多模态光谱融合在中药质量检测中的应用进展：策略、算法与挑战

辛金山[1, 2]，于　洋[2, 3, 4#]，张景炫[2]，郭凯悦[2]，李　正[2, 3, 4*]，龚行楚[5*]

1. 天津中医药大学中医药研究院，天津　301617
2. 天津中医药大学中药制药工程学院，天津　301617
3. 省部共建组分中药国家重点实验室，天津　301617
4. 现代中药创制全国重点实验室，天津　301617
5. 浙江大学药学院，浙江 杭州　310058

摘　要：多模态光谱融合为突破中药复杂体系质量控制的表征瓶颈提供了新的技术路径。单光谱技术因信息载量不足，难以独立完成对中药复杂体系的全面表征。系统综述了多模态光谱融合在中药质量智能检测领域的研究进展，首先将融合策略归纳为初级、中级与高级 3 类，阐述其原理及适用场景；其次梳理从传统机器学习到深度学习模型的算法演进，并强调可解释性人工智能的关键作用。在此基础上，进一步剖析当前面临的核心挑战，包括数据层面的采集标准化缺失与模态异质性，以及模型层面的异构特征融合困难与跨场景迁移障碍。最后，从数据规范和模型设计 2 个维度展望未来发展方向。多模态光谱融合的策略与算法，可为构建中药质量智能检测新范式提供核心支撑。

关键词：中药质量检测；多模态光谱融合；融合策略；深度学习；可解释性人工智能

中图分类号：R284　　**文献标志码：**A　　**文章编号：**0253 - 2670(2026)21 - 8736 - 10

DOI: 10.7501/j.issn.0253-2670.2026.21.028

Application progress of multimodal spectral fusion in quality detection of traditional Chinese medicine: Strategies, algorithms and challenges

XIN Jinshan[1, 2], YU Yang[2, 3, 4], ZHANG Jingxuan[2], GUO Kaiyue[2], LI Zheng[2, 3, 4], GONG Xingchu[5]

1. Institute of Traditional Chinese Medicine, Tianjin University of Traditional Chinese Medicine, Tianjin 301617, China
2. College of Pharmaceutical Engineering of Traditional Chinese Medicine, Tianjin University of Traditional Chinese Medicine, Tianjin 301617, China
3. State Key Laboratory of Chinese Medicine Jointly Built by Province and Ministry, Tianjin 301617, China
4. National Key Laboratory of Modern Chinese Medicine Creation, Tianjin 301617, China
5. College of Pharmaceutical Sciences, Zhejiang University, Hangzhou 310058, China

Abstract: Multimodal spectral fusion provides a new technical pathway to overcome the characterization bottleneck in quality control of complex traditional Chinese medicine systems. Due to insufficient information capacity, single-modal spectral techniques cannot independently achieve comprehensive characterization of such complex systems. This paper systematically reviews the progress of multimodal spectral fusion for intelligent quality detection in traditional Chinese medicines. First, fusion strategies are classified into low-level, mid-level, and high-level categories, with their principles and application scenarios described. Second, the algorithm evolution from traditional machine learning to deep learning models is reviewed, highlighting the critical role of explainable artificial intelligence. On this basis, this paper then analyzes the core challenges at two levels. At the data level, challenges include a lack of standardized collection and modality heterogeneity. At the model level, challenges include difficulties in heterogeneous feature fusion and cross-scenario transfer. The strategies and algorithms of multimodal spectral fusion can provide core support for constructing a

收稿日期：2026-05-23

基金项目：国家工信部 2024 年重点专项（2440STCZB2617）

作者简介：辛金山，硕士研究生，研究方向为中药质量控制。E-mail: 18443517115@163.com

#共同第一作者：于　洋，副教授，从事中药智能设备开发研究。E-mail: yu_yang@tjutcm.edu.cn

***通信作者：**李　正，研究员，博士生导师，从事中药智能制造关键技术及装备的研发与产业转化应用基础研究。E-mail: lizheng@tjutcm.edu.cn

龚行楚，男，副教授，博士生导师，从事中药制药技术与装备研究。E-mail: gongxingchu@zju.edu.cn

new paradigm for intelligent quality detection of traditional Chinese medicines.

