

doi: 10.12452/j.fxcxb.26012004

深度学习驱动的近红外光谱技术在中药质量评价中的研究进展

彭程^{1,2}, 李嘉¹, 聂磊¹, 臧恒昌^{1,2*}

(1. 山东大学药学院, 山东 济南 250012; 2. 山东大学药品监管科学研究院, 山东 济南 250012)

摘要: 近红外光谱技术作为一种快速、无损的分析手段, 在复杂体系质量评价中具有重要应用价值。随着深度学习方法的不断发展, 二者的融合为中药质量评价提供了新的研究思路和技术路径。该文系统梳理了多层感知机、卷积神经网络、循环神经网络、自编码器、生成对抗网络及Transformer等模型在近红外光谱建模中的应用进展, 围绕中药品种与炮制鉴别、真伪判定、产地溯源、成分含量预测、加工过程监控及制剂质量评价等关键环节, 归纳分析了不同算法的应用特点及其潜在优势与局限性。在此基础上, 总结了当前研究在样本规模、模型设计、训练策略及可解释性等方面面临的主要问题。最后, 对深度学习与近红外光谱融合技术在中药质量评价中的应用趋势和发展方向进行了展望。

关键词: 中药; 近红外光谱; 深度学习; 质量分析

中图分类号: O657.3; R284 **文献标识码:** A **文章编号:** 1004-4957(XXXX)XX-0001-09

Research Progress of Deep Learning-driven Near-infrared Spectroscopy in Traditional Chinese Medicine Quality Evaluation

PENG Cheng¹, LI Jia¹, NIE Lei¹, ZANG Heng-chang^{1,2*}

(1. School of Pharmacy Sciences, Shandong University, Jinan 250012, China; 2. Institute of Regulatory Science for Medical Products, Shandong University, Jinan 250012, China)

Abstract: Near-infrared (NIR) spectroscopy, as a rapid and non-destructive analytical technique, holds significant value in the quality assessment of complex systems. With the continuous advancement of deep learning methods, their integration has provided new research perspectives and technical approaches for the quality evaluation of traditional Chinese medicine (TCM). This paper systematically reviews the application progress of models such as multilayer perceptrons (MLP), convolutional neural networks (CNN), recurrent neural networks (RNN), autoencoders (AE), generative adversarial networks (GAN) and Transformers in NIR spectral modeling. Focusing on critical aspects including TCM species and processing differentiation, authenticity verification, geographic origin tracing, constituent content prediction, processing monitoring and formulation quality assessment, the paper summarizes and analyzes the application characteristics of different algorithms, as well as their potential advantages and limitations. On this basis, the main challenges in current research in terms of sample size, model design, training strategies and interpretability are identified. Finally, the paper discusses the application trends and future development directions of integrating deep learning with NIR spectroscopy in TCM quality evaluation.

Key words: traditional Chinese medicine; near-infrared spectroscopy; deep learning; quality analysis

中药作为我国传统医学体系的重要组成部分, 其临床疗效高度依赖于药材及制剂的整体质量^[1-2]。然而, 中药大多来源于天然动植物, 受品种、产地、采收时间、加工方式及储存条件等多种因素影响, 其化学成分组成和含量具有显著的复杂性和变异性^[3-4]。传统检测方法通常存在周期较长、样品前处理复杂等问题, 难以满足中药质量快速、准确评价的实际需求^[5]。

收稿日期: 2026-01-20; 修回日期: 2026-02-13

基金项目: 国家重点研发计划项目 (2024YFC3506900, 2024YFC3506902)

* 通讯作者: 臧恒昌, 博士, 教授, 研究方向: 药物智能制造技术, E-mail: zangsdkn@sdu.edu.cn

近红外 (NIR) 光谱技术因具有检测速度快、可实现无损检测、环境友好等特点^[6], 在中药质量评价领域展现出良好的应用前景。然而, 近红外光谱信号主要来源于含氢基团振动的倍频和组合频吸收, 其谱峰宽而重叠严重, 导致光谱信息与目标属性之间呈现复杂的对应关系, 使得传统建模方法在复杂中药体系中往往面临建模精度和泛化能力受限的问题^[7]。因此, 有效从高维且冗余的近红外光谱数据中提取关键信息, 已成为限制其进一步应用的核心问题。

近年来, 深度学习技术在特征提取、模式识别和回归预测等方面不断发展, 为应对近红外光谱分析中复杂数据的处理提供了新的技术手段^[8]。通过引入深度学习模型, 可以在减少人工特征设计的情况下, 从近红外光谱数据中挖掘潜在的高阶特征关系, 从而可能提升模型对中药复杂体系的表征能力和预测性能^[9]。深度学习与近红外光谱技术的融合, 正逐渐推动中药质量评价由传统经验方法向数据驱动的智能分析模式转变。

1 近红外光谱的原理

近红外光谱是一种重要的光谱分析技术, 波长介于可见光与中红外光谱之间, 范围为 780~2526 nm^[10]。该光谱区域主要记录含氢基团, 如 C-H、O-H、N-H 等的倍频和组合频振动信息^[11]。近红外光谱法具有快速、准确、无损的特点, 在中药质量分析中应用广泛^[12]。在实际应用中, 近红外光谱的测量方式主要包括透射、反射及透反射 3 类。透射模式通过光线穿过样品进行测量, 通常适用于液体样品; 反射模式则采集样品表面散射光, 常用于固体粉末或颗粒样品; 透反射模式结合透射与反射原理, 适用于半透明或膏状样品。

