

王家琪, 唐千慧, 李荣强, 等. 基于双向门控单元与门控注意力卷积的近红外光谱定量分析模型[J]. 智能计算机与应用, 2025, 15(12): 74–82. DOI:10.20169/j.issn.2095-2163.25092201

基于双向门控单元与门控注意力卷积的近红外光谱定量分析模型

王家琪¹, 唐千慧², 李荣强², 邹北骥³, 刘芳², 刘青萍¹

(1 湖南中医药大学 信息科学与工程学院, 长沙 410208; 2 湖南中医药大学 药学院, 长沙 410208; 3 中南大学 计算机学院, 长沙 410083)

摘要: 近红外光谱技术在食品、农业和医药等领域的广泛应用,对光谱数据的高效与精准分析提出了更高要求。传统的近红外光谱定量分析方法在处理复杂非线性关系时存在局限。针对上述问题,本研究提出了一种融合卷积神经网络(Convolutional Neural Network, CNN)、双向门控循环单元(Bidirectional Gated Recurrent Unit, BiGRU)和门控注意力机制(Gated Attention Model, GAM)的近红外光谱定量分析模型(CBGA-Net)。该模型通过多层卷积结构提取光谱数据的局部特征,利用BiGRU模块捕捉时序依赖关系,并借助GAM增强对关键特征的聚焦与优化能力,从而提升模型的表达与预测能力。实验结果显示,CBGA-Net在谷物和柴油数据集上的预测准确率分别达到96.7%和97.5%,相较于PLS、RF、SVM、BP传统模型有显著提升。具体而言,在谷物数据集中,CBGA-Net的准确率比PLS、RF、SVM和BP分别提高了2.7%、2.5%、7.3%和5.1%;在柴油数据集中,分别提高了6.8%、7.2%、8.6%和7.4%。此外,模型的正则化和池化策略有效抑制了过拟合现象,增强了模型的泛化能力。该研究为近红外光谱定量分析提供了一种创新的解决方案,充分展现了深度学习在复杂数据分析中的潜力。

关键词: 近红外光谱;深度学习;卷积神经网络;双向长短时记忆网络;定量分析

中图分类号: TP391

文献标志码: A

文章编号: 2095-2163(2025)12-0074-09

A near-infrared spectroscopy quantitative analysis model based on bidirectional gated recurrent units and gated attention convolution

WANG Jiaqi¹, TANG Qianhui², LI Rongqiang², ZOU Beiji³, LIU Fang², LIU Qingping¹

(1 School of Information Science and Engineering, Hunan University of Chinese Medicine, Changsha 410208, China;

2 School of Pharmacy, Hunan University of Chinese Medicine, Changsha 410208, China;

3 School of Computer Science and Engineering, Central South University, Changsha 410083, China)

Abstract: The widespread application of near-infrared spectroscopy in fields such as food, agriculture, and medicine has raised greater demands for efficient and precise analysis of spectral data. Traditional quantitative analysis methods for near-infrared spectroscopy face limitations when dealing with complex nonlinear relationships. To address this issue, this study proposes a quantitative analysis model for near-infrared spectroscopy that integrates Convolutional Neural Networks (CNN), Bidirectional Gated Recurrent Units (BiGRU), and Gated Attention Mechanisms (GAM), named CBGA-Net. This model extracts local features of spectral data through a multi-layer convolutional structure, captures temporal dependencies using the BiGRU module, and enhances the focus and optimization capabilities of key features through GAM, thereby improving the model's expressiveness and predictive power. Experimental results show that CBGA-Net achieved prediction accuracies of 96.7% and 97.5% on grain and diesel datasets, respectively, showing significant improvements compared to traditional models such as PLS, RF, SVM, and BP. Specifically, in the grain dataset, CBGA-Net's accuracy improved by 2.7%, 2.5%, 7.3%, and 5.1% compared to PLS, RF, SVM, and BP, respectively; while in the diesel dataset, the improvements were 6.8%, 7.2%, 8.6%, and 7.4%. Additionally, the model's regularization and pooling strategies effectively suppressed overfitting and enhanced the model's generalization ability. This research provides an innovative solution for quantitative analysis using near-infrared spectroscopy, fully demonstrating the potential of deep learning in complex data analysis.

Key words: near-infrared spectroscopy; deep learning; Convolutional Neural Network; bidirectional long short-term memory network; quantitative analysis.

基金项目: 国家重大科技专项(2018AAA0102100);湖南省普通高等学校教学改革研究项目(HNJG-20230545);湖南省普通高等学校教学改革研究项目(HNJG-20230527);2024年湖南中医药大学研究生科研创新项目(2024CX192);湖南中医药大学本科科研创新基金(2024BKS085)。

作者简介: 王家琪(2000—),男,硕士研究生,主要研究方向:红外光谱分析,深度学习。

通信作者: 刘芳(1980—),女,博士,副教授,硕士生导师,主要研究方向:中药药理,中药分析。Email: fliu0825@126.com; 刘青萍(1982—),女,博士,教授,主要研究方向:中医辅助临床决策支持系统,数据挖掘与知识发现,人工智能。Email: liuliu@hnu.cm.edu.cn。

收稿日期: 2025-09-22

哈尔滨工业大学主办 ◆ 学术研究与应用

0 引言

近红外光谱技术 (Near-Infrared Spectroscopy, NIRS) 是一种基于波长范围为 750~2 500 nm 的近红外电磁辐射与物质相互作用的分析技术, 通过测量物质对特定波长光的吸收或反射特性, 实现对样品成分和性质的快速、无损检测^[1]。近年来, 随着仪器硬件的持续革新和数据处理方法的不断进步^[2], 红外光谱技术在食品、农业^[3]、医药^[4]、生物^[5]、化工^[6]等行业的应用愈发成熟, 展现出巨大的发展潜力。研究者们利用近红外光谱获取物质分子结构中 X-H (如 C-H、N-H、O-H) 等键的振动产生的泛频与组合频率的吸收信息^[7], 结合化学计量学^[8]方法, 实现对样本化学组成的定性和定量分析, 但在模型的预测准确度、泛化性和抗干扰能力等指标上仍存在较大提升空间。如何构建兼具高精度预测能力与强泛化性能的近红外光谱分析模型, 已成为推动该技术走向工程化应用的核心挑战。该问题既源于光谱数据与目标属性间存在的复杂非线性关系, 亟需深入解析与建模, 又涉及模型在跨样本、跨仪器条件下保持稳健性的难题, 已成为光谱分析领域中亟待突破的关键技术瓶颈。