Key words: traditional Chinese medicine quality detection; multimodal spectral fusion; fusion strategies; deep learning; explainable artificial intelligence

中医药是中华民族的瑰宝，其质量安全与临床疗效直接关联，质量控制历来是中药现代化和国际化的核心议题[1]。中药成分复杂，其化学构成呈现高维度、非线性、协同作用的特征，这种复杂性对传统的质量评价方法构成了根本性挑战[2]。同时，药材在种植、采收、加工等环节的差异会带来显著的批次间波动，生产全过程中也可能引入重金属、农残等外源性污染物[3]。这些因素共同导致中药质量的稳定性和可控性面临严峻考验。

近年来，国家层面已将中药质量智能化提升置于战略高度。2025 年国家印发的《关于提升中药质量促进中医药产业高质量发展的意见》明确提出，要“推进中药全过程质量控制与追溯能力提升，构建中药标准化、智能化、数字化质量体系”，进一步凸显了对中药质量实施智能化严格控制的必要性[4]。在此背景下，构建基于人工智能的中药质量智能检测新范式，已成为中药研究领域的迫切需求与前沿方向[5]。

1 光谱检测技术在中药质量控制中的应用现状

随着化学计量学和人工智能技术的发展，现代光谱分析技术在中药质量控制领域得到了日益广泛的应用。光谱技术具有快速响应、无损检测及无需复杂样品前处理等特点，适用于中药生产过程中的快速质量筛查与大规模检测任务。应用较为成熟的光谱技术主要包括近红外光谱（near-infrared spectroscopy，NIR）、中红外光谱（mid-infrared spectroscopy，MIR）、拉曼光谱（Raman spectroscopy，Raman）、高光谱成像（hyperspectral imaging，HSI）及激光诱导击穿光谱（laser-induced breakdown spectroscopy，LIBS）等[6]。其应用已覆盖从药材源头到制剂终端的全过程。在原料药层面，光谱技术被广泛用于产地溯源、真伪鉴别、品种区分和生长年限鉴定等任务[7]。在中间体层面，光谱技术用于成分含量测定、生产过程监测和质量一致性评价[8]。在制剂产品层面，光谱技术用于溶出行为分析、有效期判断和成品质量放行等环节[9]。

从技术发展趋势来看，光谱技术在中药质量控制中的应用正经历从传统化学计量学方法向机器学习、深度学习等人工智能技术融合的转变[10]。文献计量学分析显示，利用机器学习及多技术联用方法进行中药质量评价可能是未来的主要发展方向[11]。然而，中药体系成分复杂，且受产地、炮制等因素影响显著，多模态光谱信息存在异质性与非线性耦合，限制了模型的跨条件泛化能力，为进一步探索多模态光谱融合策略提供了现实需求。

2 多模态融合的提出与必然性

当前，大多数中药质量检测方法仍针对特定分析需求选择单一光谱源，但仅依靠单一光谱信息进行分析的检测精度往往难以满足实际应用需求[12]。因此，从整体检测角度出发进行中药质量的综合评价，已成为领域内亟待解决的关键问题[13]。

为此，研究学者提出了多模态光谱融合技术，其核心思想是将多种信息源进行协同整合以实现整体分析[14]。相关研究成果表明，多模态光谱融合技术在产地溯源、伪劣品鉴别、药材品质评价、中药生产过程质量检测、中药炮制过程动态监控、中药制剂及产品包装质量检测等方面均展现出显著优势[5-6]。本文就多模态光谱融合技术在中药智能检测方面的研究进展进行系统综述，围绕融合技术策略、核心算法与现存挑战 3 个维度展开讨论，见图 1。

3 单模态光谱技术特点

不同光谱技术能够反映中药样品不同层面的信息，包括有机成分、无机元素及空间分布特征，具有较好的信息互补性，是多模态光谱融合的重要基础[15]。常用光谱技术的检测信息、适用场景及局限性见表 1。

不同光谱技术获取的信息具有较强互补性。其中，NIR、MIR 和 Raman 主要反映化学组成信息，HSI 提供空间分布信息，LIBS 反映元素组成信息。多源信息的互补为中药复杂体系的综合表征和多模态光谱融合提供了基础[20]。

4 多模态光谱融合策略

多模态光谱融合是将不同光谱技术获取的互补信息进行整合，以提高中药复杂体系质量表征能力的方法。根据融合层级不同，可分为数据层融合、特征层融合和决策层融合。3 类策略的具体流程见图 2。