2 深度学习方法

深度学习通过构建复杂的非线性映射, 为近红外光谱数据建模提供了新的思路。其核心优势在于自动特征提取和强大的非线性建模能力。传统方法通常需要从原始数据中手工提取特征, 再将其作为模型输入进行训练, 这不仅高度依赖先验知识, 而且难以充分捕捉数据中的非线性关系和隐含特征。深度学习能够在端到端训练过程中自动学习数据特征, 无需人工选择或组合特征, 从而更有效地捕捉光谱数据中的复杂模式, 同时降低前处理和特征选择的难度。此外, 深度学习具有高度灵活性, 可根据任务需求自由设计网络结构, 包括网络层数和每层神经元数量, 从而适应不同类型的数据和分析任务。根据网络结构和建模机制的不同, 深度学习方法在近红外光谱分析中呈现多种形式。图 1 对近红外光谱分析中常用的深度学习算法进行了概览。表 1 总结了各类算法的主要特征、应用案例、优势及局限性。

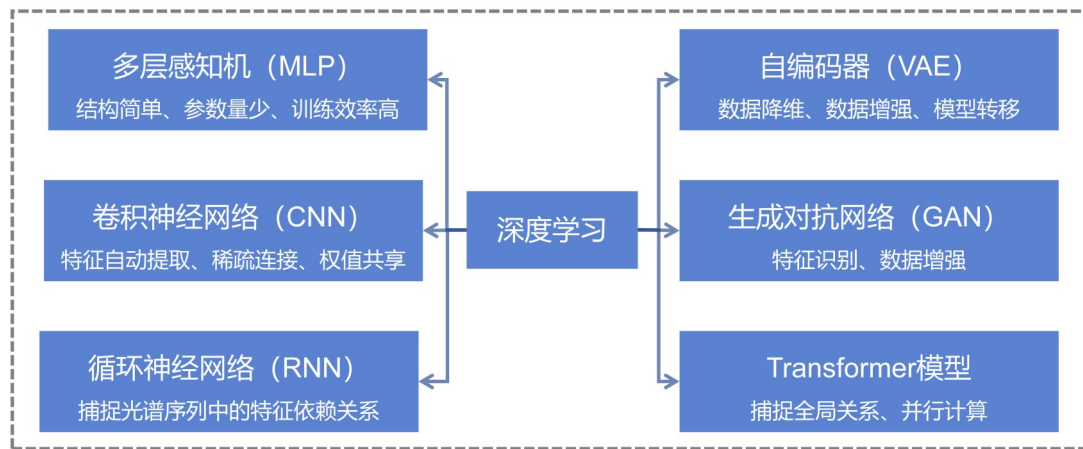


图 1 深度学习常用算法

Fig. 1 Common algorithms of deep learning

2.1 多层感知机

多层感知机 (MLP) 是一种前馈神经网络, 通过学习光谱与目标之间的映射关系自动调整神经元权重进行预测, 其结构由输入层、一个或多个隐藏层及输出层组成^[13]。在近红外光谱分析研究中,

MLP常被用于刻画光谱数据中存在的非线性关系，并在一定条件下取得较好的建模效果。例如，在大黄近红外光谱研究中^[14]，基于MLP的模型对大黄酸的预测精度较高，整体性能优于线性PLS模型。在黄连不同部位样品的研究中^[15]，MLP模型在相关成分定量中也取得了较高的预测精度，反映出其对非线性光谱关系的适应能力。此外，MLP结构简单、参数量较少、训练过程稳定，当传统线性模型难以获得理想结果时，可作为一种可行的非线性建模选择。然而，MLP对网络结构和超参数设置较为敏感，且其全连接结构难以充分利用光谱数据中相邻波段的局部相关特征。

2.2 卷积神经网络

表1 近红外光谱分析中常用深度学习算法的特征、应用及优缺点

Table 1 The features, applications, advantages and disadvantages of deep learning algorithms commonly used in near-infrared spectroscopy analysis

Algorithm type	Main characteristic	Application case	Advantage	Limitation
多层感知机 (MLP)	全连接前馈神经网络	大黄含量预测；黄连含量预测	结构简单；具有非线性建模能力	对结构和超参数敏感；特征表达能力有限
卷积神经网络 (CNN)	局部感知；参数共享；卷积核提取特征	贝母来源及掺假检测；秦艽含量预测	自动提取光谱特征；鲁棒性强；通常无需复杂预处理	对样本量和计算资源要求较高；模型结构设计复杂
循环神经网络 (RNN/GRU/LSTM)	捕捉光谱序列中的特征依赖关系	当归真伪及掺假鉴别；麦芽、桃仁和鸡内金含量预测	能捕捉光谱序列的长程依赖关系；适合连续波段建模	训练效率较低；参数量大
自编码器 (AE)	无监督特征学习与降维	金银花产地识别	可降低光谱冗余；适合小样本预训练	计算资源需求高；对噪声敏感
生成对抗网络 (GAN)	对抗训练自动学习数据分布	茴香产地溯源；多种中药品种鉴别	有效缓解小样本问题；提高模型泛化能力	训练稳定性不足；收敛性较差
Transformer	基于自注意力机制；全局特征建模	干姜炮制品分类；当归关键成分定量；枸杞产地鉴别	可并行计算；擅长捕捉长距离波段关联；易与可解释方法结合	对样本规模和算力要求高；小样本易过拟合

卷积神经网络（CNN）是一种具有深度结构的前馈神经网络，是深度学习的核心算法之一^[16]。它通常由卷积层、激活函数、池化层和全连接层组成。在近红外光谱分析中，CNN能够自动提取光谱的局部特征并捕捉非线性关系，从而实现高精度的定量和分类分析。例如，在贝母的来源鉴定和掺假检测中^[17]，CNN可准确区分不同来源样品并识别掺假情况，表明其能够有效捕捉关键光谱信息。此外，CNN可端到端处理原始光谱，无需复杂预处理，并且具有一定的鲁棒性，能够应对噪声和光谱干扰。例如，在秦艽活性成分的多成分定量分析中^[18]，基于CNN的模型无需对光谱进行额外处理，仍表现出良好的预测精度和较强的泛化能力，充分体现了CNN在复杂光谱数据处理中的优势。然而，CNN对训练数据量和计算资源要求较高，网络结构和超参数选择对性能影响显著，对小样本或噪声极高的数据可能表现不佳，这些因素在实际应用中需要加以考虑。

