

人工神经网络在中药领域中的应用 PDF转换可能丢失图片或格式，建议阅读原文

https://www.100test.com/kao_ti2020/249/2021_2022__E4_BA_BA_E5_B7_A5_E7_A5_9E_E7_c23_249016.htm 【全文】

20世纪70年代以来，随着计算机技术的不断发展，人工神经网络（ANN）的理论与实践都得到了迅猛提高。ANN的概念来源于生物神经网络（BNN）。限于目前的理论与技术，ANN保留了脑神经网络的基本结构，反映脑神经系统的工作原理。在ANN中，记忆的信息存贮在连接权上，外部刺激通过连接通道自动激活相应的神经元，以达到自动识别的目的。因而，它是与现代计算机完全不同的系统。ANN模拟生物体中神经网络的某些结构和功能，并反过来用于工程或其他领域。1990年以来，ANN技术在中药研究领域得到了大量地应用。因为ANN是通过自学习、自组织，对电信号及图像的直接处理过程，没有任何人为干预，该技术的应用专业性不强，非中药专业研究人员也可操作。因此，应用ANN可以更客观、公正地评价中药。ANN在中药研究中的工作程序信号获取运用相关技术获取全面反映中药内在质量的电信号或图像，综合评价中药。可以用色谱法（GC、HPLC等）反映中药中化学组分状况；用光谱法反映中药中各种原子的化学环境；用显微技术（显微镜、电镜等）及其他技术反映药材的形态特征。特征提取常用的特征提取方法主要手段是傅里叶变换、小波变换、特殊函数转换和专用的图像特征提取算法等。当然，压缩后的数据经过某种规则的变换后可恢复原来的信号。检测目前应用最多的是误差逆传播网络（B-P网络）。其特点是同一层内神经元不连接，在整个信号传递中不存在

任何信号的反馈。输入层不具有运算功能，仅用来进行信号的分配和传递。隐含层和输出层的神经元具有运算功能，输出整个网络的最终运算结果。在中药材分类识别中的应用 目前，中药材的人工神经网络评价在中药研究中有许多报道，也是该技术在中药研究中较有前景的领域。1993年，蔡煜东等用B-P网络模型评价中药威灵仙的质量，采用气相色谱分析方法，对色谱峰与样品抗炎作用的复杂对应关系进行预测，预测率为100%，建立了中药威灵仙的质量评价系统。他还用B-P网络对中药厚朴的气相色谱分析得到的各组分相对含量进行分析，将12个样品分为3等，即优质厚朴、劣质厚朴及厚朴代用品，与植物学鉴定结果完全一致。张亮等用红外光谱技术，采用B-P网络对中药雷公藤和昆明山海棠浸出物进行分类识别，识别率为90%。乔延江等对不同来源的62个蟾蜍样品的高效液相图谱进行识别，结果准确、可靠。苏薇薇等以苦丁茶中20种宏量、微量元素为分类特征，对78个苦丁茶样品进行分类，所得结果和生药鉴定结果一致。笔者也对中药地榆及羌活的高效液相指纹图谱用小波变换B-P网络进行识别尝试，识别率大于95%。以上多是以光谱或色谱技术反映化学信息，中药化学成分的复杂及多样性就更要求增加训练样本。另外，对于神经网络的建立，在进行训练时应注意中药鉴定的准确性，否则将构建错误的网络系统。在中药制剂分析中的应用中药的有效性是不言而喻的。但由于中药化学成分的复杂性及有效成分的不确定性，对其进行质量控制也是中药行业所面临的重要问题之一。对于中药制剂是否按全处方投料，用现代分析方法检测极其复杂，甚至难于回答。在国际上得到认可的指纹图谱技术最近在国内得到初步推广。

但其数据处理非常烦琐、复杂。ANN为此提供了方便。张亮等运用二值自适应共振理论网络结合红光光谱技术对中药戊己丸的3个缺省药材的混合物进行识别，其识别率分别为85%、80%、90%，平均正确率为85%。可见ANN对中药制剂进行分析具有可行性。同时，科研工作者对一些化学药品的组分含量测定也有探讨，结果均良好，甚至好于其他方法。提示ANN也可以测定中药指标性成分的含量，说明它可以作为一种有前途的化学计量方法。在中药药动学、药效学中的应用药物筛选是中药新药研制的前提。ANN可以用作药物分子的药效预测，根据该化学成分的理化参数（折射率、疏水性参数、取代位的电性参数等），既可以预测有无某药效，又可预测药效的大小。另外，ANN可以对中药的药动学-药效学的相关性进行分析，能非常灵活地通过自组织、自学习等功能找到药动学参数与药效学参数之间的关系，可以把药物作用时间、剂量、浓度和代谢活性物质的浓度作为输入变量，预测药效。同时，也可以根据药效学参数预测药动学参数。这种预测精度很高，预测值与目标值的相关系数一般在0.99。当然，它不能代替生理相关性，所以还不能取代动物实验为基础的分析方法。在中药化学结构预测中的应用国外已应用ANN对化学成分的图谱（质谱、紫外光谱、红外光谱、近红外光谱、核磁共振光谱、光学折射图谱等）进行结构分析。库瑞等设计了神经网络系统用于识别判定图谱的功能团，表明该系统对某些功能团的判断正确率达94%~99.5%。除上述外，ANN还可以用于中药对照品的HPLC色谱峰纯度检查以及组方优化等。ANN方法在科学上应用越来越广泛，尽管它仍处于发展阶段，尤其是在中药研究方面应用还较少。但

相信在不久的将来，关于ANN的方法、参数、训练样本、学习过程以及预测结果都会有更加详尽的讨论。ANN在中药研究领域将会有更加广泛的应用。 100Test 下载频道开通，各类考试题目直接下载。详细请访问 www.100test.com