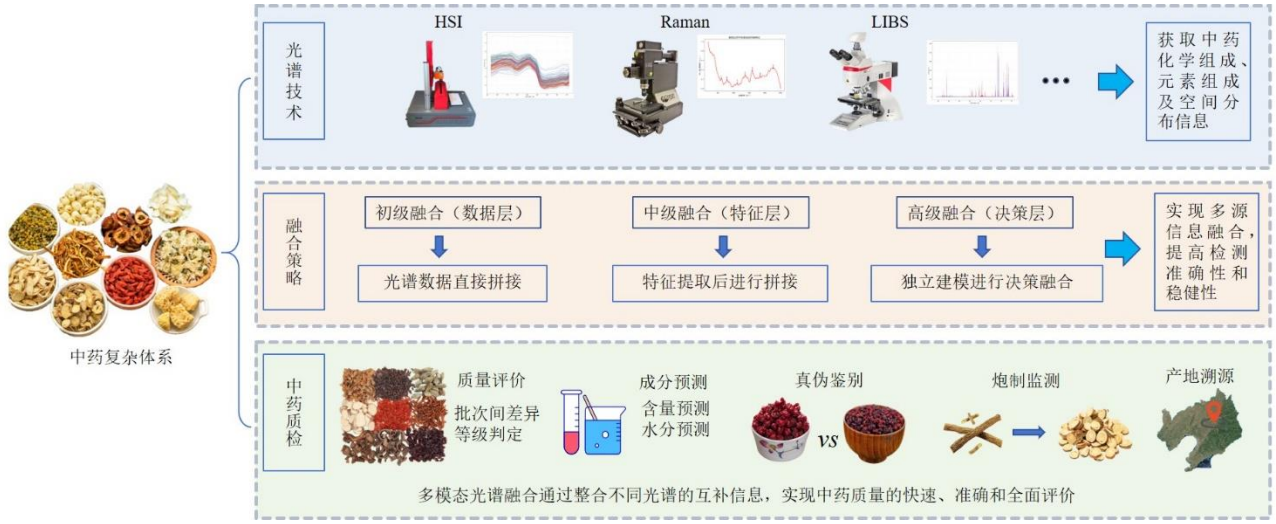


图 1　多模态光谱融合在中药质量检测中的总体框架

Fig. 1　Overall framework of multimodal spectral fusion in traditional Chinese medicine quality detection

表 1　常用光谱技术特点及应用比较

Table 1　Comparison of characteristics and applications of commonly used spectral techniques

光谱技术	主要获取信息	适用中药检测场景	主要局限
NIR	有机成分整体信息、水分相关信息	水分测定、成分预测、过程监测[11]	谱带重叠，特异性不足
MIR	官能团与结构特征信息	真伪鉴别、结构识别[16]	受水分干扰大、样品制备要求高
Raman	分子骨架及非极性键相关信息	微量成分检测、红外互补分析[17-18]	荧光干扰、信号较弱
HSI	光谱信息与空间分布信息	饮片均匀性评价、真伪与品种识别[7,19]	数据量大、处理复杂
LIBS	无机元素组成信息	重金属检测、产地溯源、矿物药鉴别[20]	灵敏度和定量精度有限

