种多元统计分析的方法^[17],其根据客观的需要可被分为 2 种,一种是对样品聚类,另一种是对指标聚类。

马艳丽等^[18]基于 HCA 模式识别分类算法对葛根进行评估的研究中,认为分类算法优于 Bayers 判别法及经典 k 最近邻法。芮梦珏等^[19]采用 HPLC 法建立不同产地的苍术属植物水提物不同极性部位的指纹图谱,以 HCA 法探讨苍术属 7 种植物的种间亲缘关系,将其分为 4 类。谢臻等^[20]建立了广西民族药磨盘草的 HPLC 指纹图谱,通过 HCA 将 10 个批次磨盘草可分为 3 类。

目前,研究者多通过 HCA 法将不同产地、品质较接近的药材进行聚类,从而可直观地表现药材间的亲缘关系。HCA 法需要足够的样品量,故为保证结果的准确性,研究者需选择合适的样品。

2.3 基于 PCA 和 HCA 联用分析的模式识别

在判别中药质量的过程中,PCA 和 HCA 联合应用是最常见的现象,有 2 种模式:PCA+HCA 模式和 HCA+PCA 模式。

2.3.1 “PCA+HCA 模式” 该模式是指先通过 PCA 排除化学数据中微量和无效的干扰化学信息,再通过 HCA 进行分类和质量评估的工作,这种模式较常用。

韦卓纯等^[21]建立了肿节风的 UPLC 指纹图谱,通过 HCA 法可大致聚成 2 类,PCA 结果支持了 HCA 结果,为全面控制肿节风其质量提供实验依据。孙自增等^[22]对不同产地的 10 批雪菊的化学成分进行分析,采用 UV-Vis 法及电感耦合等离子体(ICP)法结合 PCA 和 HCA 的模式识别,PCA 选取了 3 个主因子,得出雪菊特征成分为 Ni、Mn、Fe、Pb、Cr、Al, HCA 将 10 批雪菊聚为 3 大类,能清晰地揭示不同产地的雪菊规律性和差异性。利用 HPLC 指纹图谱技术结合 PCA 和 HCA 的模式识别,还分别建立了磐安白术^[23]、播娘蒿^[24]、五味子^[25]、淫羊藿^[26]、黄芪^[27]等的质量评价方法,均可对药材质量评价提供有效参考。顾志荣等^[28]基于 PCA 和模糊聚类分析(FCA)法结合 ¹³C-NMR 法建立不同生长年限当归的质量鉴别方法,结果可将 27 批当归完全区分开,并提出 1 年和 2 年生的当归较相似,而与 3 年生的当归存在明显差异。盛萍等^[29]对 8 个产地 44 批多伞阿魏挥发性成分分析,采用 GC-MS 法建立指纹图谱,确定 12 个共有峰, HCA 可将样本聚为 2 类,PCA 选取 4 个主成分,表明愈创木醇可作为指标性成分评价多伞阿魏质量。刘会君等^[30]分析 3 个产地的 9 个莪术样品,采用闪蒸气相色谱(FE-GC)法,PCA 选取了 3 个主成分, HCA 当临界值大于 5 时可完全放映莪术样品的 3 个产地来源。

2.3.2 “HCA+PCA 模式” 该模式是指先依据分析得到化学数据,采用 HCA 对样品进行聚类,优选品质相似的样品作为研究对象,然后采用 PCA 对优选样品中的化学数据进行对照研究。田洪磊等^[31]对不同产区的新疆小白杏杏仁油样品脂肪酸进行鉴定,并建立了小杏仁油的 GC-MS 指纹图谱,采用

HCA 法对不同产区的 15 个小白杏杏仁油样品进行聚类,根据相似度分析选取 13 个优质的小白杏杏仁油样品,结合 PCA 法,对 13 种不同油脂成分进行研究,该方法可区分小白杏杏仁油和其他油类成分。

2.4 基于判别分析(discriminate analysis)的模式识别

判别分析又称分辨法,是可以进行统计判别和分类的技术手段,也是多变量的分析方法,其可以根据一定数量个体的一个分类变量和对应的其他多元变量间的已知信息,明确分析变量与其他多元变量间的关系,建立一个或者几个判别函数,并构建 Biplot 二元判别图^[32]。同时,利用上述数量关系和其他已知的多元变量的信息,对未知分组的样本进行判别分组。根据判别标准的不同可以将其分为最大似然法、距离判别法、Fisher 判别法和 Bayes 判别法。