传统的近红外光谱定量分析方法主要包括偏最小二乘法 (Partial Least Squares regression, PLS)^[9]、支持向量机 (Support Vector Machine, SVM)^[10] 和 (Back Propagation, BP) 神经网络^[11] 等。上述方法虽然可用于近红外光谱数据处理, 但在应对大规模数据时, 其预测性能均存在明显局限。具体而言, PLS 虽在线性特征拟合方面表现良好, 但对非线性关系的建模能力较弱, 从而限制其预测精度; SVM 在处理海量数据时容易出现过拟合现象, 影响模型的泛化能力; BP 模型不仅训练时间较长, 预测精度也常难以满足实际应用需求。近年来, 科学家们已经认识到了在自然语言处理和图像处理中深度学习的非凡能力^[12]。深度学习是一种处理和提取数据特征有效的方法, 目前以卷积神经网络为主的深度学习算法在红外光谱分析领域得到广泛的应用。Wang^[13] 等结合一维卷积神经网络对烟草样本中的尼古丁化学成分含量进行近红外光谱定量分析, 其决定系数 R^2 达到了 95%, 准确、快速地分析尼古丁含量来改善烟草行业的质量控制流程; 刘思岐^[14] 等利用聚类分析 (CA)、对称点阵图像分析 (SDP) 与深度学习算法 (DensetNet) 建立木材种类识别中红外光谱分析模型, 识别率可达 90%, 有效提高了中红外光谱识别木材种类的精度; Mishra^[15] 等利用卷积

神经网络和光谱预处理算法对芒果果实中干物质进行近红外光谱定量分析, 得到光谱预处理通常会降低 PLS 和 DL 模型的性能, 因此在分析与新鲜水果相关的近红外数据时, 应谨慎使用预处理方法; Zhang^[16] 等利用端到端卷积神经网络对玉米、小麦蛋白质、土壤有机碳进行近红外光谱定量分析, 端到端的卷积神经网络优于传统卷积神经网络。上述研究表明, 基于 CNN 的红外光谱分析方法仍存在预测精度低、可解释性低和稳健性差等问题。

为了解决上述问题, 本研究提出了一种基于卷积神经网络 (Convolutional Neural Network, CNN)^[17]、双向门控循环单元 (Bidirectional Gated Recurrent Unit, BiGRU)^[18] 和门控注意力机制 (Gated Attention)^[19] 的红外光谱定量分析模型 (CBGA-Net)。在模型构建中, 首先采用 CNN 对近红外光谱数据进行特征提取, 最终通过全连接层生成输出结果。在特征提取之后, 模型引入 BiGRU, 旨在解决长期依赖问题。BiGRU 通过结合前向和后向 GRU 的输出, 形成综合的上下文信息, 从而提高序列建模的效果。最后, 添加门控注意力机制对 GRU 的输出进行加权, 突出数据中重要的部分, 从而提升模型对关键特征的关注能力。综上所述, 本研究的主要贡献包括:

(1) 通过利用 CNN 提取 NIRS 数据的有效特征, 本研究确保模型能够从原始数据中获取更充分的信息。

(2) 将提取特征输入 BiGRU, 其双向结构中前、后向 GRU 分别提取对应依赖信息, 帮助模型全面理解时序特征, 增强光谱数据分类与回归能力。之后拼接各时间步前、后向 GRU 输出形成最终结果, 提升序列特征表达力, 使模型更好捕捉多样化光谱数据的复杂模式、趋势及细微变化。

(3) 通过添加门控注意力机制, 对 GRU 的输出进行加权, 突出数据中重要部分。这一创新使得模型能够更灵活地关注关键特征, 显著提高了其在复杂数据环境中对重要信息的敏感性。

(4) 研究采用谷物和柴油两组公共近红外光谱数据集进行实验, 设计了一系列实验验证了模型的有效性, 通过与 PLS、RF^[20]、SVM 和 BP 神经网络模型比较, 结果显示, 本研究模型在多个测试指标上均达到了具有竞争力的性能。

1 材料与方 法

1.1 数据来源

本研究通过 Eigenvector Research 官网收集 210

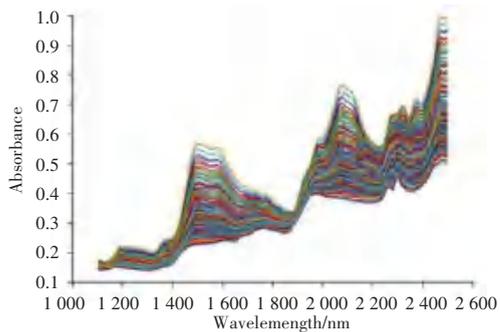
个谷物样本数据集和 395 个柴油样本数据集。谷物数据集包含近红外光谱数据及其对应的酪蛋白含量^[21], 柴油数据集包含近红外光谱数据及其总芳烃含量^[22]标注, 具体信息见表 1。谷物样本如图 1(a) 所示, 谷物光谱图与酪蛋白中氨基酸组分密切相关^[23-24], 酪蛋白含量为 4.45%~88.83%。图 1(b) 的柴油光谱图吸收峰反映芳烃中苯环类物质结构信