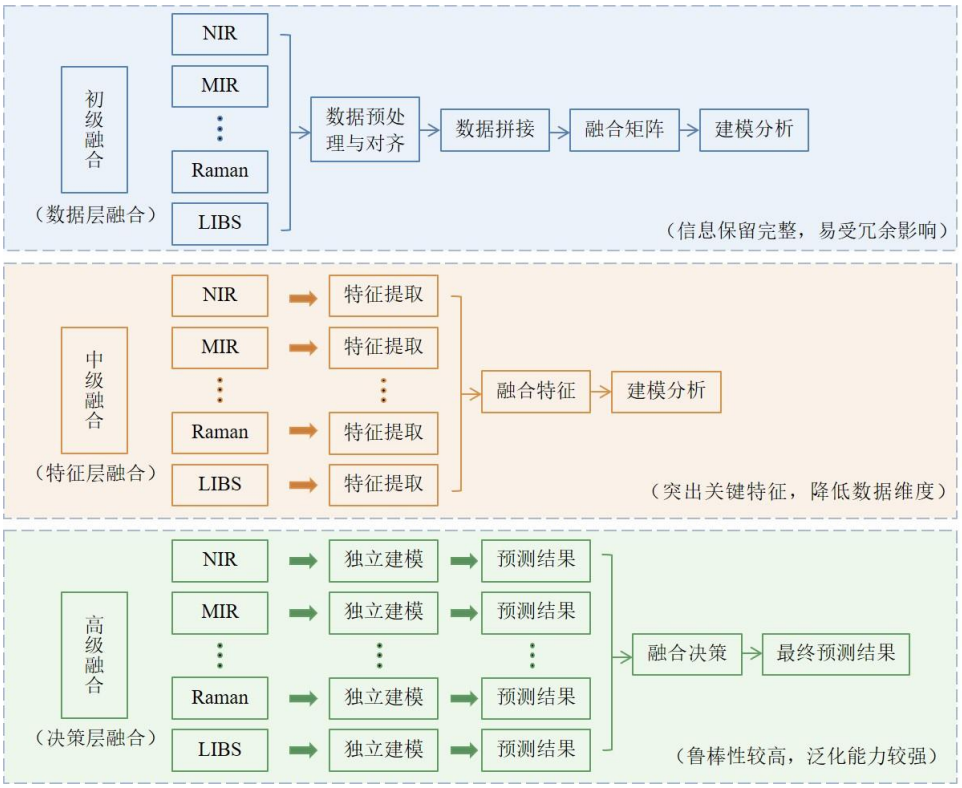


图 2　多模态光谱 3 种融合策略及信息流示意图

Fig. 2　Schematic diagram of three fusion strategies and information flow for multimodal spectra

4.1 初级融合策略

初级融合（数据层融合）是将不同光谱的原始或预处理数据在输入层直接拼接，形成融合特征矩阵后用于建模分析。由于不同光谱仪器在波长范围、分辨率及采样间隔上存在差异，融合前通常需进行波长匹配、散射校正、基线校正和数据标准化处理，以提高不同模态数据的可比性[21-22]；当融合模态较多时，可采用结构化表示方式保留模态间关联信息[23]。该策略操作简便，能够较完整地保留原始光谱信息。

4.1.1 初级融合在中药质量检测中的典型应用 初级融合因流程直观、信息保留较完整，在中药材品种鉴别、制造过程监控及饮片质量一致性评价等方面已有应用。

在中药材品种鉴别方面，Tian 等[24]将近红外与中红外光谱进行数据层融合，并结合偏最小二乘-判别分析（partial least squares-discriminant analysis，PLS-DA）建立分类模型用于不同物种黄连的快速鉴别。研究结果表明，融合模型的预测性能显著优于单一光谱模型，其中融合模型 RPD 值超过 3.0，表现出更优的判别能力，说明不同光谱信息之间具有良好的互补性。

在中药制造过程监控方面，Zhang 等[25]将 NIR 与 MIR 进行初级融合，并结合 PLS 建立小儿消积止咳口服液提取过程多关键质量属性的在线监测模型。结果表明，融合模型能够有效表征提取过程中多种活性成分的动态变化，各指标成分的预测模型均表现出较高的拟合精度（R^2 均＞0.95），实现了多组分的同步定量分析。

在中药饮片质量一致性评价方面，韩燕雨等[26]整合白术饮片的多源信息，包括 NIR、电子舌响应及理化指标等，在数据层构建综合特征矩阵，并结合主成分分析（principal component analysis，PCA）与聚类分析对不同批次样品进行质量评价。结果表明，初级融合能够有效揭示样品间的整体质量差异，不同质量等级样品在得分空间中呈现明显分离，分类结果准确率达到 100%，体现出良好的质量区分能力。

4.1.2 初级融合策略的改进方向 传统初级融合多采用直接向量拼接的方式，近年来研究者提出了多种改进策略，以提升融合效率并抑制模态间冗余。

（1）结构化表达：针对多模态数据维度高、变量冗余的问题，可采用张量表示等方法组织样本、波长与模态信息，在保留多源数据结构的同时降低信息碎片化风险[22]。（2）知识约束融合：针对融合结果解释性不足的问题，可将官能团特征峰、成分归属等化学先验知识引入融合过程，使模型结果更具药学解释意义[23]。（3）跨模态校正：针对不同仪器、批次和产地样品间的数据漂移问题，可通过跨模态对齐等方法减弱模态差异，提高融合模型在复杂检测场景中的稳定性[27]。

上述 3 种策略反映了初级融合策略正由简单的数据拼接向提高数据利用效率、增强模型可解释性和提升跨场景适应能力等方向发展，为复杂中药样品的质量评价提供了新的解决思路。

4.2 中级融合策略

中级融合（特征层融合）是在分别提取不同光谱特征的基础上，将各模态特征在特征空间中进行组合后用于建模分析。

中级融合通常包括特征提取、特征对齐和特征融合等环节。首先，可采用 PCA、小波变换或光谱特征峰提取等方法，从各模态数据中提取与中药质量相关的关键信息[28]。随后，通过标准化、归一化或降维处理减少不同模态间的量纲、分布及维度差异[29]；最后，将对齐后的特征进行拼接、加权或相关性融合，构建联合特征表达，用于后续分类或定量分析[30]。

4.2.1 中级融合在中药质量检测中的典型应用 中级融合策略因能够从不同光谱中提取具有物理或化学可解释性的特征向量并于特征层进行组合，在降低数据冗余的同时保留关键质量信息，在中药质量检测的产地溯源、真伪鉴别及成分定量等场景中得到广泛应用。