杨会云等^[33]采用傅里叶红外光谱(FT-IR)技术对同一产地的 7 种不同生长年限的 68 株重楼表皮及主根木质部样品进行测试,依据逐步判别分析和 Fisher 线性判别准则建立了重楼生长年限的判别模型,训练样本回判正确率为 100%,测试样本预测正确率为 78.6%,总正确率为 95.6%。胡晓炜^[34]对 39 批试样,包括羚羊角样品和非羚羊角样品,采用逐步判别分析法对上述样品的脂类成分进行分析,建立了典型判别函数和 Fisher 判别函数,判别符合率为 100%,可有效鉴别羚羊角及其混伪品。徐爱仁等^[35]在选定的 HPLC 色谱条件下,对五味子与南五味子测定的色谱数据,均采用判别分析对所得的化学数据进行分析,前者可优选五味子的优良品种,后者可鉴别五味子与南五味子。

判别分析法多被应用于不同产地、不同年生、真伪品的中药识别,判别分析法要求样品中必须有要判别的类型,分类必须清楚,不能混杂,在判别分析中预测变量的选择一定要准确,同时也要注意使用尽可能少的预测变量,使用较少变量,节省资源的同时也能易于对结果进行解释。

2.5 基于灰色关联分析的模式识别

灰色关联分析是依据灰色系统理论所建立的分析方法,是将因素间发展趋势的相似或者相异的程度即灰色关联度,作为衡量各因素间的关联程度的一种分析手段。通过比较各因素数据序列曲线的几何形状的接近程度,来确定其联系的紧密程度。若几何形状较接近,变化趋势具有一致性,则关联度

较大,反之则较小^[36]。

段英姿等^[37]分析不同采收期柴胡多糖、总灰分、皂苷、微量元素及醇溶性浸出物的动态变化,利用灰色关联分析法对所得数据进行分析表明,8月底采收各指标关联度为 0.677 7,质量最优,5月采收关联度最小为 0.370 6,质量最差。曾颂^[38]在对半夏中的多糖、有机酸、核苷类和生物碱量进行测定及比较分析的基础上,根据灰色理论建立了基于灰色关联分析法的半夏质量评价模式。魏航等^[39]基于灰色系统理论分析了 56 批不同品种化橘红样品 HPLC 指纹图谱,结合灰色关联度理论可以准确区分毛橘红和光橘红 2 个品种,能有效控制化橘红的质量。

灰色关联分析法可用于分析中药主要化学成分,得出不同品种或等级中药的关联度,能够科学、有效地提供品种识别。灰色关联相较于一些常用的数据分析方法,如 HCA 和相似度分析,其对数据的计算量较低,可通过信息熵与范数确定权重,从而修正各特征属性的差异。

2.6 基于偏最小二乘法(PLS)的模式识别

PLS 法是化学统计分析中核心算法之一。20 世纪 60 年代被提出,在 20 世纪 80 年代被应用于化学分析^[40],其基本思想是参照不同的影响源,将分析数据分成几个区域,依据一组典型特征向量来描述每个区域,这些特征向量是初始观测变量的线性组合,对于来自不同区域的特征向量,按照预先调整的通道模型相关联;在相同的区域内,它们呈相互正交的关系^[41]。随着多元统计科学的日渐成熟,PLS 法得到了延伸,一些以 PLS 法理论为基础的,结合其他统计分析方法的新型分析手段被用于中药的质量评价中,如偏最小二乘判别分析(PLS-DA),PLS 类模型方法(PLSCM)和变量投影重要性指标法(PLS-VIP)等。

樊明月等^[42]运用近红外光谱(NIRS)技术测定砂仁中指标性成分乙酸龙脑酯的量,并采集光谱图,结合 PLS 法建立了砂仁中乙酸龙脑酯的快速定量分析模型,可决系数 R^2 为 0.992 59, RMSEC 值为 0.014 5, RMSECV 值为 0.071 4, RMSEP 值为 0.016 7。徐路等^[43]采用 NIRS 对不同牛黄样品进行分析,采用 PLSCM 法分析一定波长范围的数据,PLSCM 的训练和预测准确率均为 100%,可成功鉴别牛黄的真伪。张磊等^[44]对 5 个不同产地 86 个黄芪进行 FT-IR 分析,PLS-DA 对黄芪进行产地鉴别,

