

(12) 按照专利合作条约所公布的国际申请

(19) 世界知识产权组织
国际局

(43) 国际公布日
2020 年 4 月 16 日 (16.04.2020)



(10) 国际公布号
WO 2020/073737 A1

(51) 国际专利分类号:
G06T 5/00 (2006.01)

(21) 国际申请号: PCT/CN2019/101573

(22) 国际申请日: 2019 年 8 月 20 日 (20.08.2019)

(25) 申请语言: 中文

(26) 公布语言: 中文

(30) 优先权:
201811179747.2 2018年10月10日 (10.10.2018) CN

(71) 申请人: 浙江大学(ZHEJIANG UNIVERSITY) [CN/
CN]; 中国浙江省杭州市西湖区余杭塘路
866号, Zhejiang 310058 (CN)。

(72) 发明人: 林涛(LIN, Tao); 中国浙江省杭州市西湖区余杭塘路866号, Zhejiang 310058 (CN)。 张晓蕾(ZHANG, Xiaolei); 中国浙江省杭州市西湖区余杭塘路866号, Zhejiang 310058 (CN)。 应义斌(YING, Yibin); 中国浙江省杭州市西湖区余杭塘路866号, Zhejiang 310058 (CN)。

(74) 代理人: 杭州求是专利事务所有
限公司(HANGZHOU QIUSHI PATENT OFFICE
CO.,LTD.); 中国浙江省杭州市西湖区玉
古路 147 号黄鸿年科技综合大楼 215 室/
林超, Zhejiang 310013 (CN)。

(81) 指定国(除另有指明, 要求每一种可提供的国家
保护): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG,
BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU,

(54) **Title:** QUANTITATIVE SPECTROSCOPIC DATA ANALYSIS AND PROCESSING METHOD BASED ON DEEP LEARNING

(54) 发明名称: 一种基于深度学习的定量光谱数据分析处理方法

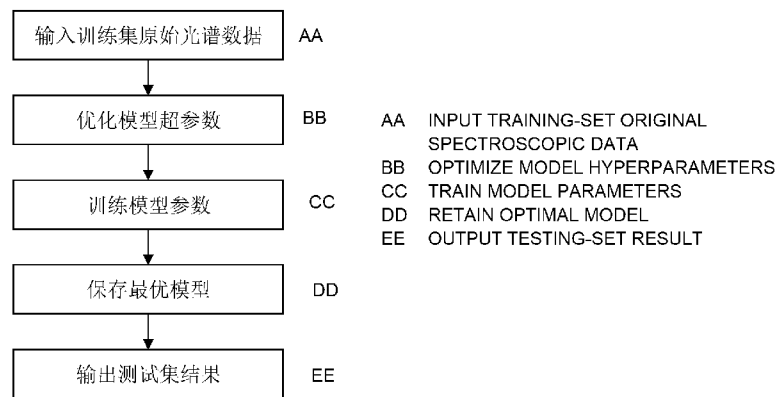


图 1

(57) **Abstract:** Disclosed in the present invention is a quantitative spectroscopic data analysis and processing method based on deep learning. In the present invention, data does not require preprocessing, and effective information and background information can be learned from original spectroscopic data, improving the accuracy of quantitative spectroscopic analysis. In the present invention, high-dimensional features in spectroscopic data are extracted by means of three convolutional layers. In the second layer, a 1x1 convolution kernel is used, capable of dimensionality reduction and of decreasing the volume of calculations, and in the third convolutional layer, three differently sized convolution kernels are used, capable of learning, from the original spectroscopic data, differently sized features hidden in the spectroscopic data. In the present invention, data is not preprocessed, and original data may be processed directly. When the noise distributions of testing-set spectra and training-set spectra are different, the generalization ability of the present invention is higher.