息^[25], 总芳烃含量为 8.30%~47.20%。

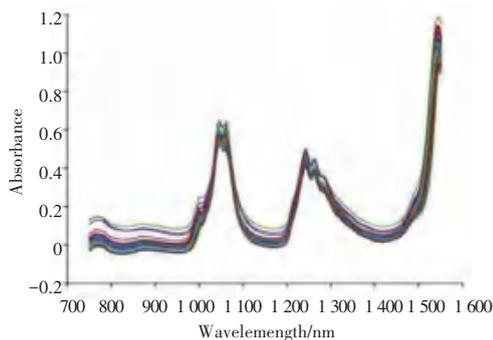
表 1 数据集中物质含量统计分布

Table 1 Statistical distribution of substance content in the data set

样本	物质	样本数/个	最大值	最小值	平均值	标准偏差
谷物	酪蛋白	210	88.83	4.45	32.57	21.44
柴油	总芳烃	395	47.20	8.30	30.74	6.75



(a) 谷物样本



(b) 柴油样本

图 1 样本的近红外光谱图

Fig. 1 Near-infrared spectrum of the sample

1.2 网络模型与结构

1.2.1 CBGA-Net 网络整体结构

CBGA-Net 模型作为一种创新的深度学习架构, 巧妙融合了 CNN、BiGRU 以及 GAM 模块, 其网络结构如图 2 所示。该模型的设计理念在于充分利

用卷积层提取局部特征的能力, 以及 GRU 层捕捉长期依赖关系的优势, 同时使用 GAM 提升模型对关键特征的关注, 从而实现更准确的预测, 特别适用于多维光谱序列。

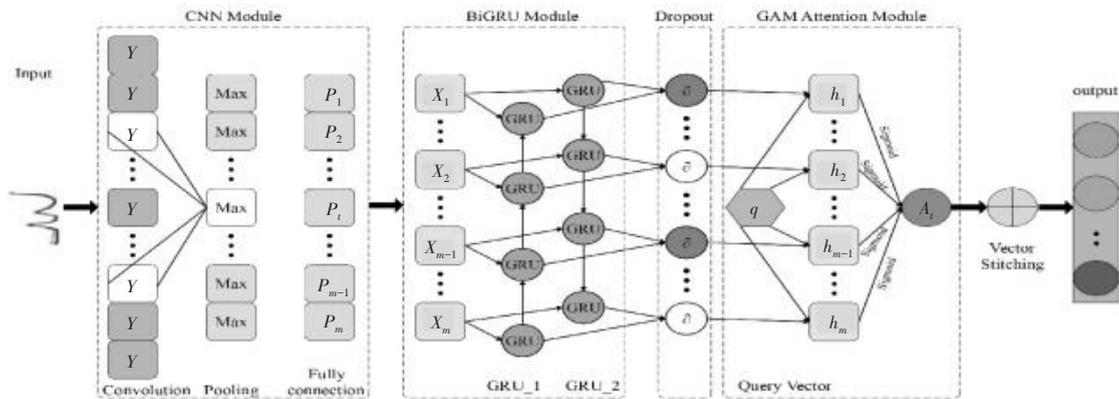


图 2 CBGA-Net 模型结构

Fig. 2 CBGA-Net model structure

模型的第一部分是一维卷积层, 首先通过引入 ReLU 激活函数增强, 再通过最大池化层有效缩减卷积层的输出尺寸。这一过程不仅显著降低了计算复杂度, 还有效预防了模型过拟合问题的出现。

随后, 池化后的输出经过重塑层进行形状调整, 以适应后续的 GRU 层, 使其符合时间序列数据的格式。在时间序列数据处理方面, 模型包含两个双向 GRU 层。第一层 (GRU_1) 具有 128 个隐藏单元, 并

设置为返回序列, 意味着其会输出每个时间步的结果, 以便传递到下一层。第二层 (GRU_2) 则具有 256 个隐藏单元, 同样返回序列, 进一步提取时间序列中的长程依赖特征。双向 GRU 的设计使得模型能够同时考虑时间序列数据的前后信息, 从而更好地捕捉数据中的动态变化和潜在模式。

在 GRU 输出之后, 模型引入了门控注意力机制层 (GAM Attention Layer), 该层使用 Dense 层来计算

门控权重,并将其应用于 GRU 的输出,确保模型在进行预测时能够关注关键输入部分。此注意力机制聚焦对最终预测结果贡献最大的光谱数据特征,既提升了模型的表现,又增强了模型的可解释性。

最终的输出经过展平层处理,将多维数据转换为一维数组,以便为全连接层的输入做好准备。全连接层负责将提取到的特征映射到输出空间,通常用于回归任务。在模型编译阶段,设置损失函数为均方误差(MSE),并使用 Adam 优化器进行训练。Adam 优化器因其自适应学习率的特性而被广泛应用,能够有效提升模型的训练效率,确保模型在较短时间内实现良好的收敛效果。

1.2.2 CNN 模块

在 CNN 的运作过程中,每一层的输出都作为下一层的输入,形成了一种逐层传递的数据流。输入数据通过卷积层、池化层和全连接层,最后输出最终的结果,通过这种逐层传递和训练的机制,CNN 能够自动地学习 NIRS 数据中的多层特征表示,有效解决了传统机器学习方法在处理多层网络训练时面临的特征提取局限性和模型复杂度的控制等难题。给定一个 NIR 数据集,其中包含 N 个样本 $x = [x_1, x_2, \dots, x_N]$,在特征编码的过程中, x 首先通过输入层输入,随后卷积层对输入数据进行局部特征提取。假设卷积核大小为 $k \times k$,输入特征为 X ,则卷积操作如下:

$$Z[j] = \sum_{i=1}^k W[i] \cdot X[j+i-1] + b \quad (1)$$

其中, W 为卷积核的权重; b 为偏置项; Z 为卷积后的输出特征。

紧接着,通过池化层对卷积输出进行下采样处理,最大池化操作如下:

$$P[m] = \max_{j \in R_m} A[j] \quad (2)$$

其中, $A[j]$ 表示应用 ReLU 的激活函数处理后的特征值, R_m 表示池化窗口覆盖的区域。最后,通过重塑层将池化后的输出重塑为适合 GRU 所需的输入形状。