并用 PLS-VIP 法对鉴别有意义的波数进行选择,DPLS 法鉴别的正确率为 100%,FT-IR 选取 $3\ 040\sim 2\ 830\text{ cm}^{-1}$ 和 $1\ 815\sim 1\ 456\text{ cm}^{-1}$ 2 个波段。

PLS 法可用于对中药中复杂化学成分的谱图解析,可大致形容为多元线性回归分析,典型相关分析和主成分分析三者的结合,其不需要纯组分的信息,分析过程更加简便,结果更具有综合性。

2.7 基于直观推导式演进特征投影法(HELP)的模式识别

HELP 结合了 PCA 和因子分析等多种统计学方法。将 HELP 法应用于分析二维的色谱数据,采取确定二维数据的背景并进行扣除,明确体系的组分数量及各组分的选择性区域和零浓度区域,采用满秩分辨技术解析得到各个纯组分的色谱和光谱,进行定量等 4 个主要的步骤^[45],对样品的质量进行鉴别。

蒋军辉等^[46]运用 GC-MS 法检测内蒙青皮挥发油成分,HELP 法解析重叠色谱峰利用程序升温保留指数(PTRIs)辅助定性,共鉴定出 29 种挥发性成分。刘斌等^[47]采用自动质谱退卷积定性(AMDIS)系统对肾茶 GC-MS 色谱图中的包埋峰进行识别,对重叠色谱峰采用 HELP 法进行分辨,同时计算各组分的程序升温保留指数,鉴别出 32 个成分,各个成分均是对秩图解析后的纯物质,为全面了解肾茶所含挥发油成分和质量控制提供理论依据。

在采用 GC-MS、HPLC、UPLC 等技术对中药质量进行评价过程中,所得色谱图有时存在色谱峰重叠现象,导致测定结果不准确,HELP 法可解决此类问题。HELP 法在中药质量评价中应用较少,其理论相对较陌生,有待进一步开发利用。

3 人工神经网络在中药质量评价中的应用进展

人工神经网络(artificial neural networks, ANNs)是智能识别的一种,是一门新型的交叉学科,研究始于 20 世纪 40 年代,在 20 世纪 80 年代被应用于药物研究领域,至今已有 30 多年的历史,它是一种新兴的模式识别理论,其在中药的质量评价中的应用有巨大的开发潜力^[48]。从生物学观点来说,ANNs 是应用计算机模拟人脑结构及其功能,对信息进行处理;从系统观点来说,ANNs 是由大量神经元节点通过极其完善和丰富的连接而构建的自适应非线性动态系统,通过调整内部大量相互连接节点之间的关系,进而达到处理信息的目的^[49-50]。按照算法和结构不同可将人工神经网络进行分类,其中 AFNN 神经网络、ART 神经网络、

BP神经网络、RBF神经网络和MDL神经网络是在中药质量评价中应用最广泛的方法。

吕惠玲等^[51]采用傅里叶变换衰减全反射红外光谱(ATR-FTIR)法测定薏苡仁与草珠子种仁,在光谱范围为4 000~650 cm⁻¹内,选择4个吸收峰为特征向量,通过多层感知器模型结构(BPNN)法进行模式识别,网络结构是输入节点4个、隐节点6个和输出节点2个,误差、 α 值和 η 值分别为0.05、0.8、0.02,输出节点1类是薏苡仁,2类是草珠子种仁,此法可准确区分两者。张勇等^[52]使用BP神经网络法对42个不同产地的朝鲜淫羊藿样品在1 800~600 cm⁻¹波段的特征红外光谱进行分析,输入层节点为56个,输出层节点为1个,隐藏层节点为112个,将42个样品分为集安、通化和靖宇3类,正确率为95.2%。杨诗龙等^[53]对于不同储藏年限和不同品种陈皮样品,通过电子鼻技术得到气味信息,运用BP神经网络模型,网络结构输入层节点为18个,输出层节点为3个,隐藏层节点为35个,75个样品的综合识别率为96%,可有效对陈皮快速准确鉴别。姜健等^[54]运用PCA和ANNs技术对五味子的质量评价方法进行研究,选取PCA分析得到5个主成分的18个吸收峰为输入节点,输出节点为3个,隐藏节点为10,建立3层ANNs模型,识别误差为4.07%、2.56%、6.15%,方法可有效区分7个产地的五味子样品,能准确地鉴定五味子的品质。