在产地溯源与真伪鉴别方面，Jiao 等[31]基于近红外与中红外光谱构建中级融合模型，并结合变量选择算法和 PLS-DA 实现丹参产地判别。结果表明，中级融合模型的判别准确率达到 100%，优于单一光谱模型，说明特征层融合能够有效增强产地差异信息的表达。

在药材生长年份区分方面，Chen 等[32]融合可见光-近红外、短波红外光谱信息及空间图像特征，构建全连接卷积神经网络模型用于 1～7 年生人参年份鉴别。该方法通过不同分支提取多模态特征，并在全连接层进行融合，显著提升了食用与药用人参的区分能力，二分类准确率达到 100%。

在成分含量预测与质量综合评价方面，Cao

等[22]将近红外与紫外光谱进行中级融合，并结合最小二乘支持向量机建立热毒宁注射液多成分定量预测模型。结果显示中级融合模型能够同步预测多种化学成分及生物活性指标，整体预测性能优于单一光谱模型；进一步的模型集成也提升了预测精度。

在炮制过程质量监控方面，Lan 等[33]整合傅里叶变换近红外光谱（Fourier transform infrared spectroscopy，FTIR）、电子鼻和色度计信息，构建中级融合模型用于评价莪术炮制过程中内外部质量变化。结果表明多源信息融合能够有效区分不同炮制品，整体识别性能优于单一数据源模型。

4.2.2 中级融合策略的改进方向 传统中级融合多采用特征筛选后串联拼接的方式，近年来研究者提出多种改进策略，以提高特征质量并增强模态间关联性（表 2）。

表 2 常用特征提取与选择方法比较

Table 2 Comparison of commonly uesd feature extraction and selection methods

算法类别	代表性算法	主要作用	适用场景
过滤式	VIP、UVE 等	快速筛选重要变量	高维光谱数据的快速初筛
包裹式	CARS、SPA 等	根据模型效果优化变量组合	小样本精筛（产地判别等）
非线性降维	KPCA、自编码器等	提取复杂非线性特征	多成分相互作用体系
嵌入/稀疏式	Lasso、稀疏主成分分析等	压缩冗余变量，保留关键特征	特征波长筛选与定量建模

VIP-变量投影重要性；UVE-无信息变量消除；CARS-竞争性自适应重加权采样；SPA-连续投影算法；KPCA-核主成分分析；Lasso-最小绝对收缩与选择算子。

VIP-variable importance in projection; UVE-uninformative variable elimination; CARS-competitive adaptive reweighted sampling; SPA-successive projections algorithm; KPCA-kernel principal component analysis; Lasso-least absolute shrinkage and selection operator.

（1）特征筛选优化：针对单一算法筛选结果不稳定的问题，可综合 VIP、UVE、CARS、SPA 等方法进行变量优选，减少冗余波长对模型的干扰。Ren 等[29]在莪术多模态光谱融合中提出 VIP 引导的集成策略，构建多成分预测模型，性能优于单一模型。（2）非线性特征提取：中药光谱中存在浓度响应偏离及成分相互作用等非线性关系。KPCA、自编码器等方法可用于提取复杂特征，提高模型对中药复杂体系的表征能力。宋超[34]在黄芪多谱图融合研究中发现，非线性降维方法较传统线性方法更有利于提取有效质量信息。（3）稀疏特征学习：针对高维光谱变量冗余问题，Lasso 回归、稀疏主成分分析等方法可筛选与质量属性密切相关的关键波长，减少无关信息干扰，并增强模型的化学解释性。宋超[34]采用稀疏表示方法对黄芪多谱图数据进行特征建模，实现了关键变量筛选与质量评价。

综上，中级融合的改进重点已由特征拼接逐步转向特征质量提升与模型可解释性增强，以适应中药复杂体系的质量评价需求。

4.3 高级融合策略

高级融合（决策层融合）是各光谱模态分别完成特征提取与建模的基础上，对不同模态的预测结果或高层特征进行综合分析的方法。

在实现方式上，高级融合主要包括 3 类形式：一是基于模型输出的融合方法，即对不同模态模型的预测结果进行加权平均或投票集成；二是基于特征层的融合方法，即对各模态提取的高层特征进行整合后进行统一建模；三是基于混合结构的融合方法，在保持各模态独立建模的基础上引入联合优化机制，以提升整体预测性能[35]。相关研究通过多源光谱信息融合提高模型协同表达能力[36]。并结合模型解释方法识别关键波长及其来源模态，为中药质量标志物解析提供支持[37]。