(57) **摘要:** 本发明公开了一种基于深度学习的定量光谱数据分析处理方法。本发明不需要对数据进行预处理, 能够从原始光谱数据中学习到有效信息和背景信息, 提高定量光谱分析的准确度。本发明通过三个卷积层提取光谱数据中的高维特征, 在第二层采用1×1的卷积核, 能够降维和减少计算量, 并且在第三个卷积层采用三种不同大小的卷积核, 能够从原始光谱数据中学习到隐含在光谱数据中的不同大小的特征。本发明没有对数据做预处理, 可以直接处理原始数据, 当测试集光谱与训练集的光谱噪声分布不同时, 本发明的泛化能力较高。

CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW。

(84) 指定国 (除另有指明, 要求每一种可提供的地区保护): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 欧亚 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 欧洲 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG)。

本国际公布:

— 包括国际检索报告 (条约第21条(3))。

一种基于深度学习的定量光谱数据分析处理方法

技术领域

本发明属于光谱分析领域，具体涉及了一种基于深度学习的定量光谱数据分析处理方法。

背景技术

化学计量学的发展促进了光谱分析在农产品、药品、石油和土壤等领域的应用，目前已经被广泛应用于红外光谱和拉曼光谱的定性与定量分析中。传统的化学计量学数据分析过程包括光谱预处理和建立校正模型两个步骤。光谱预处理主要用于去除光谱数据中的噪声，提高模型的预测精度。一方面，光谱预处理主要有基线校正、散射校正、平滑和归一化等四个步骤，每个步骤又有不同的数据处理方法，通过试错法选择预处理方法的组合会增加建模过程的复杂度，耗费更多时间。另一方面，光谱数据的采集环境、采集仪器或者样本来源发生变化时，数据中的噪声分布也会随之发生变化。原有的预处理方法应用于新的数据时不能有效去除噪声并且会引入新的噪声，致使模型的预测效果变差。

深度学习是一种数据驱动的学习方式，模型可以从原始数据中自动学习到数据中蕴藏的低维特征和高维特征。传统的人工神经网络在进行光谱数据分析时，往往需要先用主成分分析等方法进行降维，而且人工神经网络由于参数量较多容易出现过拟合现象。卷积神经网络具有局部连接、权值共享等特点可以充分提取数据中的局部特征并且防止过拟合。现有的卷积神经网络模型仍然需要进行光谱预处理，或者只是作为一种特征提取方法。Acquarelli 等人提出了一种一层的卷积神经网络定性分析模型，但是该模型仍然是在经过预处理后的光谱数据上效果较好（J. Acquarelli, T. v., Laarhoven, J., Gerretzen, T. N., Tran, L. M.C., Buydens, E., Marchiori, Convolutional Neural Networks for Vibrational Spectroscopic Data Analysis, 2017）。Malek 等人提出了一种卷积神经网络的定量分析模型，但是在该模型中卷积神经网络被用于特征提取，提取的特征后在回归模型中进行训练（S., Malek, F., Melgani, Y., Bazi, One-dimensional convolutional neural networks for spectroscopic signal regression, 2017）。

发明内容

为了弥补现有的化学计量学建模方法的不足，本发明提出了一种基于深度学习的定量光谱数据分析处理方法。本发明方法是一种数据驱动的建模方法，不需要数据预处理，可以在不从原始光谱数据中去除背景噪声的情况下，通过

不同大小的卷积核提取不同大小的特征，输出预测结果，提高预测的准确度。

如图 1 所示，本发明所采用的技术方案是：

步骤 1)：构建一维卷积神经网络模型，并且优化计算获得模型的超参数；

步骤 2)：用样品已知预测值的光谱数据输入到卷积神经网络模型中，采用 Adam 优化方法结合反向传播方法训练获得模型的权重，经过多轮训练后得到一个最优模型，获得训练后的模型；

步骤 3)：将样品未知预测值的光谱数据输入到训练后的模型，输出获得光谱数据的预测值结果。

现有的光谱数据均是进行数据预处理，去除背景信息，然后利用有效信息采用偏最小二乘 (PLS)、人工神经网络 (ANN) 等方法建立校正模型。

而本发明建立特殊结构的卷积神经网络模型，直接对未去除背景信息的完整的原始光谱数据进行处理，获得了很好的检测精度。

本发明样本是包括土壤、动物饲料和谷物等。一条光谱曲线对应一份土壤或者一份动物饲料样品或者一份谷物样品。

所述的步骤 1) 中，具体为：

1.1) 如图 2 所示，卷积神经网络模型主要由输入层、卷积层 1、卷积层 2、卷积层 3、拉伸层、全连接层和输出层依次连接构成；输入层中输入原始的全波段光谱曲线；