2.3 循环神经网络

循环神经网络（RNN）是一类用于处理序列数据的神经网络模型，其核心在于通过隐藏状态在时间维度上传递信息，从而捕捉光谱序列中的特征依赖关系^[19]。针对RNN在长序列处理过程中存在的梯度消失问题，多种改进结构已被提出以增强模型性能。门控循环单元（GRU）通过合并门控机制简化网络结构，在保持性能的同时降低计算复杂度。长短期记忆网络（LSTM）利用输入门、遗忘门和输出门有效保留长期信息，提高了对长光谱序列依赖的建模能力。例如，在当归真伪鉴别与掺假分析中^[20]，LSTM可以准确区分真品、非真品和掺假样品，并精确预测掺假浓度，其性能优于MLP、支持向量机（Support Vector Machine, SVM）和PLS等传统方法。双向RNN（BiRNN）通过同时考虑光谱序列的正向和反向信息，使模型能够更全面地捕捉特征。例如，在麦芽、桃仁和鸡内金的含量预测中^[21]，结合CNN与BiLSTM的模型实现了端到端的定量分析，显著提升了预测精度和泛化能力。然而，RNN模型计算效率低，模型复杂度较高，在资源受限或实时性要求高的场景下可能存在局限性。

2.4 自编码器

自编码器（AE）是一种无监督深度学习模型，由编码器和解码器两部分组成。编码器将光谱数据映射到低维潜在空间以提取核心特征，解码器则根据潜在表示重建输入光谱，从而学习数据的内在结构^[22]。自编码器能够自动提取高维光谱中的关键特征，减少冗余信息，并通过低维表示实现数据压缩。在光谱分析中，其可用于提取重要特征模式，从而提升回归与分类模型的效率与稳定性。在金银花近红外光谱分析中^[23]，一维超深卷积神经网络与变分自编码器（VAE）结合，通过VAE的重构误差

检测未知产地样本。该机制不仅增强了模型对未知类别的识别能力,还提高了特征学习效率和泛化性能,有效缓解了CNN对未知样本高置信度的问题。然而,AE模型在训练过程中仍可能存在稳定性不足、收敛性较差等问题。

2.5 生成对抗网络

生成对抗网络(GAN)是一种基于博弈思想的深度学习模型,由生成器和判别器两部分组成。生成器负责生成样本以模拟真实数据分布,判别器则判断样本的真假^[24]。通过两者的对抗训练,生成器能够不断提升生成样本的逼真度。GAN的优势在于可以自动学习复杂光谱数据的分布特征,无需预先假设数据的概率模型。在茴香产地判别中^[25],结合NIR光谱与GAN可实现不同产地样品的快速识别。GAN模型在分类准确率和泛化能力上均优于PCA-MLP和CNN模型,产地鉴别准确率达到100%。与传统方法相比,CNN和GAN无需人工特征提取,操作更为简便。然而,CNN的性能受限于训练样本量,通常需要大量数据才能充分学习光谱特征,而GAN通过生成器与判别器的对抗训练,即使在小样本条件下,也能不断优化生成样本,使判别器具备强大的识别能力。大量迭代后,生成器生成的光谱数据与原始样本高度相似,这也是判别器能够实现高准确率的关键。在多种中药材的品种分类中^[26],GAN模型整体识别准确率接近99%,充分显示了GAN在提升光谱特征表示能力、改善小样本建模的优势。然而,GAN在对抗训练过程中对生成器与判别器的平衡较为敏感,训练稳定性不足,模型收敛性较差,在实际应用中需精心设计训练策略。

2.6 Transformer模型

近年来,Transformer架构在光谱分析领域成为研究热点。作为一种基于自注意力机制的深度学习模型,Transformer能够刻画输入序列中不同位置之间的相互关系,从而实现全局特征的建模。与传统RNN相比,Transformer可对整个序列并行处理,既保证特征表达能力,又显著提高计算效率。其典型结构由编码器和解码器堆叠组成,其中编码器通过多头注意力机制和前馈网络提取序列特征,解码器则在此基础上生成预测结果^[27]。这种设计能够有效捕捉长序列光谱中不同波段之间的全局关联,同时缓解信息在长序列建模中逐步衰减的问题。在干姜质量控制中^[28],结合多分支特征提取框架和CNN自动学习的深度特征,Transformer能够捕捉硫熏引起的微小光谱变化,实现高精度分类。在当归关键成分定量分析中^[29],Transformer可同时将对川芎嗪和阿魏酸进行建模,无需复杂预处理,显著提升预测精度与泛化能力,同时可结合SHAP值进行光谱特征解释。在枸杞地理来源鉴别中^[30],Transformer通过多尺度特征融合外观图像与NIR光谱,既提取局部特征又捕捉全局模式,实现高准确率和强泛化能力。然而,Transformer在实际应用中也面临挑战。首先,其对训练样本量和计算资源需求较高,尤其在小样本场景下,模型容易过拟合。其次,模型设计参数(如层数、注意力头数)对性能影响显著,需要在精度与计算效率之间权衡。为进一步发挥Transformer在中药光谱分析中的优势,可以结合小样本增强、迁移学习或多模态数据融合策略,以实现高精度、可解释且稳健的定性或定量分析。

3 典型应用

图2直观展示了深度学习驱动的近红外光谱技术在中药质量评价中的主要应用场景,涵盖中药品种与炮制方法鉴别、真伪判定、产地溯源、有效成分含量分析、加工过程监控以及制剂质量评价等环节。表2列出了各应用环节的典型案例,说明了深度学习模型在不同任务中的具体应用情况。