ANNs多用于对中药的图谱和电信号的分析,其具有自学习、自组织能力,没有任何人为干预,可客观、公正的评价中药质量。在分析过程中,网络拓扑结构的选择规律及传递函数的选取相对较难,研究者应确保中药分析的方法具有较高适应性和重现性。

4 结语与展望

中药是我国的瑰宝,是千百年来无数先辈们的智慧结晶,因其具有保健功能和低副作用的特点,深受人们青睐,其在国外也越来越受欢迎。目前,如何监控中药的质量这一难题阻碍了中药的发展。就现在的研究状况来说,国内的中药质量评价方法日趋完善,但仍有不足。中药是一个复杂体,在分析其质量过程中会得到许多复杂的数据信息或者图谱信息,传统的分析方法不够全面,且误差较大,随着模式识别技术的引入,为建立更加完整和科学的中药质量评价体系提供一个新思路,作为化学

计量学的重要组成部分的化学模式识别技术,是这些数据和图谱信息处理的重要工具。经过几十年的发展,尤其是近10年,结合模式识别技术鉴别中药安全性和有效性的方法逐渐成熟,除了传统的模式识别理论得到发展,新兴的模式识别理论也不断被应用。目前,随着统计学和计算机技术的发展,许多新的模式识别方法被完善和建立,但仍未被应用到中药质量评价的研究中,故学习新的模式识别方法,并运用其鉴别中药质量是今后面临的挑战。通过不断努力,将模式识别技术进一步改善、推广,不久的将来,一定会有一个最佳的评价体系,可全面、有效的控制中药质量。

参考文献

- [1] 中国药典[S].一部.2015.
- [2] Richard G. B. Pattern recognition in chemometrics [J]. *Chemometr Intell Lab Syst Lab Inf Manage*, 2015, 149(Part B): 90-96.
- [3] Pelillo M, Scantamburlo T, Schiaffonati V. Pattern recognition between science and engineering: A red herring [J]. *Pattern Recognit Lett*, 2015, 15(64): 3-10.
- [4] David H, Assaaf G. Algorithm for data clustering in pattern recognition problems based on quantum mechanics [J]. *Phys Rev Lett*, 2002, 88(1): 18702.
- [5] Wesolowski T, Suchacz B. Classification of rapeseed and soybean oils by use of unsupervised pattern recognition methods and neural networks [J]. *Fresenius J Anal Chem*, 2001, 371(3): 323-330.
- [6] Jain A K, Duin R P W, Mao J C. Statistical pattern recognition: a review [J]. *IEEE Trans Pattern Anal Mach Intell*, 2000, 22(1): 4-37.
- [7] Manivannan S, Li W Q, Akbar S, et al. An automated pattern recognition system for classifying indirect immunofluorescence images of HEp-2 cells and specimens [J]. *Pattern Recognit*, 2016, 51(2): 12-26.
- [8] Maha A, Fatma G. H, Mustafa M, et al. Resolution enhancement of images for further pattern recognition applications [J]. *Optik-Int J Light Electron Opt*, 2016, 13(71): 484-492.
- [9] Azizi S, Awad M M, Ahmadloo E. Prediction of water holdup in vertical and inclined oil-water two-phase flow using artificial neural network [J]. *Int J Multiphase Flow*, 2016, 80(1): 181-187.
- [10] López-Soto D, Yacout S, Angel-Bello F. Root cause analysis of familiarity biases in classification of inventory items based on logical patterns recognition [J]. *Comput Ind Eng*, 2016, 93(1): 121-130.