第一个卷积层包含一个卷积模块，使用 8 个卷积核，所有卷积核大小相同；

第二个卷积层采用两个卷积模块和一个池化模块的三个并列的模块，第一个卷积层的输出分别输入到两个卷积模块和一个池化模块中，每个卷积模块使用一种卷积核，两个卷积模块的卷积核不同，每个卷积模块均含有 4 个 $1 \times 1 \times 8$ 的卷积核，池化模块中含有 4 个并列的最大池化结构；

第三个卷积层采用四个卷积模块，四个卷积模块分别使用四种不同的卷积核，第一个卷积模块包含四个 $1 \times 1 \times 8$ 的第一种卷积核，第二个卷积模块包含四个 $p \times 1 \times 4$ 的第二种卷积核，第三个卷积模块包含四个 $q \times 1 \times 4$ 的第三种卷积核，第四个卷积模块包含四个 $1 \times 1 \times 4$ 的第四种卷积核， p 和 q 分别表示第二种卷积核和第三种卷积核的长度，其中第一种卷积核的输出输入到第三个卷积层的第一个卷积模块，第二个卷积层的两个卷积模块和一个池化模块分别输入到第三个卷积层的后三个卷积模块中；拉伸层进行将第三个卷积层的输出拉伸成一维特征向量的操作；

所述卷积神经网络模型的目标函数 $loss$ 由均方误差和第二范数正则化函数组成：

$$loss = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N [(y_n - \hat{y}_n)^2] + \lambda \|w\|^2$$

其中， λ 目标函数的正则化系数， w 是模型的权重；

1.2) 采用随机网格搜索方法优化卷积层的卷积核大小和步长，包括第一层卷积层的卷积核的大小和步长，第三层卷积层的两个卷积核的大小和步长，第二层卷积层的卷积核大小和步长为固定值；具体是采用随机网格搜索方法在以下超参数搜索空间内搜索卷积层中的超参数，采用五折交叉验证选择获得一组由超参数构成的最优超参数组合；

上述三个卷积层中不同卷积核的大小和步长的范围如下：第一层卷积层中的卷积核大小范围是 2-19，卷积核步长范围是 2-9；第二层卷积层中的第一种卷积核长度设定为 1，第一种卷积核步长设定为 1，第二层卷积层中的第二种卷积核长度设定为 1，第二种卷积核步长设定为 1；第三层卷积层中的第一种卷积核长度设定为 1，第三层卷积层中的第二种卷积核长度 p 大小范围是 2-5，第二层卷积层中的第三种卷积核长度 q 大小范围是 6-9，第三个卷积层中四种卷积核步长范围 2-9。

模型的三个卷积层和全连接层的激活函数为 Leaky ReLU 函数，模型的输出层不具有激活函数。

输出层的最后一层神经元个数为 1。

所述步骤 2) 中，将样品已知参考值的光谱数据输入到卷积神经网络模型中采用 Adam 方法结合反向传播算方法训练获得模型的权重，训练轮数为 5000 轮。

所述步骤 3) 中，通过模型输出预测每一条光谱曲线对应的预测值。

预测值例如可以为土壤的有机碳含量，动物饲料的蛋白质含量、谷物样品的蛋白质含量等。

具体实施中，将所有数据分为训练集和测试集，用训练集进行模型训练，将训练好的模型保存，并将测试集的原始光谱数据输入到训练好的模型中进行预测。对于模型效果评价，输出测试集 R^2 和 RMSEP。

本发明的有益效果是：

本发明不需要对数据进行预处理，能够学习到隐含在数据中的有效光谱信息和背景信息，提高定量光谱分析的准确度。本发明通过三个卷积层提取光谱数据中的高维特征，并且在第三个卷积层采用三种不同大小的卷积核，能够从原始光谱数据中学习到隐含在光谱数据中的不同大小的特征。本发明没有对数据做预处理，可以直接处理原始数据，当测试集光谱与训练集的光谱噪声分布

不同时，本发明的泛化能力较高。

附图说明

图 1 为本发明的建模流程图；

图 2 为模型的定量分析结构图。

具体实施方式

为更好理解本发明，下面结合实施例对本发明做进一步详细说明，但本发明要求保护的范围并不局限于实施例表示的范围。以下进行的实施例，在 Python 软件上运行。下面结合附图和实施例对本发明做进一步说明。