3.1 中药品种及炮制方法鉴别

在中药品种及炮制方法鉴别任务中,深度学习与NIR光谱结合的核心价值不局限于识别精度的提升,而在于其端到端建模能力能够自动学习光谱判别特征,从算法层面突破传统方法对人工特征构建和线性判别假设的依赖。Han等^[31]基于NIR光谱构建残差卷积神经网络(ResNet)模型,实现了天麻不同品种的自动识别,在训练集、验证集和测试集上均获得100%的分类准确率。ResNet通过残差连接缓解深层网络训练中的梯度消失问题,使模型能够在较深层次上学习光谱中的高阶判别特征。与主成分分析(PCA)、t-分布随机邻域嵌入(t-SNE)、偏最小二乘法判别分析(PLS-DA)及SVM等传统方法相比,该模型无需复杂光谱预处理即可直接从原始光谱中提取有效特征,体现了深度学习在光谱特征建模范式上的转变。胡晓燕等^[32]将一维NIR光谱转换为二维相关光谱(2DCOS),并以二维光谱图

像作为输入引入 ResNet 模型,对滇黄精不同干燥处理方式鉴别,分类准确率达到 100%。相较于基于一维光谱的层次聚类分析 (HCA) 和 PCA 模型,该方法表现出更优的判别性能。这一性能提升可能与 2DCOS 将光谱变化关系显式映射为二维结构特征有关,该表征形式更契合卷积神经网络对空间相关模式的自动学习能力,从而有利于充分挖掘有效信息。Shi 等^[33]采用 NIR 光谱结合 CNN 对香附及其不同炮制品进行无损分类,4 类样品的识别准确率达到 100%。由于这 4 类样品的差异非常微小,传统方法难以有效区分。CNN 利用局部感受野和权值共享机制,能够重点建模相邻波段之间的局部相关性,从而更敏感地捕捉微小的光谱差异。针对炮制程度连续变化且样本量有限的问题,陈承武等^[34]基于 NIR 光谱构建了 CNN 与投票机制相结合的蒲黄炭化程度监测模型。该方法通过深度网络在多预处理条件下自动提取特征,并利用加权投票降低单模型的不稳定性。在训练集占比为 80% 的条件下预测准确率达到 95.4%,结果表明深度学习方法在小样本和复杂判别任务中仍能保持较为稳定的性能。

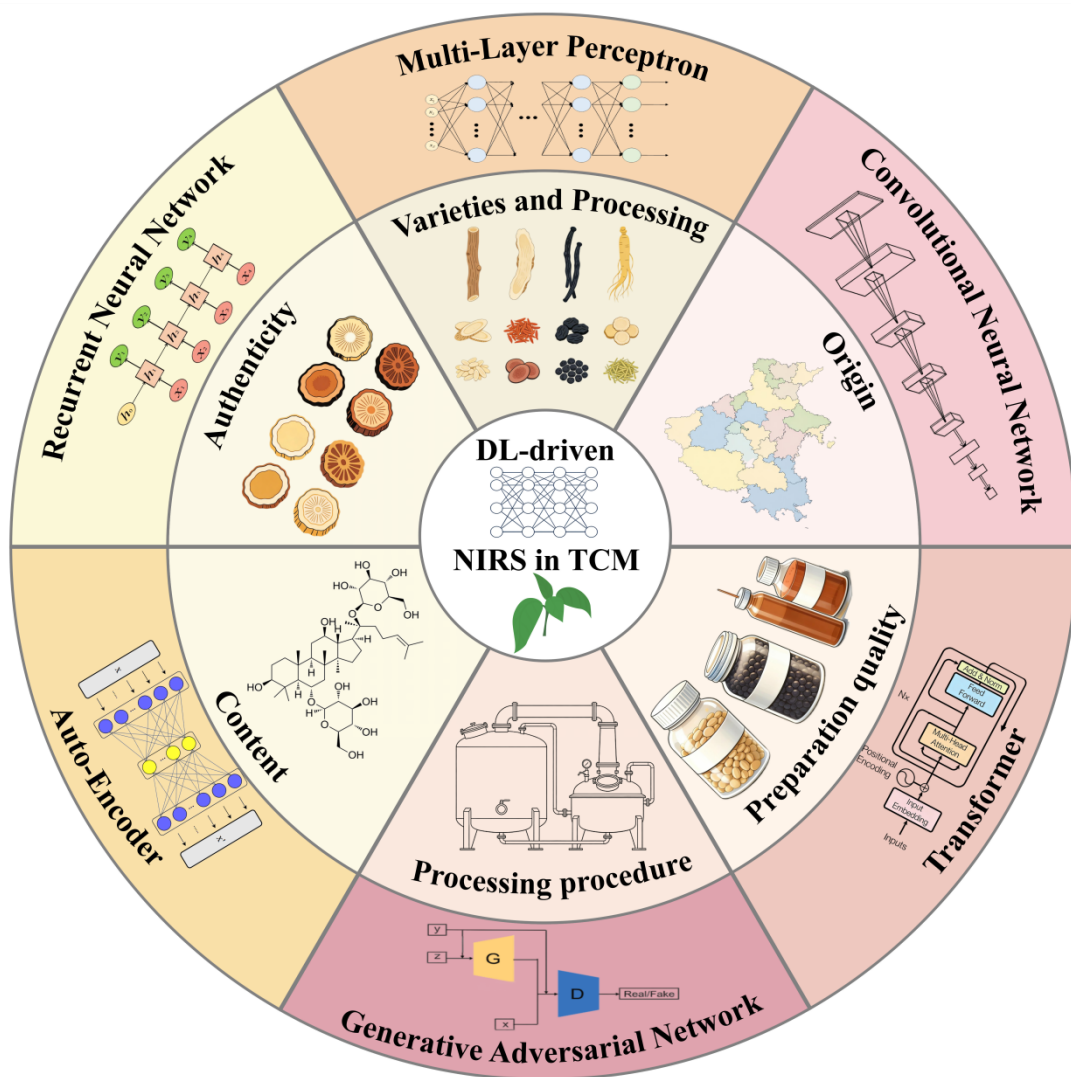


图2 近红外光谱结合深度学习在中药质量评价中的主要应用场景

Fig. 2 Primary applications of near-infrared spectroscopy combined with deep learning in the quality evaluation of traditional Chinese medicine