4.3.1 高级融合在中药质量检测中的典型应用 该策略允许各模态独立建模，有效规避异构数据间的相互干扰，在中药产地溯源、质量一致性评价及关键质量属性预测中展现出优于单一模型的预测稳健性。

在产地溯源方面，吴雪梅[38]以滇重楼为研究对象，基于近红外、中红外及衰减全反射光谱构建多模型体系，并在决策层进行加权集成。结果表明，高级融合模型分类准确率达到 100%，优于初级融合与中级融合模型。

在质量一致性评价方面，Yan 等[39]以六味地黄丸为研究对象，整合紫外光谱指纹图谱、多波长融合指纹图谱及抗氧化活性数据，在决策层实现化学信息与生物效应信息的融合。结果显示该策略能够提高质量一致性评价的准确性与相关性。

在关键质量属性预测方面，毛胜楠[40]以余甘子为研究对象，基于 FTIR 与可见/近红外高光谱成像

数据，分别建立多个单模态预测模型，并通过决策层加权实现高级融合。结果表明，高级融合模型在水分含量、粒径及流动性预测中均表现出更高的决定系数，均显著优于单一光谱模型及初级、中级融合模型。

4.3.2 高级融合策略的改进方向 传统高级融合多采用投票法或简单加权平均进行决策集成，在中药多源光谱分析中易受模型性能差异、样本复杂性及检测环境变化等因素影响。近年来，研究者围绕提高决策可靠性、增强模型稳定性和提升应用适应性等方面开展了改进研究。

（1）自适应决策融合：针对不同光谱模态对质量信息贡献程度不同的问题，可根据各模型预测结果的可靠性动态调整融合权重，提高产地鉴别、真伪识别及质量评价等任务的决策稳定性。（2）模型协同优化：针对单一模型泛化能力不足的问题，通过整合不同光谱模型的优势，实现多源信息互补，提高复杂中药体系中关键质量属性预测的准确性和模型鲁棒性。（3）多层级融合框架：针对单一融合策略信息利用不足的问题，将数据层、特征层与决策层融合方法协同应用，充分发挥不同层级信息的互补优势，提高复杂中药样品的综合表征能力和质量评价水平。

上述改进表明，高级融合策略正由单一决策集成向自适应融合、多模型协同和多层级融合方向发展，在提高中药质量评价准确性、模型稳定性及复杂样品适应性方面具有较好的应用前景。

4.4 融合策略的选择与适用场景分析

4.4.1 3 类策略的核心差异对比 3 类策略在融合层级上呈现“数据→特征→决策”的递进关系，在数据对齐要求上从“严格”逐步放宽至“完全兼容”，而计算复杂度与抗干扰能力则依次递增。这种差异决定了它们在不同中药质量检测场景中的适用性各有侧重，见表 3。

表 3 3 类融合策略对比

Table 3 Comparison of three fusion strategies

对比维度	初级融合（数据层）	中级融合（特征层）	高级融合（决策层）
融合层级	原始/预处理数据直接拼接	各模态独立提取特征后再进行拼接或加权	各模态独立建模后，对预测结果进行集成
数据对齐要求	需统一波长、分辨率，物理坐标必须对齐	可处理异构数据，无需严格物理坐标对齐	完全兼容异构数据，各模态可独立采集与处理
信息保留程度	保留完整的原始指纹信息，无信息损失	保留提取后的特征信息，可能损失部分细节	仅保留各模型的决策结果，原始信息损失最大
计算复杂度	低（仅需预处理＋拼接）	中（需特征提取＋融合建模）	高（需训练多个基模型＋元模型）
抗干扰能力	弱（噪声与冗余变量易混入）	中（特征筛选可剔除部分噪声）	强（各模态独立建模，互不干扰）
可解释性	较低（难以追溯各模态贡献）	中（特征来源相对明确）	较高（可通过权重或集成系数分析模态重要性）
典型应用场景	中药制造过程在线监控、快速质量筛查	产地溯源、真伪鉴别、炮制过程分析	多质量属性综合评价等

4.4.2 选择原则与适用建议 3 类融合策略各有优劣，实际应用中需综合考虑数据特征、分析目标和计算资源等因素进行选择。

初级融合要求各模态光谱的物理坐标严格对齐，适合数据预处理流程标准化、追求快速响应的检测任务。当波长范围和分辨率相近，且样本量充足时可优先采用。典型场景包括中药制造过程中的在线质量监控、提取过程终点判断以及快速质量筛查。该策略实现简单、计算效率高，但抗干扰能力较弱。