- [11] Julien J, Cristian P. Model-based clustering for multivariate functional data [J]. *Comput Stat Data Anal*, 2014, 71(1): 92-106.
- [12] Wang C, Wen M, Bai L H, *et al.* Auto-classification for confocal back-scattering micro-spectrum at single-cell scale using principal component analysis [J]. *Optik-Int J Light Electron Opt*, 2016, 127(3): 1007-1010.
- [13] 尚晓娜, 宋平顺, 杨 锡, 等. HPLC 梯度波长法同时测定甘肃省不同产地甘草中 6 种成分含量及主成分分析研究 [J]. *中国现代中药*, 2012, 14(9): 27-31.
- [14] Sun S, Liu H L, Xu S J, *et al.* Quality analysis of commercial samples of *Ziziphi spinosae* semen (Suanzaoren) by means of chromatographic fingerprinting assisted by principal component analysis [J]. *J Pharm Anal*, 2014, 4(3): 217-222.
- [15] 王 莉, 段晓芳, 敬海英, 等. 指纹图谱和主成分分析法评价杜仲叶的质量 [J]. *华西药学杂志*, 2012, 27(2): 190-192.
- [16] 任洪耀, 王 莹, 蒋海强, 等. 石菖蒲挥发油纯化品气相色谱指纹图谱及模式识别研究 [J]. *山东中医药大学学报*, 2013, 37(2): 160-170.
- [17] Gu F, Hall P, Miles N J. Performance evaluation for composites based on recycled polypropylene using principal component analysis and cluster analysis [J]. *J Clean Prod*, 2016, 41(115): 343-353.
- [18] 马艳丽, 郑 伟, 杨跃平, 等. 一种基于聚类的模式识别技术在葛根类药材分类中的应用 [J]. *河北北方学院学报: 自然科学版*, 2011, 2(1): 48-51.
- [19] 芮梦珏, 欧阳臻, 彭华胜, 等. 基于苍术属植物水溶性成分 HPLC 指纹图谱的化学亲缘关系研究 [J]. *中国野生植物资源*, 2015, 37(3): 1-11.
- [20] 谢 臻, 马家宝, 陈 勇, 等. 广西民族药磨盘草高效液相指纹图谱及其不同产地品种的聚类分析 [J]. *中医现代化*, 2015, 17(1): 162-166.
- [21] 韦卓纯, 姚志红, 王其意 等. UPLC 结合化学计量学方法的肿节风指纹图谱研究 [J]. *中草药*, 2015, 46(6): 895-900.
- [22] 孙自增, 毕肯·阿不都克力木, 张彦丽, 等. 不同产地雪菊化学成分含量测定及模式识别研究 [J]. *中国实验方剂学杂志*, 2012, 27(15): 175-178.
- [23] 王 玲, 尹 华, 王知青, 等. 基于超高效液相色谱-安白术指纹图谱的建立及模式识别研究 [J]. *中华中医药杂志*, 2015, 30(4): 1047-1053.
- [24] Zhou X D, Tang L Y, Wu H W, *et al.* Chemometric analyses for the characterization of raw and processed seeds of *Descurainia sophia* (L.) based on HPLC fingerprints [J]. *J Pharm Biomed Anal*, 2015, 111(6): 1-6.
- [25] Liu H T, Lai H W, Jia X Y, *et al.* Comprehensive chemical analysis of *Schisandra chinensis* by HPLC-DAD-MS combined with chemometrics [J]. *Phytomedicine*, 2013, 20(12): 1135-1143.
- [26] Chen J J, Xu Y Q, Wei G Y, *et al.* Chemotypic and genetic diversity in *Epimedium sagittatum* from different geographical regions of China [J]. *Phytochemistry*, 2015, 32(116): 180-182.
- [27] 汪 祺, 郑笑为, 刘 燕, 等. 基于化学计量学分析方法黄芪药材质量评价体系的建立 [J]. *中草药*, 2015, 46(12): 1825-1829.
- [28] 顾志荣, 杨应文, 王亚丽, 等. 基于主成分分析和模糊聚类分析的不同生长年限当归 ^{13}C 核磁共振特征图谱 [J]. *中国医院药学杂志*, 2014, 34(24): 2083-2087.
- [29] 盛 萍, 唐代萍, 苗莉娟, 等. 不同产地多伞阿魏挥发油成分 GC-MS 指纹图谱研究 [J]. *中国现代应用药学*, 2015, 32(1): 30-37.
- [30] 刘会君, 陈 爽, 王 鹏, 等. 莪术药材的闪蒸气相色谱测定及其模式识别分析研究 [J]. *化学学报*, 2012, 70(1): 78-82.
- [31] 田洪磊, 张 灏, 田丰伟, 等. GC-MS 结合聚类分析和 PCA 分析用于新疆小白杏杏仁油质量控制研究 [J]. *食品工业科技*, 2013, 34(2): 87-93.
- [32] Lan R S, Yang J W, Jiang Y, *et al.* An affine invariant discriminate analysis with canonical correlation analysis [J]. *Neurocomputing*, 2012, 86(1): 184-192.
- [33] 杨会云, 刘 飞, 杨春艳, 等. 红外光谱结合判别分析对滇重楼生长年限的鉴别 [J]. *中国实验方剂学杂志*, 2015, 21(15): 35-39.
- [34] 胡晓炜. 化学模式识别与判别分析法鉴别羚羊角及其混伪品 [J]. *中华中医药学刊*, 2014, 32(2): 405-409.
- [35] 徐爱仁, 胡晓炜. 五味子与南五味子的化学模式识别与计算机辨识研究 [J]. *中国现代应用药学杂志*, 2009, 26(1): 29-35.
- [36] Li X M, Hipel W K, Dang Y G, *et al.* An improved grey relational analysis approach for panel data clustering [J]. *Expert Syst Appl*, 2015, 42(23): 9105-9116.
- [37] 段英姿, 客绍英. 不同采收期引种柴胡质量的灰色模式识别研究 [J]. *时珍国医国药*, 2015, 26(2): 456-458.
- [38] 曾 颂. 基于灰色关联分析法的半夏质效评价研究 [D]. 广州: 广东药学院, 2013.
- [39] 魏 航, 林 励, 张 元, 等. 灰色系统理论在中药色谱指纹图谱模式识别中的应用研究 [J]. *色谱*, 2013, 31(2): 127-132.
- [40] Gromski P S, Muhamadali H, Ellis D I, *et al.* A tutorial review: Metabolomics and partial least squares-discriminant analysis-a marriage of convenience or a shotgun wedding [J]. *Anal Chim Acta*, 2015, 53(879): 10-23.