3.2 中药真伪鉴别

中药真伪鉴别的核心挑战在于正品、伪品及掺假样品之间的光谱特征高度重叠。深度学习模型在此类问题中提供了有效的解决方案。蒋智威^[35]比较了 CNN、MLP、SVM、随机森林 (RF) 及 PLS-DA 在苍术粉末和饮片真伪鉴别中的表现,结果显示 CNN 在两种样本形态下均取得最佳性能,说明深度卷积结构能够更稳健地应对样本形态差异及复杂光谱干扰。Chen 等^[36]针对茴香与外观高度相似的孜然,提出多尺度卷积神经网络 (MCNN) 与 BiLSTM 组合模型。MCNN 用于提取不同尺度的局部光谱特征,

BiLSTM 从正反两个方向捕捉光谱序列的依赖关系，两者结合显著增强了对高度相似样品的鉴别能力，分类准确率分别达到 100% 和 98.57%，充分体现了深度学习在复杂光谱模式下的自动特征提取和非线性判别优势。

表 2 深度学习算法在近红外光谱中药质量评价中的应用案例

Application of deep learning algorithms in the quality evaluation of traditional Chinese medicine using near-infrared spectroscopy	
Application scenarios	Application cases
中药品种及炮制方法鉴别	天麻品种鉴别 (ResNet);
	滇黄精干燥方式鉴别 (ResNet);
	香附炮制品分类 (CNN);
中药真伪鉴别	蒲黄炮制品分类 (CNN)
	苍术真伪鉴别 (CNN);
	茴香真伪鉴别 (MCNN+BiLSTM)
中药产地溯源	黄芪产地分类 (Dual-TCNet);
	白芷产地分类 (CNN)
	金银花中异绿原酸 C 定量 (MLP);
中药有效成分含量分析	铁皮石斛中干物质定量 (LSTM);
	黄连中小檗碱定量 (多层 CNN-LSTM)
	川芎、当归提取过程成分预测 (MLP);
中药加工过程监控	提取过程百合王百合苷 B 预测 (MCAFNNet);
	竹茹汤煎煮浓缩过程成分预测 (CNN+LSTM)
	小儿消积止咳口服液成分预测 (VasLine);
中药制剂质量评价	安宫牛黄丸成分预测 (BiGRU);
	血府逐瘀口服液成分预测 (CNN+BiLSTM+MHSA)

3.3 中药产地溯源

中药产地溯源属于典型的弱差异、多类别判别问题，产地间光谱差异通常很小。深度学习在此类复杂模式识别中展现出潜在优势。Gao 等^[37]提出的双分支深度神经网络 (Dual-TCNet) 模型在基于 NIR 光谱的黄芪产地分类中表现优异，优于 SVM、RF、PLS-DA 以及 CNN。该模型通过双分支结构实现功能分工，其中卷积分支负责提取局部光谱特征，编码器分支负责捕捉全局依赖信息，并在融合分类器中通过多头自注意力机制对不同尺度的特征进行整合，从而增强模型对微小光谱差异的敏感性和判别能力。Dual-TCNet 在保持较低参数量和计算量的同时，实现了高准确率和良好的鲁棒性。郭兆华等^[38]针对白芷样本数量有限且类别分布不均衡的问题，提出了一种结合光谱数据增强与焦点损失函数 (FL) 的 CNN 模型。该方法通过数据增强提高训练样本的多样性，并利用 FL 降低易分类样本在训练中的权重，增强模型对少数类样本和难分类样本的学习能力，从而有效缓解小样本和类别不平衡对模型训练的不利影响。结果表明，该方法在白芷产地分类中的识别性能明显优于 SVM。

3.4 中药有效成分含量分析

在中药有效成分定量分析中，深度学习的核心优势在于突破传统线性模型对成分-光谱关系的线性假设，能够同时建模多成分、非线性及高耦合的复杂光谱特征，从而实现更高精度和更稳健的定量预测。Xue 等^[39]针对金银花中的异绿原酸 C 建立了 MLP 定量模型。通过优化光谱预处理方法、隐藏神经元数、激活函数、步长和动量等参数，MLP 模型在预测异绿原酸 C 时表现优于 PLS，预测相关系数达到 0.986 8，高于 PLS 的 0.969 2，同时 RMSEP 更低。这表明 MLP 能够更有效地捕捉 NIRS 光谱与异绿原酸 C 之间的非线性关系，处理复杂光谱干扰和非线性特征的能力优于线性回归模型，非常适合该成分的快速定量分析。Li 等^[40]以铁皮石斛为研究对象，结合 NIR 光谱与 LSTM 建立干物质含量预测模型。LSTM 利用其记忆单元对光谱序列中的长程依赖进行建模，能够有效捕捉光谱随波段变化的全局特征，从而实现干物质含量的高精度预测。实验结果显示，模型在测试集上的 R²、RMSE 和 RPD 分别为 0.938、0.008 和 6.479，且无需复杂的光谱预处理。Huang 等^[41]针对黄连中小檗碱的定量分析，提出了一种多层 CNN-LSTM 模型。该模型在单个模块内融合卷积与循环结构，并可通过堆叠形成多层网络，实现分层特征提取与多尺度光谱模式建模，从而同时表征光谱的局部和全局特征。实验结果显示，该方法在训练和验证阶段均优于 PLS、CNN 及常规 CNN-LSTM 模型，RMSE 从 0.116%~0.196% 降至 0.095%，Welch 检验差异显著。该模块具有可重复使用和可扩展性，可通过调整堆叠层数适应不同数