按照上述本发明完整方法实施的具体实施例如下：

本实施例应用于近红外光谱的定量分析，预测土壤的有机碳含量。所选取的数据集为土壤的公开数据集。土壤样本来源于美国、非洲、亚洲和南美洲和欧洲等地区，单个土体中只采集一个样本，共有 3793 个土体的光谱数据，分为训练集样本 2502 个和测试集样本 1291 个。使用 FieldSpec Pro-FR spectrometer 光谱仪采集光谱数据，光谱数据的波段范围是 350 到 2500 nm。所有土壤样本的最小有机碳含量是 0，最大有机碳含量是 241.6 g kg^{-1} ，平均有机碳含量是 11.97 g kg^{-1} ，有机碳含量的标准差是 20.87 g kg^{-1} 。

如图 1 所示步骤，上述实施例过程具体如下：

1) 将训练集数据输入到模型中。

2) 优化模型的超参数，模型的结构如图 2 所示，具体包括：包含三个卷积层，分别命名为卷积层 1、卷积层 2 和卷积层 3，拉伸层、全连接层和输出层。模型的第一个卷积层中使用了 8 个卷积核，最优卷积核大小为 9，步长为 5。第三个卷积层采用四个卷积模块，使用了 16 个卷积核，分别是四种不同大小的卷积核，包含一个 $1 \times 1 \times 8$ 的卷积核，第二种和第三种卷积核大小分别为 5 和 7，四种卷积核的步长都为 3。全连接层的神经元个数是 64。输出层中神经元的个数为 1（图 2）。

3) 模型的超参数固定后，再次用所有的训练集数据来训练模型的参数。通过反向传播算法在训练集上训练模型的权重值。模型训练 5000 轮。

4) 模型训练好以后，终止训练，保存最优的模型，并在测试集上测试模型的效果。输出每一条待测光谱的预测值和模型在测试集上的 R^2 和 RMSEP。

5) 利用传统的 PLS-LDA 和 PCA-ANN 方法对经过预处理和没有经过预处理的原始土壤光谱分别进行预测，得到最好的结果是 PCA-ANN 在没有经过预处理的原始光谱的预测，其 RMSEP 是 11.59， R^2 是 0.72，而通过本发明提出的方法对没有经过预处理的原始光谱进行预测，其预测 RMSEP 是 8.88， R^2 是 0.84。

通过比较可以看出，该方法在没有经过数据预处理的原始光谱上的预测精度高于传统的经过预处理和没有经过预处理的建模方法，可以提高近红外光谱对土壤样品预测的准确率。测试集样本和训练集样本来自于不同的地区，测试集的预测精度仍然较高，体现了本发明较好的泛化能力。

对比例：

对比该模型在经过预处理的数据上的结果，过程如下：

1) 将训练集数据输入到模型中。

2) 优化模型的超参数，模型的结构如图 2 所示，具体包括：包含三个卷积层，分别命名为卷积层 1、卷积层 2 和卷积层 3，拉伸层、全连接层和输出层。模型的第一个卷积层中使用了 8 个卷积核，最优卷积核大小为 9，步长为 5。第三个卷积层采用四个卷积模块，使用了 16 个卷积核，分别是四种不同大小的卷积核，包含一个 $1 \times 1 \times 8$ 的卷积核，第二种和第三种卷积核大小分别为 5 和 7，四种卷积核的步长是 3。全连接层的神经元个数是 64。输出层中神经元的个数为 1（图 2）。

3) 模型的超参数固定后，再次用所有的训练集数据来训练模型的参数。通过反向传播算法在训练集上训练模型的权重值。模型训练 5000 轮。

4) 模型训练好以后，终止训练，保存最优的模型，并在测试集上测试模型的效果。输出每一条待测光谱的预测值和模型在测试集上的 R^2 和 RMSEP。

5) 通过本发明提出的方法对经过预处理的原始光谱进行预测，其预测 RMSEP 是 12.92， R^2 是 0.65。通过比较可以看出，本发明方法在经过数据预处理的光谱上的预测精度比在原始光谱的预测精度差。