1.2.3 BiGRU 模块

BiGRU 由两个独立的门控循环单元(Gated Recurrent Unit, GRU)组成,分别处理序列的正向和反向信息流。GRU 包括更新门和重置门的基本计算。设当前时刻为 t ,输入为 x_t ,隐藏状态为 h_t ,更新门(Update Gate) z_t 决定了当前时间步的隐藏状态 h_t 应该保留多少来自前一时间步的状态 h_{t-1} 以及多少

来自当前候选状态 \hat{h}_t 。其输出值范围为 $[0, 1]$,具体计算如下式,当前值为 0 时完全保留前一状态 h_{t-1} ,当前值为 1 时完全适用当前候选状态 \hat{h}_t 。

$$z_t = \sigma(W_z \times x_t + U_z \times h_{t-1}) \quad (3)$$

其中, σ 为 Sigmoid 激活函数; W_z 为输入 x_t 对应的权重矩阵; U_z 为前一隐藏状态 h_{t-1} 对应的权重矩阵。

重置门(Reset Gate) r_t 决定了前一时间步的隐藏状态 h_{t-1} 对计算候选隐藏状态 \hat{h}_t 的影响程度。具体计算如下式,当重置门值为 0 时,表示忽略历史隐藏状态,仅依赖当前输入生成候选状态;当重置门值为 1 时,则完全保留历史信息对候选状态的影响。

$$r_t = \sigma(W_r \times x_t + U_r \times h_{t-1}) \quad (4)$$

其中, W_r 为输入 x_t 对应的权重矩阵, U_r 为前一隐藏状态 h_{t-1} 对应的权重矩阵。

候选隐藏状态(Candidate Hidden State) \hat{h}_t 是根据当前输入 x_t 和重置后的前一隐藏状态的组合计算所得,用于生成最终的输出状态 h_t 。计算公式如下式:

$$\hat{h}_t = \tanh(W_h \times x_t + U_h \times (r_t \odot h_{t-1})) \quad (5)$$

其中, \odot 表示矩阵的点乘操作, $r_t \odot h_{t-1}$ 表示在计算候选状态时使用重置门的影响,只有在重置门为 1 时,前一状态的全部信息会被使用,最终隐藏状态 h_t 的计算如下式:

$$h_t = (1 - z_t) \odot h_{t-1} + z_t \odot \hat{h}_t \quad (6)$$

其中, h_t 为时间步 t 的最终隐藏状态; z_t 为时间步 t 的更新门输出值; h_{t-1} 为时间步 $t-1$ 的隐藏状态; \hat{h}_t 为时间步 t 的候选隐藏状态。

在传统 GRU 中,模型只能利用历史信息建模,无法获取未来时刻的上下文信息。考虑到本研究中的当前位移状态不仅依赖历史数据,还受到未来信息的影响,本研究采用 BiGRU 结构克服这个限制。如图 3 所示,BiGRU 通过整合正向与反向序列,增强模型对位移特征的代表能力。在 BiGRU 中,更新门、重置门和候选隐藏状态协同作用,构成一套高效的信息处理机制。更新门负责控制当前状态中历史信息的保留与更新程度,重置门用于选择性地遗忘与当前无关的历史隐藏状态信息,而候选隐藏状态则能为最终隐藏状态提供新的信息。这种门控机制使 BiGRU 能够在处理近红外光谱数据时更有效地捕捉上下文之间的依赖关系,缓解长程依赖问题,从而显著提升模型对复杂动态特征的建模能力和整体性能。

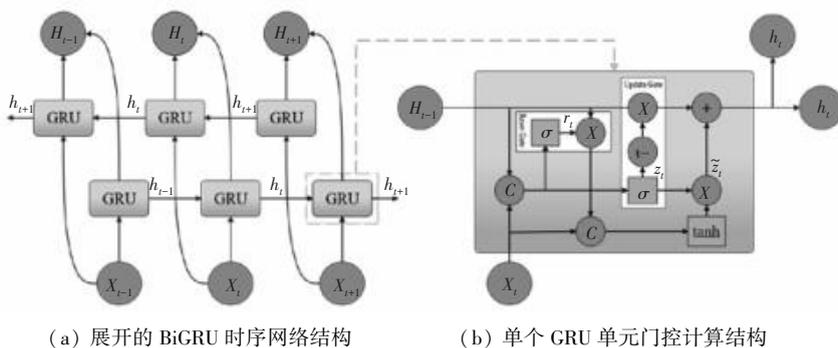


图3 BiGRU模型结构

Fig. 3 BiGRU model structure

1.2.4 GAM 模块

GAM 的主要功能是计算注意力权重,并将这些权重应用于 BiGRU 的输出,以生成更为精确的特征表示, GAM 首先根据 BiGRU 的输出,对每个位置进行注意力得分的计算,随后,借助 Sigmoid 函数将这些得分转换为合理的注意力权重。如下式:

$$\alpha_t = \text{Sigmoid}(W_t \times X + b_t) \quad (7)$$

其中, W_t 是权重矩阵; b_t 是偏置项; X 为表示 BiGRU 的输出序列。

最后,使用计算得到的注意力权重对 BiGRU 的输出进行加权求和,以生成最终的特征表示 V , 如下式:

$$V = \sum_{t=1}^T \alpha_t H_t \quad (8)$$

其中, α_t 表示对应的注意力权重, H_t 表示在时间 t 的 BiGRU 的输出。

GAM 模块具体流程如下:

算法 1 GAM 模块伪代码。

1) 获取 BiGRU 输出作为输入特征

输入 GRU 输出 H (大小为 $T \times d$)

输入 权重矩阵 W (大小为 $d \times m$)

输入 偏置 b (大小为 m)

2) 计算注意力得分

scores = []

for t in range (T):

$$\text{score}_t = H[t] \times W + b$$

scores.append(score _{t})