据特征,实现对非线性、高维光谱的高效建模。

3.5 中药加工过程监控

中药加工过程监控强调动态、多成分和快速建模的能力,深度学习为质量控制提供了新的技术手段。Zhang 等^[42]以川芎和当归提取过程为研究对象,构建了六个有效成分的多输出 MLP 模型,可同时捕捉多个活性成分的非线性关系,实现同步预测。与传统 PLS 相比,该模型在各成分上的预测性能显著提升,验证集 R^2 均高于 0.92,体现了深度学习在处理多变量、高耦合光谱数据方面的优势。Li 等^[43]针对百合提取中的关键活性成分王百合苷 B,提出多通道注意力融合网络 (MCAFNNet),通过多通道卷积分支结合通道注意力机制,强化关键信息表达并抑制干扰光谱信号。模型在测试集上的 R^2 为 0.94, RMSE 为 $2.4 \mu\text{g/mL}$, RPD 为 4.2,表现优于 PLS、SVM 和 MLP 模型,充分体现了深度学习在复杂光谱干扰条件下自动提取并优化有效特征的能力。He 等^[44]将 CNN 与 LSTM 结合,用于经典名方竹茹汤煎煮浓缩过程的 7 种活性成分同步定量监测。CNN 提取局部光谱特征, LSTM 捕捉序列依赖,实现多成分非线性建模。实验结果显示,预测平均相对误差仅 0.7%~2.8%, R^2 为 0.981~0.992,稳定性和精度优于传统回归方法。

3.6 中药制剂质量评价

中药制剂质量评价面临组方复杂、成分多样以及关键质量指标动态变化的挑战,深度学习通过多成分联合建模和特征学习,为质量评价提供了高效解决方案。Chen 等^[45]以小儿消积止咳口服液提取工序为研究对象,基于在线 NIR 光谱构建 VasLine 框架,通过引入 VAE 和分段直接标准化损失函数,实现了辛弗林、槟榔碱等 7 种成分的同步预测。该模型通过 VAE 自动提取潜在特征并捕捉成分间的非线性关系, R^2 均值达到 0.9731, RMSE 低至 0.001 0~0.092 6 mg/mL,表现出高精度和稳定性,充分体现了深度学习在复杂多成分数据建模中的优势。Tian 等^[46]以安宫牛黄丸为例,基于 NIR 光谱构建 BiGRU 模型,实现关键成分含量的快速预测。BiGRU 通过双向信息流建模序列依赖,同时兼顾短期和长期光谱特征,使模型在处理动态变化的多成分数据时表现出更高的灵敏度和稳定性,其预测性能显著优于 MLP、RF 及线性回归等传统方法。Gao 等^[47]针对血府逐瘀口服液,将 CNN、BiLSTM 与多头自注意力机制 (MHSA) 融合,建立多成分同步定量模型。CNN 提取局部光谱特征, BiLSTM 捕捉全局时序依赖, MHSA 强化关键成分的特征权重,从而实现对多成分非线性、高维光谱的高效建模。在独立测试集上,模型 R^2 均大于 0.80, RPD 均超过 2,显示出优良的泛化能力。

4 实际应用中的关键问题

近年来,深度学习结合近红外光谱在中药质量评价方面取得了一定研究进展,但在实际应用中仍面临若干关键问题。

小样本问题是面临的主要限制之一。深度学习模型对训练数据量较为敏感,其预测能力通常会随着样本规模的增加而提升,而复杂或深层模型在数据不足时难以发挥全部潜力。在中药近红外光谱质量评价中,这一问题尤为突出。中药材及制剂来源复杂,批次差异显著,同时高质量标注光谱获取成本较高,使得可用于训练的光谱样本往往有限。为缓解小样本带来的限制,可采取多种策略。首先,可通过数据增强生成多样化光谱样本^[48],例如利用 GAN 模拟真实光谱分布,从而扩充训练集并增强模型对光谱变异的适应能力。另外,可结合迁移学习策略,在相关数据集上预训练模型,再将其微调至目标任务,通过共享已有特征表示,减少对大量标注数据的依赖。

其次,训练策略和模型结构的选择对深度学习模型的性能具有重要影响。通常可以先从浅层架构入手,并根据任务复杂度逐步增加网络的深度或宽度,同时通过正则化和 Dropout 等方法控制模型复杂度,以防止过拟合。在训练过程中,应对关键超参数,如学习率、批量大小和训练轮数,进行系统优化,可采用网格搜索、贝叶斯优化或群智能算法等方法,从而提升模型的稳定性和预测性能。超参数优化应成为深度学习模型或架构开发的标准流程,以确保模型性能得到充分发挥。

最后,深度学习模型的可解释性仍是中药近红外光谱质量评价中的重要问题。模型的特征提取和决策过程通常呈现“黑箱”特性,难以直接将预测结果与光谱波段或具体化学成分对应^[49],这在一定程度上限制了模型在中药质量控制和监管中的应用。为提升可解释性,可以引入注意力机制突出模型

关注的关键光谱区域,通过卷积层特征可视化或梯度加权类激活映射(Grad-CAM)分析模型重点波段。同时,可采用可解释方法,例如Shapley加性解释(SHAP),评估各光谱特征对预测结果的贡献。此外,将光谱特征与化学成分信息结合分析,有助于揭示模型对具体指标的响应规律。通过这些方法,模型的预测结果将更加透明,易于理解和验证,从而增强科学可信度和实际应用价值。

5 结论与展望

总体来看,深度学习与近红外光谱技术的结合,为中药质量评价提供了新的技术手段。在中药品种鉴别、真伪判定、产地溯源、有效成分含量分析、加工过程监控以及制剂质量评价等环节,该技术能够实现快速、无损和多指标的综合分析。通过自动化特征提取和数据驱动建模,深度学习减少了对人工经验和复杂光谱预处理的依赖,同时增强了对复杂中药体系的表征能力和预测性能。