权利要求书

1. 一种基于深度学习的定量光谱数据分析处理方法，其特征在于方法包含如下步骤：

步骤 1)：构建一维卷积神经网络模型，并且优化计算获得模型的超参数；

步骤 2)：用样品已知预测值的光谱数据输入到卷积神经网络模型中，训练获得模型的权重，经过多轮训练后得到一个最优模型，获得训练后的模型；

步骤 3)：将样品未知预测值的光谱数据输入到训练后的模型，输出获得光谱数据的预测值结果。

2. 根据权利要求 1 所述的一种基于深度学习的定量光谱数据分析处理方法，其特征在于：所述的步骤 1) 中，具体为：

1.1) 卷积神经网络模型主要由输入层、卷积层 (1)、卷积层 (2)、卷积层 (3)、拉伸层、全连接层和输出层依次连接构成；输入层中输入原始的全波段光谱曲线；

第一个卷积层包含一个卷积模块，使用 8 个卷积核，所有卷积核大小相同；

第二个卷积层采用两个卷积模块和一个池化模块的三个并列的模块，第一个卷积层的输出分别输入到两个卷积模块和一个池化模块中，每个卷积模块使用一种卷积核，两个卷积模块的卷积核不同，每个卷积模块均含有 4 个 $1 \times 1 \times 8$ 的卷积核，池化模块中含有 4 个并列的最大池化结构；

第三个卷积层采用四个卷积模块，四个卷积模块分别使用四种不同的卷积核，第一个卷积模块包含四个 $1 \times 1 \times 8$ 的第一种卷积核，第二个卷积模块包含四个 $p \times 1 \times 4$ 的第二种卷积核，第三个卷积模块包含四个 $q \times 1 \times 4$ 的第三种卷积核，第四个卷积模块包含四个 $1 \times 1 \times 4$ 的第四种卷积核， p 和 q 分别表示第二种卷积核和第三种卷积核的长度，其中第一种卷积核的输出输入到第三个卷积层的第一个卷积模块，第二个卷积层的两个卷积模块和一个池化模块分别输入到第三个卷积层的后三个卷积模块中；拉伸层进行将第三个卷积层的输出拉伸成一维特征向量的操作；

所述卷积神经网络模型的目标函数 $loss$ 由均方误差和第二范数正则化函数组成：

$$loss = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N [(y_n - \hat{y}_n)^2] + \lambda \|w\|^2$$

其中， λ 为目标函数的正则化系数， w 是模型的权重；

1.2) 采用随机网格搜索方法优化卷积层的卷积核大小和步长, 包括第一层卷积层的卷积核的大小和步长, 第三层卷积层的两个卷积核的大小和步长, 第二层卷积层的卷积核大小和步长为固定值; 具体是采用随机网格搜索方法在以下超参数搜索空间内搜索卷积层中的超参数, 采用五折交叉验证选择获得一组由超参数构成的最优超参数组合;

上述三个卷积层中不同卷积核的大小和步长的范围如下: 第一层卷积层中的卷积核大小范围是 2-19, 卷积核步长范围是 2-9; 第二层卷积层中的第一种卷积核长度设定为 1, 第一种卷积核步长设定为 1, 第二层卷积层中的第二种卷积核长度设定为 1, 第二种卷积核步长设定为 1; 第三层卷积层中的第一种卷积核长度设定为 1, 第三层卷积层中的第二种卷积核长度 p 大小范围是 2-5, 第二层卷积层中的第三种卷积核长度 q 大小范围是 6-9, 第三个卷积层中四种卷积核步长范围 2-9。

3. 根据权利要求 2 所述的一种基于深度学习的定量光谱数据分析处理方法, 其特征在于: 模型的三个卷积层和全连接层的激活函数为 Leaky ReLU 函数, 模型的输出层不具有激活函数。

4. 根据权利要求 1 所述的一种基于深度学习的定量光谱数据分析处理方法, 其特征在于: 所述步骤 2) 中, 将样品已知参考值的光谱数据输入到卷积神经网络模型中采用 Adam 方法结合反向传播算法训练获得模型的权重, 训练轮数为 5000 轮。