3) 将得分通过 Sigmoid 函数转化为注意力权重

attention_weights = []

for score in scores:

$$\text{alpha}_t = \text{Sigmoid}(\text{score})$$

attention_weights.append(alpha _{t})

4) 计算加权特征表示

$V = 0$

for t in range (T):

$$V += \text{attention_weights}[t] \times H[t]$$

5) 返回加权特征表示 V

return V

2 实验结果分析与讨论

针对谷物和柴油两个公共近红外光谱数据集进行了深入分析,分别建立了 PLS、SVM、RF、BP 以及 CBGA-Net 模型。具体的实验设计如图 4 所示。具体而言,本研究提出的模型是基于 TensorFlow^[26] 和 Ketkar^[27] 深度学习库构建,而 PLS、SVM、RF 和 BP 模型则采用了 Scikit-learn 机器学习库^[28]。

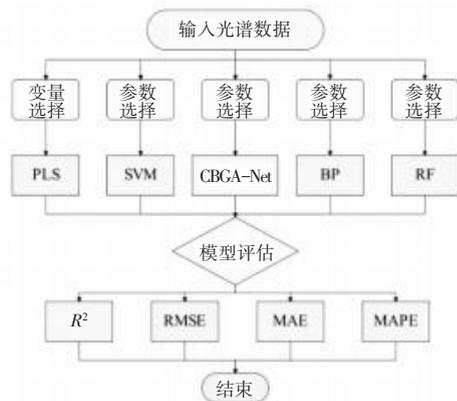


图4 实验设计

Fig. 4 Experimental design

2.1 评估指标

得到谷物蛋白和柴油的 NIR 数据矩阵。以 3 : 1 的比例将数据矩阵随机划分为一个训练集和测试集,同时以 10 倍交叉验证的方式设置验证集进行实验。采用 4 个指标评价模型的性能,包括预测 (R_p) 和交叉验证 (R_c) 的决定系数 (R^2)、预测均方根误差 (Root Mean Square Error of Prediction, RMSEP) 和交叉验证均方根误差 (Root Mean Square

Error of Cross-validation, RMSEC) 的均方根误差 (Root Mean Square Error, RMSE)、平均绝对误差 (Mean Absolute Error, MAE) 和平均绝对百分比误差 (Mean Absolute Error Percentage, MAPE)。评价指标的定义如下:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{j=1}^n (y_j - \hat{y}_j)^2}{\sum_{j=1}^n (y_j - \bar{y})^2} \quad (9)$$

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (y_j - \hat{y}_j)^2} \quad (10)$$

$$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n |y_j - \hat{y}_j| \quad (11)$$

$$\text{MAPE} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \left| \frac{y_j - F_j}{y_j} \right| \times 100\% \quad (12)$$

其中, n 表示测试集中样本的总数量; y_j 表示测试样本的实际数值; \bar{y} 是实际值中的平均值; \hat{y}_j 是模型计算的值; F_j 表示第 j 个预测值; R^2 的值在 $[0 \sim 1]$ 之间; R^2 值越接近 1, RMSE、MAE 与 MAPE 的值越小, 说明模型的性能越好, 预测越准确。

2.2 基于 CBGA-Net 模型的光谱特征波长分析

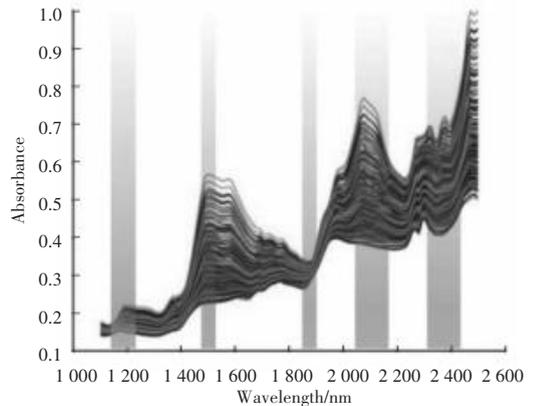
通过对 CNN 和 BiGRU 进行融合改进, 构建得到 CBGA-Net 模型。依托多层次深度学习框架实现对光谱特征的精准筛选和深度解析。其中, CNN 多层卷积结构可逐级提取原始光谱的多尺度特征, 显著增强对光谱变化的感知能力; BiGRU 则基于光谱时序特性, 通过双向建模历史与未来信息, 精准捕捉序列依赖关系, 有效提升复杂光谱数据的表征能力。为优化特征选择, 模型引入 GAM 机制动态计算特征重要性权重, 实现关键波段的自适应聚焦, 强化高贡献波长特征的表征, 进而提升光谱分析的精度与鲁棒性。

基于 CBGA-Net 模型对谷物近红外光谱特征波段分布如图 5(a) 所示, 关键波段的光谱响应与蛋白质分子结构密切相关。1 150~1 240 nm 波段为 C-H 键二级伸缩振动倍频峰, 主要反映蛋白质侧链脂肪族基团特征; 1 490~1 550 nm 波段为 N-H 键二级倍频振动, 对应蛋白质酰胺基团的特征吸收; 1 880~1 920 nm 源于 O-H/N-H 伸缩-弯曲振动合频, 与含羟基氨基酸及肽键酰胺基、碱性氨基酸氨基相关; 2 060~2 180 nm 波段包含 O-H 伸缩-弯曲合频, 反映水分或羟基氨基酸及 N-H/C=O 伸缩合频对应肽键酰胺基团; 2 310~2 430 nm 波段为 C-H 键伸缩-弯曲振动合频。上述提取的信息充分反映了