为了更有效地将深度学习应用于近红外光谱中药质量评价,未来研究应在模型设计上追求适中与高效,尽量避免过于复杂的网络结构,以保证训练过程的稳定性和预测结果的可靠性,同时降低不必要的计算开销和过拟合风险。数据增强仍是提升模型性能的重要手段,通过对样本进行多样化扩充,可以充分发挥深度学习在小样本或数据不平衡情况下的优势。与此同时,提升模型的可解释性仍是深度学习应用中的核心挑战。研究有效的可解释方法,使模型预测能够反映数据的内在模式和光谱特征结构,将有助于增强模型的可信度和实际应用价值。综合这些策略,深度学习有望在近红外光谱中药质量评价中,从单纯的数据驱动预测工具,逐步发展为能够辅助科研与生产决策的智能系统,从而推动理论研究与实际应用的紧密结合。

参考文献:

- [1] Wang S Q, Shen L, Song L Y, Geng P Y, Qiu N N, Liu W L, Zhang X L. *Chin. Herb. Med.* (汪舒琦, 申蕾, 宋立亚, 耿朴玉, 邱宁宇, 刘文龙, 张喜利. 中草药), **2025**, 56 (16): 6048 - 6057.
- [2] Gu J, Zhou S Y, Yang C M, Shen X R, Wang R J. *Acta Pharm. Sin.* (顾杰, 周思源, 阳长明, 申向荣, 王若瑾. 药学学报), **2025**, 60 (6): 1682 - 1691.
- [3] Mu H J, Wang Y C. *Chin. Pharm. Aff.* (母慧娟, 王一川. 中国药事), **2024**, 38 (6): 644 - 652.
- [4] Wu J, Zhong K, Yang H Y, Zhang P L, Yu N J, Chen W D, Zhang N, Gui S Y, Han L, Peng D Y. *J. Pharm. Anal.*, **2024**, 14 (11): 101019.
- [5] Cao L, Zhao Y, Chen X L, Zhang H, Zhao N, Ding Y Q, Duan S Y, Qian M Y, Ren G Q, Wang Z Z, Xiao W. *Measurement*, **2026**, 258 (PB): 118972.
- [6] Mishra P, Passos D, Marini F, Xu J, Amigo J M, Gowen A A, Jansen J J, Biancolillo A, Roger J M, Rutledge D N, Nordon A. *Trends Anal. Chem.*, **2022**, 157: 116804.
- [7] Zhuge Y X, Chen P, Xu Y P, Li J Y, Liu D, Chu X L. *Chin. J. Inorg. Anal. Chem.* (诸葛雁翔, 陈瀑, 许育鹏, 李敬岩, 刘丹, 褚小立. 中国无机分析化学), **2026**, 16 (2): 163 - 176.
- [8] Liu X Y, An H L, Cai W S, Shao X G. *Trends Anal. Chem.*, **2024**, 172: 117612.
- [9] Zhang S Y, Chen W H, Chen H Z, Hou C, Meng F X, Hong S Y. *Chin. J. Inorg. Anal. Chem.* (张思媛, 陈伟豪, 陈华舟, 侯灿, 蒙芳秀, 洪绍勇. 中国无机分析化学), **2026**, 16 (2): 292 - 300.
- [10] Dai S Y, Jiang S H, Gao Y, Liu J, Qiao F, Guo L N, Ma S C, Zheng J. *Chin. J. Pharm. Anal.* (戴胜云, 蒋双慧, 高妍, 刘杰, 乔菲, 过立农, 马双成, 郑健. 药物分析杂志), **2022**, 42 (10): 1856 - 1863.
- [11] Fu J S, Guo Q, Cai W S, Shao X G. *J. Instrum. Anal.* (付家顺, 郭琼, 蔡文生, 邵学广. 分析测试学报), **2025**, 44 (10): 2017 - 2025.
- [12] Zhou G M, Li W L. *Chin. J. Inorg. Anal. Chem.* (周国铭, 李文龙. 中国无机分析化学), **2026**, 16 (2): 270 - 280.
- [13] Petrov S M, Arapov D V, Kuritsyn V A, Podgornova N M. *J. Food Eng.*, **2026**, 412: 112966.
- [14] Xue J T, Shi Y L, Ye L M, Yang Q W, Li C Y, Chen X Y, Jing Y. *Spectrochim. Acta A*, **2018**, 205: 419-427.
- [15] Xue J T, Liu Y F, Ye L M, Li C Y, Yang Q W. *Spectrochim. Acta A*, **2018**, 188: 611-618.
- [16] Wang X, Li G J, Yang J J, Wang S Y, Zhang S B, Zhao Q. *Food Chem.*, **2025**, 501: 147615.
- [17] Li F L, Lei W, Li J, Wang X T, Su J Y, Sahati T N, Aierkenjiang X, Tian R, Zhou W, Zhang J X, Xia J J. *Foods*, **2025**, 14: 1907.
- [18] Peng C, Zhang M Y, Kong M D, Zhang S D, Li C, Feng T T, Tian W L, Nie L, Zang H C. *Microchem. J.*, **2024**, 205: 111310.
- [19] Sahu K C, Koziel S, Dabrowska A P. *Knowl.-Based Syst.*, **2026**, 335: 115274.
- [20] Bai L, Zhang Z T, Guan H H, Liu W J, Chen L, Yuan D P, Chen P, Xue M, Yan G J. *Talanta*, **2024**, 275: 126098.