中级融合可处理异构数据，无需物理坐标严格对齐，适合多源信息互补的分析任务。当融合对象涉及不同类型数据（如光谱与图像），或需要灵活提取判别特征时推荐采用，典型场景包括产地溯源、基原鉴别、炮制质量评价等。该策略在预测精度和计算效率之间取得较好平衡，应用最为广泛。

高级融合对各模态数据格式无特殊要求，允许独立建模后进行决策集成，适合各模态预测能力不均衡或追求高稳健性的任务。典型场景包括多质量属性同步评价、化学成分与生物活性联合预测等。该策略鲁棒性强、可解释性高，但计算复杂度较大。

上述 3 类策略在实际应用中，建议通过预实验比较在同一数据集上的表现，兼顾预测精度与计算成本择优选用；若 3 种策略性能接近，优先选择实现更简单的初级融合。

5 多模态光谱融合算法

5.1 数据预处理与特征工程

光谱数据预处理与特征工程是多模态光谱融

合建模的重要基础环节。由于不同光谱模态在信号强度、噪声水平、基线漂移及数据维度等方面存在差异，原始数据直接融合可能引入噪声和冗余信息，影响模型稳定性与预测性能。因此，通常需通过散射校正、平滑去噪和基线校正等方法提高数据质量，并结合降维、变量选择及非线性特征提取等方法提取有效信息，为后续多模态融合与建模奠定基础[41]。常用方法见表 4。

表 4　数据预处理与特征工程对比

Table 4　Comparison of data preprocessing and feature engineering

处理环节	类别	常用算法
数据预处理	散射校正	多元散射校正、标准正态变量变换
	平滑去噪	Savitzky-Golay 平滑、小波变换、移动平均平滑
	基线校正	一阶/二阶导数、连续小波变换
特征工程	线性降维	PCA、PLS
	变量选择	CARS、遗传算法、SPA
	非线性提取	KPCA、自编码器

5.2　建模算法：从传统机器学习到深度学习

多模态光谱融合后的特征矩阵需借助建模算法实现定性分类或定量预测。随着人工智能技术的发展，建模算法经历了从传统机器学习到深度学习的演进。

传统机器学习模型如 PLS-DA、支持向量机、随机森林等，计算效率高、小样本下泛化能力良好，在中药多模态光谱融合中应用广泛。尤其对于工业质控场景，传统模型稳健性强、可解释性好、部署门槛低，在样本量有限的实际生产中仍具不可替代的实用价值。但其性能依赖特征工程质量，对于组成复杂的中药体系，表征能力相对有限。

深度学习模型能够在一定程度上实现特征提取与融合建模的联合优化，适用于样本量相对充足、数据质量较高、数据结构复杂或多模态关联较强的检测任务。然而，中药质量检测常面临高维小样本问题，在样本量不足或数据代表性有限时，深度学习模型易发生过拟合，且其训练与部署成本相对较高[42]。以 Bai 等[43]在丹参产地溯源中的研究为例，其基于 HSI 数据融合光谱与颜色信息，并结合 Transformer 模型建立产地分类模型。结果表明，融合模型较单一光谱模型具有更高的分类准确率，说明在数据基础较充分的条件下，深度学习结合多源信息融合有助于提升复杂中药样品的识别性能。

5.3　可解释性人工智能（explainable artificial intelligence，XAI）

多模态光谱融合模型（尤其是深度学习模型）的“黑箱”特性限制了其在中药质量检测中的可信度。XAI 的引入旨在使模型的预测结果具备可追溯、可理解的化学或物理意义。

沙普利加性解释（Shapley additive explanations，SHAP）是目前光谱分析领域应用最广泛的可解释方法之一[44]。Bai 等[37]在黄芪质量鉴别研究中，将近红外与可见光谱数据融合后建立分类模型，并采用 SHAP 分析关键波长贡献。结果表明，SHAP 值识别出的关键波长区域与黄芪中黄芪甲苷、毛蕊异黄酮等活性成分的特征吸收峰高度吻合，验证了模型决策的化学合理性。

因此，在中药多模态光谱融合研究中，算法选择应结合具体应用目标综合考虑。现有研究表明：以快速筛查为主要目的、可解释性要求不高的场景中，传统机器学习模型因计算效率高而更具优势；当预测精度优先且计算资源充足时，深度学习模型可提供更优的建模效果；若需明确解释模型决策依据，则需配合 SHAP 等可解释性方法。由此可见，融合策略的选择不仅涉及数据层面，还需将后续建模算法与可解释性需求纳入整体考量。

6　挑战与展望

尽管多模态光谱融合策略在中药质量检测中展现出显著优势，但其在数据、模型及实际应用层面仍面临诸多挑战。本文从数据质量、模型构建及未来发展方向 3 个维度进行系统分析。