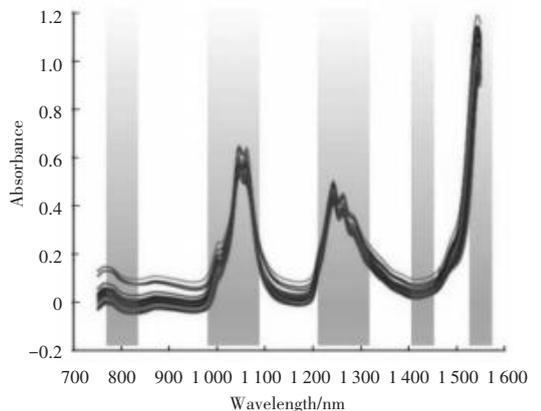
谷物中的酪蛋白特征。

柴油数据集的 CBGA-Net 特征波长分布如图 5(b) 所示, 芳香烃化合物的近红外吸收峰特征性强, 波段 780~830 nm 吸收峰可能是芳香环上的芳氢伸缩振动的 3 倍频峰, 因非谐性振动效应向长波方向移动, 表现为宽而弱的吸收峰; 波段 980~1 090 nm 主要归属于芳香烃中芳氢的面内弯曲振动, 是芳香烃的强特征峰。波段 1 220~1 310 nm 为芳香烃的芳氢面外弯曲振动与伸缩振动的合频, 具体位置和强度取决于芳环的取代形式。波段 1 420~1 460 nm 和 1 500~1 550 nm 的核心归属可能均为芳环上芳氢的泛频振动。

由此可见, CBGA-Net 模型识别的高贡献度特征波长与目标物质的化学官能团存在显著相关性。通过系统分析谷物和柴油两类样品的近红外光谱数据, 该模型成功建立了光谱特征与化学指标间的定量映射关系, 增加了 CBGA-Net 模型的解释性。



(a) 谷物数据集



(b) 柴油数据集

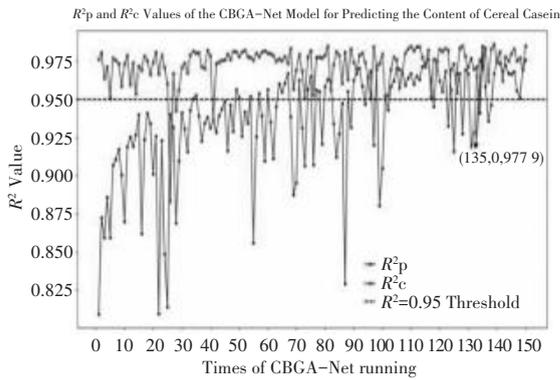
图 5 谷物数据集和柴油数据集的 CBGA-Net 特征波长分布
Fig. 5 Distribution of CBGA-Net feature wavelengths for the grain dataset and for the diesel dataset

2.3 不同数据 CBGA-Net 模型预测结果分析

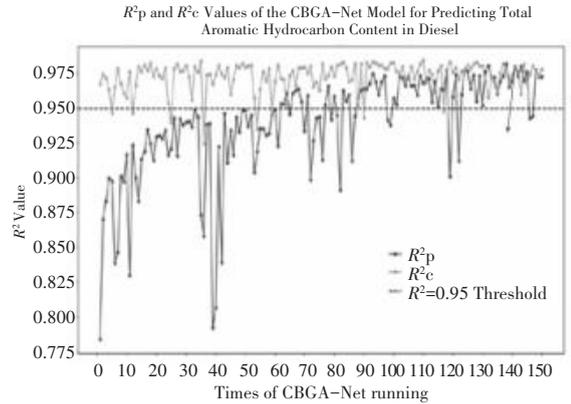
采用 CBGA-Net 建模方法, 分别对谷物、柴油的

近红外光谱数据各运行 150 次,两个数据集 CBGA-Net 模型的 R^2p 值和 R^2c 值如图 6 所示。由图 6(a) 可知,在谷物中酪蛋白含量的预测中,CBGA-Net 模型的 R^2p 值介于 0.809~0.985 之间,并在第 135 次迭代运算时达到了最佳预测结果。在 150 个 Epoch 中,绝大多数 R^2c 值高于 0.95,同时 RMSEP 值为

2.708,MAPE 值为 10.155%。从图 6(b) 可以看出,使用 CBGA-Net 模型预测柴油总芳烃含量,其 R^2p 值介于 0.784~0.982 之间,并在第 138 次迭代计算时获取最佳预测结果。同样,在该数据集的 150 个 Epoch 中, R^2c 的值大多数在 0.95 以上,其 RMSEP 值为 1.122、MAPE 值为 3.357%。



(a) 谷物数据集



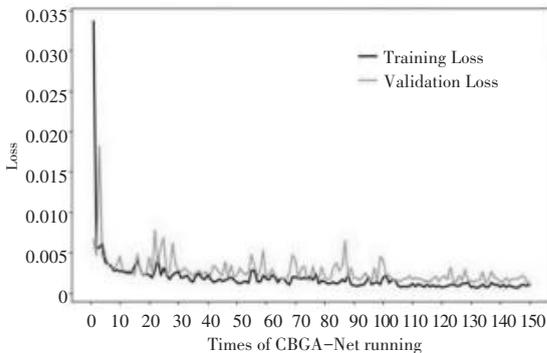
(b) 柴油数据集

图 6 谷物数据集和柴油数据集的 CBGA-Net 模型的 R^2p 和 R^2c 值Fig. 6 R^2p and R^2c values of the CBGA-Net model for the grains dataset and the diesel dataset

图 7(a) 和图 7(b) 分别表示 CBGA-Net 在谷物蛋白数据集和柴油总芳烃数据集上的损失函数曲线。从训练损失函数的曲线可以看出,损失值随着迭代次数的增加而逐渐下降。在谷物蛋白数据集中,前 100 轮迭代时,损失值快速下降且波动明显,之后逐渐趋于平稳。验证集上的准确率曲线在前 100 轮内同样出现明显的波动,100 轮之后逐渐稳定,显示出模型正在有效地学习并逐步收敛。在柴