5. 根据权利要求 1 所述的一种基于深度学习的定量光谱数据分析处理方法, 其特征在于: 所述步骤 3) 中, 通过模型输出预测每一条光谱曲线对应的预测值。

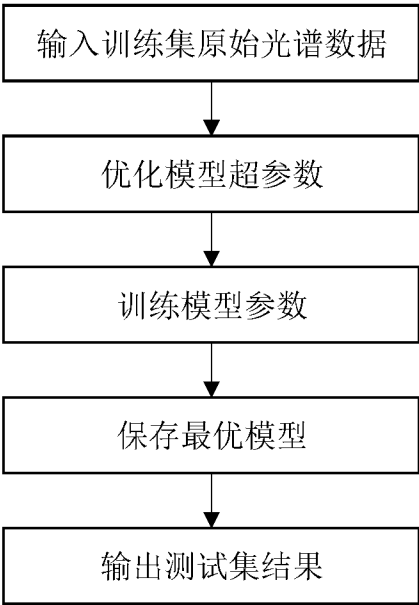


图 1

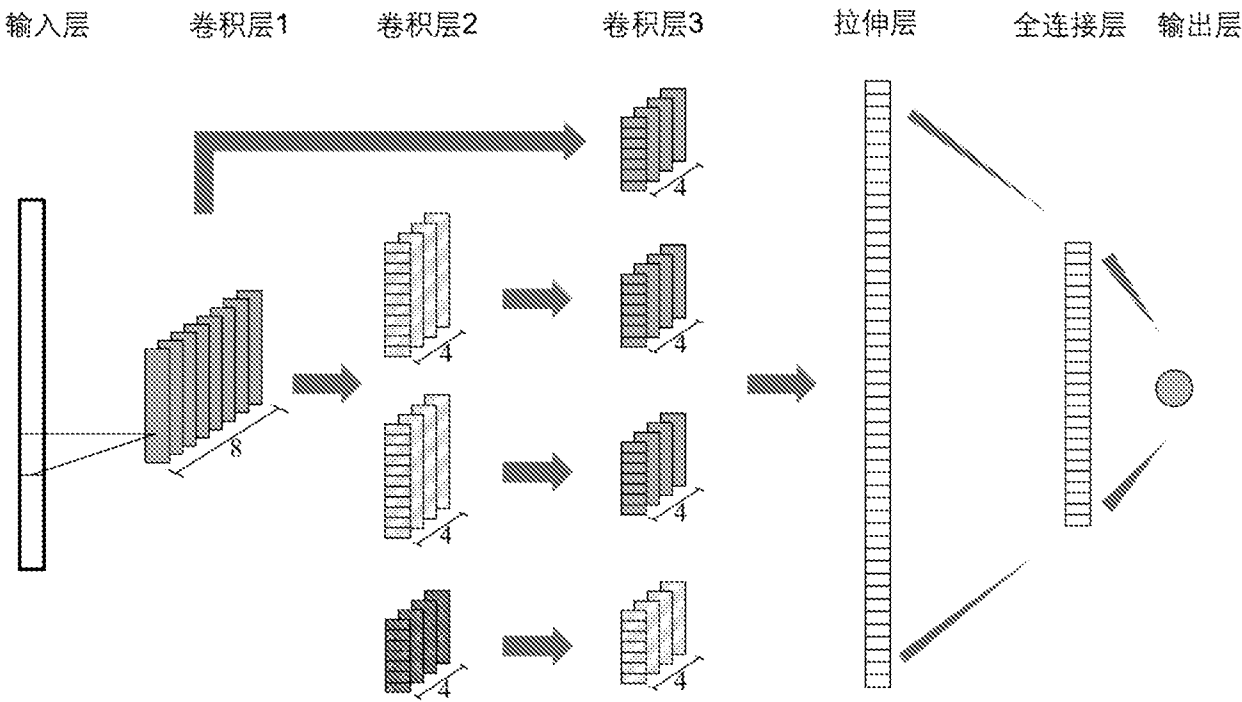


图 2

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/CN2019/101573

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

G06T 5/00(2006.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

G06T; G01N

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

CNPAT, WPI, EPODOC, ISI, CNKI: 卷积, 神经网络, 参数, 权重, 池化, 特征向量, 定量, 光谱, 深度学习, convolution, neural network, CNN, parameter, weight, quantitative, spectral, deep learning

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
PX	ZHANG, Xiaolei et al.; "DeepSpectra: An end-to-end deep learning approach for quantitative spectral analysis;" <i>Analytica Chimica Acta</i> , Vol. 1058, 13 June 2019 (2019-06-13), section 2	1-5
PX	CN 109493287 A (ZHEJIANG UNIVERSITY) 19 March 2019 (2019-03-19) claims 1-5	1-5
X	CN 108596213 A (CHINA UNIVERSITY OF GEOSCIENCES, WUHAN) 28 September 2018 (2018-09-28) description, paragraphs [0056]-[0073]	1, 4, 5
A	CN 107255647 A (HEFEI INSTITUTES OF PHYSICAL SCIENCE, CHINESE ACADEMY OF SCIENCES) 17 October 2017 (2017-10-17) entire document	1-5
A	CN 108388917 A (NORTHEASTERN UNIVERSITY) 10 August 2018 (2018-08-10) entire document	1-5