- [21] Zhang M Y, Lin B, Zhang S D, Peng C, Li C, Feng T T, Li L, Wu A, Yang C G, Wang W, Huang S Y, Nie L, Zang H C. *Food Chem.*, **2025**, 480: 143905.
- [22] Yang D, Hu J. *Expert Syst. Appl.*, **2025**, 288: 128265.
- [23] Chen D Y, Zhang H, Lin L Y, Zhang Z L, Zeng J, Chen L, Chen X G. *J. Pharm. Biomed. Anal.*, **2023**, 234: 115572.
- [24] Bao X S, Huang D Y, Yang B Y, Li J Y, Atoba T O, Wu R Y, Weng H Y, Cheng Z X. *Food Control*, **2025**, 174: 111218.
- [25] Yang B, Chen C, Chen F F, Chen C, Tang J, Gao R, Lv X Y. *Spectrochim. Acta A*, **2021**, 260: 119956.
- [26] Yang Y, Qiu C L, Zhou D X, Qin Y, Li M X, Zhai D D, Li P, Cheng X L. *J. Food Compos. Anal.*, **2025**, 148: 108328.
- [27] Tian W L, Zang L X, Li Y Y, Peng C, Zhang J H, Shao H R, Xian R Q, Sun R, Liu F, Tan H N, Ling P X. *Carbohydr. Polym.*, **2025**, 369: 124278.
- [28] Chen C W, Wang T S, Zhou G S, Wu Z Y, Liu J, Yang X C, Yan H, Duan J N. *Spectrochim. Acta A*, **2025**, 350: 127396.
- [29] Yue J N, Zhang S D, Feng T T, Gao L L, Nie L, Zang H C. *Microchem. J.*, **2025**, 219: 116085.
- [30] Wang Y R, Wang Z H, Zeng W Q, Wang J B, Wang Z Q, Lan Y B. *Microchem. J.*, **2025**, 213: 113800.
- [31] Han D, Liu H, Wang Y. *Microchem. J.*, **2025**, 216: 114725.
- [32] Hu X Y, Su J Y, Shen T, Yang S B, Wang Y Z. *Chin. Herb. Med.* (胡晓燕, 苏俊宇, 沈涛, 杨绍兵, 王元忠. 中草药), **2025**, 56 (18): 6761 - 6772.
- [33] Shi Y B, He T Y, Zhong J J, Mei X, Li Y, Li M X, Zhang W, Ji D, Su L L, Lu T L, Zhao X L. *Talanta*, **2024**, 268 (P1): 125266.
- [34] Chen C W, Wang T S, Hu K F, Bao B H, Yan H, Yang X C. *Spectrosc. Spectral Anal.* (陈承武, 王天舒, 胡孔法, 包贝华, 严辉, 杨曦晨. 光谱学与光谱分析), **2022**, 42 (11): 3361 - 3367.
- [35] Jiang Z W. *Research on the Identification and Quality Evaluation of Atractylodis Rhizoma Based on Near-infrared Spectroscopy Technology*. Hangzhou: Zhejiang A&F University (蒋智威. 基于近红外光谱技术的苍术鉴别与质量评价研究. 杭州: 浙江农林大学), **2024**.
- [36] Chen C, Yang B, Si R M, Chen C, Chen F F, Gao R, Li Y Z, Tang J, Lv X Y. *Optik*, **2021**, 242: 167080.
- [37] Gao S M, Zhang H F, Yang Z Q, Wu R X, Chen M, Zhai D D, Yang Y, Qin Y, Tao H W, Li P. *Spectrochim. Acta A*, **2025**, 346: 126851.
- [38] Guo Z H, Wen S Z, Li S F, Wang Q, Wang Y X, Wang X G, Niu L Y, Li Y W, Feng W. *Chin. Pharm. J.* (郭兆华, 文师召, 李思凡, 王琪, 王颖鑫, 王鑫国, 牛丽颖, 李亚薇, 冯薇. 中国药学杂志), **2024**, 59 (21): 2022 - 2029.
- [39] Xue J T, Yang Q W, Li C Y, Liu X L, Niu B X. *Food Chem.*, **2020**, 342: 128386.
- [40] Li G, Duan Z, Wang Y. *Microchem. J.*, **2025**, 213: 113691.
- [41] Huang J L, Chen H Z, Meng F X, Lin B, Xu L L. *Microchem. J.*, **2025**, 217: 114911.
- [42] Zhang M Y, Lin B R, Ma X B, Wang H W, Nie L, Li L, Wu A L, Huang S Y, Yang C G, Zang H C. *Spectrochim. Acta A*, **2024**, 322: 124748.
- [43] Li Y Y, Yu C X, Zhang J H, Shao H R, Zheng X J, Liu F, Bian X H, Ling P X, Tian W L. *Microchem. J.*, **2026**, 220: 116402.
- [44] He T Y, Shi Y B, Cui E Z, Wang X L, Mao C Q, Xie H, Lu T L. *Microchem. J.*, **2023**, 195: 109438.
- [45] Chen Z X, Shen Y R, Chen B B, Zhou J, Huang P L, Zang H C, Guan Y X. *Eng. Appl. Artif. Intell.*, **2023**, 126: 106684.
- [46] Tian M Y, Ma X B, Nie L, Zang H C. *J. Ethnopharmacol.*, **2025**, 351: 120095.
- [47] Gao L L, Zhong L, Feng T T, Yue J A, Lu Q Q, Li L, Wu A L, Lin G M, He Q X, Liu K C, Cao G Y, Meng Z Q, Nie L, Zang H C. *Talanta*, **2025**, 287: 127627.
- [48] Zheng Y, Yang S Y, Wang T, Deng Z W, Lan W J, Yun Y H, Pan L Q. *Chin. J. Anal. Chem.* (郑运, 杨思雨, 王涛, 邓焯文, 兰维杰, 云永欢, 潘磊庆. 分析化学), **2024**, 52 (9): 1266 - 1276.
- [49] Beć K B, Grabska J, Huck C W. *Trends Anal. Chem.*, **2025**, 189: 118254.

(责任编辑: 盛文彦)