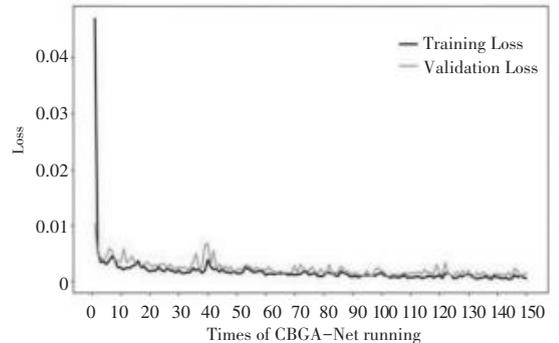
油总芳烃数据集的训练过程中,前 45 轮迭代期间的损失值快速下降并呈现明显波动,之后逐渐趋于平稳。验证集上的准确率曲线在前 45 轮同样波动较大,在 45 轮之后也逐渐稳定。损失函数曲线的变化表明,模型在这两个数据集上均实现良好的收敛。在模型训练 150 轮后,保存训练得到的模型,并采用性能最优模型对测试集中的近红外光谱数据进行预测,评估其预测性能。

R^2p and R^2c Values of the CBGA-Net Model for Predicting Total Aromatic Hydrocarbon Content in Diesel



(a) 谷物蛋白数据集

Training and Validation Loss Over Epochs



(b) 柴油总芳烃数据集

图 7 谷物蛋白数据集和柴油总芳烃数据集的损失曲线

Fig. 7 Loss curves of the CBGA-Net model on grain protein dataset and diesel total aromatic hydrocarbon dataset

2.4 不同模型在不同数据集上的结果分析

为了全面评估所提出方法的优越性,本研究将 CBGA-Net 模型与 4 种经典的 NIRS 分析方法,即 PLS、RF、BP 和 SVM 进行性能比较。为确保比较的

公平性,所有模型均采用原始的近红外光谱波段数据作为输入,并在谷物蛋白和柴油总芳烃预测任务上分别进行训练,每个模型均独立运行 150 次,以保障结果的可重复性与统计稳定性。各个模型的预测

结果见表 2。从表中可知,在谷物和柴油两个公开的近红外光谱波段数据集上,CBGA-Net 模型在预测任务中均表现出优于 PLS、RF、BP 和 SVM 模型的预测精度与稳健性。在谷物酪蛋白含量的预测中,CBGA-Net 模型与 PLS、RF、BP、SVM 模型相比,预测准确率 R^2_p 分别提高了 2.7%、2.5%、5.1%、7.3%,RMSEP 值从各对比模型的 3.550、3.813、6.526、6.826

降低至 2.708,MAPE 值降幅在 7.332%~27.912%,MAE 值也降低了 0.573~3.973;在柴油总芳烃含量预测中,CBGA-Net 模型的 R^2_p 分别提高了 6.8%、7.2%、7.4%、8.6%,RMSEP 值由 2.204、2.172、2.328、2.105 降低至 1.219,MAPE 值降低了 2.042%~4.063%,MAE 值降幅介于 0.564~0.789 之间。

表 2 不同数据集的不同模型预测结果

Table 2 Prediction results of different models on different datasets

样本	方法	$R^2_p \uparrow$	RMSEP \downarrow	MAPE/% \downarrow	MAE \downarrow
谷物	PLS	0.940	3.550	19.522	2.813
	RF	0.942	3.813	17.486	2.899
	BP	0.916	6.539	37.462	5.976
	SVM	0.894	6.826	38.066	6.213
	CBGA-Net(本文)	0.967	2.708	10.154	2.240
柴油	PLS	0.907	2.204	6.435	1.753
	RF	0.903	2.172	5.501	1.521
	BP	0.901	2.328	7.420	1.755
	SVM	0.889	2.105	5.399	1.564
	CBGA-Net(本文)	0.975	1.219	3.357	0.957

在谷物与柴油数据集的建模分析中,PLS、RF、BP 和 SVM 4 种经典预测模型的 R^2_p 值均在 90%左右,表明上述方法在两个数据集上具有较好的预测能力。然而,这些模型在 RMSEP 值上均表现较差,说明建模的过程中存在严重的过拟合现象。相较之下,CBGA-Net 模型不仅拥有较高的预测精度,在建模时也不会产生过拟合现象,验证了其良好的抗过拟合特性。同时,CBGA-Net 模型在两个数据集上的 MAPE 值与 MAE 值均显著优于其他对比模型,证明其在实际预测场景中具有更强的稳健性和跨数据集适用性。

对比结果表明,CBGA-Net 模型在近红外光谱数据提取与分析中优势显著。该模型融合 CNN、BiGRU 与 GAM,构建了高效数据处理流程。卷积层有效捕捉光谱局部特征,强化原始信号的多维表征;BiGRU 双向结构同步整合历史与未来信息,精准捕捉时序依赖变化;GAM 通过动态特征加权机制,使模型聚焦关键预测特征。相较于传统方法,CBGA-Net 突破非线性表征瓶颈,依托正则化与池化策略显著降低过拟合风险,大幅提升泛化性能与运算效率。该研究充分验证了深度学习在复杂数据分析中的创新价值,为相关领域的研究提供了新的思路和方法。

3 结束语

CBGA-Net 模型作为一种创新型近红外光谱定量分析方法,通过融合 CNN 与 BiGRU 构建并行处理架构,高效捕捉光谱数据的时序特征与多维信息,显著提升特征提取能力。通过引入的门控注意力机制可动态分配特征权重,增强模型可解释性。实验表明,在谷物和柴油近红外光谱分析中,该模型预测精度与稳健性显著优于 PLS、RF 等传统方法,有效突破非线性建模瓶颈并抑制过拟合问题,展现出在近红外光谱处理领域的突出优势与广泛应用潜力。后续研究将聚焦于模型结构优化与参数调优,提升其在定性分析与定量分析中的综合性能,并推动模型向硬件端的高效部署,实现现场实时检测。随着技术迭代,该方法有望在中药质量控制、食品安全监测等领域形成标准化解决方案,不仅推动相关行业质量检测体系升级,还将为经济体系的高效运行注入技术动能,助力可持续发展目标的实现。

参考文献

- [1] 徐广通,袁洪福,陆婉珍. 现代近红外光谱技术及应用进展[J]. 光谱学与光谱分析, 2000,20(2):9.
- [2] 褚小立,陈瀑,李敬岩,等. 近红外光谱分析技术的最新进展与展望[J]. 分析测试学报, 2020, 39(10): 1181-1188.