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"D" document cited by the applicant in the international application

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

22 October 2019

Date of mailing of the international search report

18 November 2019

Name and mailing address of the ISA/CN

China National Intellectual Property Administration (ISA/
CN)
No. 6, Xitucheng Road, Jimenqiao Haidian District, Beijing
100088
China

Facsimile No. (86-10)62019451

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/CN2019/101573

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
CN	109493287	A	19 March 2019	None	
CN	108596213	A	28 September 2018	None	
CN	107255647	A	17 October 2017	None	
CN	108388917	A	10 August 2018	None	

国际检索报告

国际申请号

PCT/CN2019/101573

A. 主题的分类

G06T 5/00(2006.01)i

按照国际专利分类(IPC)或者同时按照国家分类和IPC两种分类

B. 检索领域

检索的最低限度文献(标明分类系统和分类号)

G06T; G01N

包含在检索领域中的除最低限度文献以外的检索文献

在国际检索时查阅的电子数据库(数据库的名称, 和使用的检索词(如使用))

CNPAT, WPI, EPDOC, ISI, CNKI:卷积, 神经网络, 参数, 权重, 池化, 特征向量, 定量, 光谱, 深度学习, convolution, neural network, CNN, parameter, weight, quantitative, spectral, deep learning

C. 相关文件

类 型*	引用文件, 必要时, 指明相关段落	相关的权利要求
PX	ZHANG, Xiaolei et al.; . "DeepSpectra: An end-to-end deep learning approach for quantitative spectral analysis; " Analytica Chimica Acta; , 第1058卷, 2019年 6月 13日 (2019 - 06 - 13), 第2节	1-5
PX	CN 109493287 A (浙江大学) 2019年 3月 19日 (2019 - 03 - 19) 权利要求1-5	1-5
X	CN 108596213 A (中国地质大学武汉) 2018年 9月 28日 (2018 - 09 - 28) 说明书第[0056]-[0073]段	1, 4-5
A	CN 107255647 A (中国科学院合肥物质科学研究院) 2017年 10月 17日 (2017 - 10 - 17) 全文	1-5
A	CN 108388917 A (东北大学) 2018年 8月 10日 (2018 - 08 - 10) 全文	1-5

☐ 其余文件在C栏的续页中列出。☒ 见同族专利附件。

* 引用文件的具体类型:

“A” 认为不特别相关的表示了现有技术一般状态的文件

“E” 在国际申请日的当天或之后公布的在先申请或专利

“L” 可能对优先权要求构成怀疑的文件, 或为确定另一篇引用文件的公布日而引用的或者因其他特殊理由而引用的文件 (如具体说明的)

“O” 涉及口头公开、使用、展览或其他方式公开的文件

“P” 公布日先于国际申请日但迟于所要求的优先权日的文件

“T” 在申请日或优先权日之后公布, 与申请不相抵触, 但为了理解发明之理论或原理的在后文件

“X” 特别相关的文件, 单独考虑该文件, 认定要求保护的发明不是新颖的或不具有创造性

“Y” 特别相关的文件, 当该文件与另一篇或者多篇该类文件结合并且这种结合对于本领域技术人员为显而易见时, 要求保护的发明不具有创造性

“&” 同族专利的文件

国际检索实际完成的日期

2019年 10月 22日

国际检索报告邮寄日期

2019年 11月 18日

ISA/CN的名称和邮寄地址

中国国家知识产权局 (ISA/CN)
中国北京市海淀区蓟门桥西土城路6号 100088

受权官员

陈静

传真号 (86-10)62019451

电话号码 86-(10)-53961688

国际检索报告
关于同族专利的信息

国际申请号

PCT/CN2019/101573

检索报告引用的专利文件			公布日 (年/月/日)	同族专利	公布日 (年/月/日)
CN	109493287	A	2019年 3月 19日	无	
CN	108596213	A	2018年 9月 28日	无	
CN	107255647	A	2017年 10月 17日	无	
CN	108388917	A	2018年 8月 10日	无	