- [41] Jia Q L, Zhang Y W. Quality-related fault detection approach based on dynamic kernel partial least squares [J]. *Chem Eng Res Des*, 2016, 37(106): 242-252.
- [42] 樊明月, 白 雁, 雷敬卫, 等. 近红外光谱技术结合偏最小二乘法快速测定砂仁中乙酸龙脑酯的含量 [J]. 南京中医药大学学报, 2015, 31(5): 449-452.
- [43] 徐 路, 付海燕, 姜 宁, 等. 基于偏最小二乘回归的类模型方法用于中药牛黄的真伪鉴别 [J]. 分析化学研究报告, 2010, 38(2): 175-180.
- [44] 张 磊, 聂 磊, 王唯红, 等. 红外光谱法结合化学计量学方法鉴别黄芪产地 [J]. 中国药房, 2010, 21(19): 1772-1774.
- [45] 邓聚龙. 灰理论基础 [M]. 武汉: 华中科技大学出版社, 2002.
- [46] 蒋军辉, 徐小娜, 杨慧仙, 等. GC-MS 结合 HELP 法分析青皮挥发油化学成分 [J]. 应用化工, 2012, 41(3): 515-528.
- [47] 刘 斌, 李艳薇, 刘国良, 等. GC-MS 结合化学计量学方法用于肾茶挥发油的定性分析 [J]. 药物分析杂志, 2015, 35(10): 1815-1819.
- [48] Benedetti M, Cesarotti V, Introna V, *et al.* Energy consumption control automation using artificial neural networks and adaptive algorithms: proposal of a new methodology and case study [J]. *Appl Energy*, 2016, 165(5): 60-71.
- [49] Hashad A R, Rania A H I, Sherif F, *et al.* Chitosan-tripolyphosphate nanoparticles: optimization of formulation parameters for improving process yield at a novel pH using artificial neural networks [J]. *Int J Biol Macromol*, 2014, 86(1): 50-58.
- [50] Hadi F, Muhammet U, Sebastian R N, *et al.* A novel approach for classification of loads on plate structures using artificial neural networks [J]. *Measurement*, 2016, 82(1): 37-45.
- [51] 吕惠玲, 万茶艳, 程存归, 等. ATR-FTIR 及人工神经网络分类法鉴别薏苡仁与伪品草珠子种仁 [J]. 中国药房, 2015, 26(6): 845-847.
- [52] 张 勇, 金向军, 谢云飞, 等. 基于人工神经网络的淫羊藿红外光谱的研究 [J]. 光谱学与光谱分析, 2008, 28(6): 1251-1254.
- [53] 杨诗龙, 王 瑾, 汪云伟, 等. 基于电子鼻与人工神经网络的陈皮鉴别研究 [J]. 时珍国医国药, 2015, 26(1): 112-114.
- [54] 姜 健, 杨宝灵, 苏 明, 等. 基于主成分分析和人工神经网络的五味子质量鉴定方法研究 [J]. 红外, 2009, 30(12): 39-43.