- [3] 孙通, 徐惠荣, 应义斌. 近红外光谱分析技术在农产品/食品品质在线无损检测中的应用研究进展[J]. 光谱学与光谱分析, 2009, 29(1): 122-126.
- [4] KOS J, PAVELEK D, KAYKHAI M, et al. Unveiling the transformative power of near-infrared spectroscopy in biomedical and pharmaceutical analysis: Trends, advancements, and applications[J]. European Journal of Pharmaceutical Sciences, 2025, 107(1):175.
- [5] BEC K B, GRABSKA J, HUCK C W. Near - infrared spectroscopy in bio-applications[J]. Molecules, 2020, 25(12): 2948.
- [6] XING G, KUMAR M H, CHONG W K, et al. Solution - processed tin - based perovskite for near infrared lasing [J]. American Chemical Society Nano, 2016, 10(10):9461-9468. DOI:10.1021/acs.nano.6b05508
- [7] LUO Y, LI W L, QU H B. Research progress on method validation of near infrared spectroscopy in quantitative analysis [J]. China Journal of Chinese Materia Medica, 2016, 41(19): 3515-3519.
- [8] 张进, 胡芸, 周罗雄, 等. 近红外光谱分析中的化学计量学算法研究新进展[J]. 分析测试学报, 2020, 39(10): 1196-1203.
- [9] 彭志兵, 张晨, 徐雄, 等. 近红外光谱结合偏最小二乘法快速检测米糠油过氧化值和酸价[J]. 粮油食品科技, 2023, 31(2):146-153.
- [10] LIU Y, XIONG J, QIAO F, et al. Detection of paralytic shellfish toxins by near-infrared spectroscopy based on a near-Bayesian SVM classifier with unequal misclassification costs. [J] Science of the Total Environment, 2024; 104(4): 1984-1991. DOI: 10.1002/jsfa.13086
- [11] CHEN Y, LI Y, WILLIAMS R A, et al. Modeling of soluble solid content of PE-packaged blueberries based on near-infrared spectroscopy with back propagation neural network and partial least squares (BP-PLS) algorithm. [J] Food Science, 2023, 88(11): 4602-4619.
- [12] ARIVAZHAGAN N, VAN VLECK T T. Natural language processing basics[J]. Clinical Journal of the American Society of Nephrology, 2023, 18(3): 400-401.
- [13] WANG D, ZHAO F, WANG R, et al. A lightweight convolutional neural network for nicotine prediction in tobacco by near-infrared spectroscopy[J]. Frontiers in Plant Science, 2023, 14: 1138693.
- [14] 刘思岐, 冯国红, 唐洁, 等. 中红外光谱结合 CA-SDP-DenseNet 的木材种类识别研究[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2023, 43(3): 814-822.
- [15] MISHRA P, RUTLEDGE D N, ROGER J M, et al. Chemometric pre-processing can negatively affect the performance of near-infrared spectroscopy models for fruit quality prediction [J]. Talanta, 2021, 229: 122303.
- [16] ZHANG X, LIN T, XU J, et al. DeepSpectra: An end-to-end deep learning approach for quantitative spectral analysis [J]. Analytica Chimica Acta, 2019, 1058: 48-57.
- [17] LI Z, LIU F, YANG W, et al. A survey of convolutional neural networks: analysis, applications, and prospects [J]. IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, 2021, 33(12): 6999-7019.
- [18] YANG J, GUAN H, MA X, et al. Rapid detection of corn moisture content based on improved ICEEMDAN algorithm combined with TCN-Bigru model[J]. Food Chemistry, 2025, 465: 142133.
- [19] SCHLEMPER J, OKTAY O, SCHAAP M, et al. Attention gated networks: Learning to leverage salient regions in medical images [J]. Medical Image Analysis. 2019, 53: 197-207. DOI: 10.1016/j.media.2019.01.012
- [20] RELANDER F A J, RUESCH A, YANG J, et al. Using near-infrared spectroscopy and a random forest regressor to estimate intracranial pressure[J]. Neurophotonics, 2022, 9(4):045001.
- [21] LE B T. Application of deep learning and near infrared spectroscopy in cereal analysis [J]. Vibrational Spectroscopy, 2020, 106: 103009.
- [22] 于水, 宦克为, 刘小溪, 等. 并联卷积神经网络的近红外光谱定量分析模型[J]. 光谱学与光谱分析, 2024, 44(6): 1627-1635.
- [23] MA Y B, BABU K S, AMAMCHARLAR J K. Prediction of total protein and intact casein in cheddar cheese using a low-cost handheld short-ware near-infrared spectrometer[J]. LWT—Food Science and Technology, 2019, 109:319.
- [24] MARINONI L, MONTI L, BARZAAGHI S, et al. Quantification of casein fractions and of some of their genetic variants in phosphate buffer by near infrared spectroscopy[J]. Journal of Near Infrared Spectroscopy, 2013, 21(5):385.
- [25] 徐广通, 陆婉珍, 袁洪福. 近红外光谱法测定柴油中的芳烃含量[J]. 石油化工, 1999(4):263-265.
- [26] PANG B, NIJKAMP E, WU Y N. Deep learning with tensorflow: A review[J]. Journal of Educational and Behavioral Statistics, 2020, 45(2): 227-248.
- [27] KETKAR N. Introduction to Keras [M]//Deep Learning with Python: A Hands-on Introduction. Berkeley, CA: Apress, 2017: 97-111.
- [28] KRAMER O. Scikit - Learn [M]//Machine Learning for Evolution Strategies. Cham: Springer, 2016: 45-53.