6.1　数据层面的挑战与应对策略

6.1.1　数据采集标准不统一　在中药实际检测过程中，不同仪器、不同实验条件及不同批次样品之间的检测标准存在差异，导致多源光谱数据在一致性与可比性方面受到限制，从而影响质量评价结果的稳定性与可重复性[45]。因此，推动建立统一的中药多模态光谱采集规范，是提升数据可靠性与模型泛化能力的重要基础[31]。

6.1.2　数据量不足　多模态技术可为每个样品采集数百至数千个特征变量，呈现典型的“高维小样本”特征，模型极易过拟合，泛化能力下降。广东省科学院智能制造研究所提出基于生成对抗网络的高光谱定量分析方法，通过生成虚拟样本填补缺口并挖掘数据内部结构信息，为小样本条件下的高精度建模提供了有效解决方案[46]。

6.1.3 标注依赖性强与成本高　多模态光谱融合模型通常依赖大量高质量标注数据，而中药质量检测的标签获取高度依赖专业检测手段与专家经验，过程复杂且成本较高，限制了数据规模的扩展与模型的持续优化。已有研究通过结合有限标注数据与未标注数据的信息，提高模型学习效率，并通过优化样本利用方式减少标注负担，在一定程度上缓解标注成本问题[46]。

6.2 模型层面的挑战与应对策略

6.2.1 异构特征深层融合困难　不同光谱技术在中药质量检测中分别反映成分组成、结构特征及整体响应等不同层面的信息，但由于信息来源与表征侧重点不同，简单融合容易导致部分信息被削弱或掩盖，从而影响对中药整体质量的综合判断。在多源光谱融合过程中，可能出现单一光谱信息主导整体表达的现象，削弱多源信息的互补性，进而影响分析结果的全面性与稳定性。Jiao 等[47]通过优化多源光谱信息的协同利用方式，在一定程度上改善了不同光谱信息之间的互补表达能力。

6.2.2 过参数化与泛化风险　多模态光谱融合模型参数量巨大，而中药检测样本通常仅数百至数千例，“过参数化”与“小样本”的矛盾导致严重过拟合。Pankajakshan 等[48]提出的轻量化架构（仅需 1%～10%标注数据、至多 2 个可调参数）有效抑制了过拟合，为小样本场景提供了可行路径。

6.2.3 可解释性缺失　深度学习模型的内部决策过程缺乏透明性，与中药质量评价及监管体系对结果可追溯性的要求存在矛盾。不同光谱信息对最终质量判断的贡献难以清晰区分，影响结果的可解释性与应用可信度。Yan 等[49]将 SHAP 引入中药多模态评估，量化各模态特征贡献，实现了特征归因与化学语义的统一解释。

6.2.4 模态缺失鲁棒性差　不同光谱模态的数据分布与信息密度存在显著差异，如 NIR 与 Raman 对分子结构的敏感性不同。仪器故障或样品限制常导致部分模态缺失，标准模型缺乏容错机制，性能可能断崖式下降。Sikdar 等[50]利用完整光谱信息建立的模型知识指导缺失光谱信息的分析，在不依赖额外数据补全的情况下，提高了模型在部分光谱信息缺失条件下的稳定性。

6.2.5 跨场景迁移障碍　实验室训练的模型迁移至不同仪器或批次时，常因数据分布差异而导致性能下降，限制了其在中药质量检测中的推广应用。在多模态光谱分析中，不同光谱信息变化不一致，进一步增加了模型在跨场景条件下的应用难度。Wang 等[51]通过提高模型对不同光谱数据来源的适应能力，改善了跨场景条件下的模型稳定性，为中药多模态光谱融合模型的跨仪器、跨批次应用提供了参考。

6.2.6 计算复杂度与实时检测的矛盾　多模态融合模型计算开销随模态数量非线性增长，与中药在线生产毫秒级实时检测的要求尖锐矛盾。模型压缩技术易导致光谱数据精度衰减。更深层次的制约在于硬件工程层面：多探头顺序采集易受液体流动与工艺波动影响，导致不同光谱数据在时间上难以严格对应；多通道触发存在微小延迟，在高速生产条件下可能造成采样不同步；此外，探头表面在长时间高温高湿的提取、浓缩环境中易发生药液附着，造成交叉污染和信号衰减。这些工程层面的限制表明，仅依赖算法优化难以解决工业在线应用中的相关问题，还需从传感器布局、抗污染设计及在线校准等方面综合改进。Pankajakshan 等[48]的研究表明轻量化的模型设计可在保持精度前提下大幅降低计算量，启示多模态融合应优先探索模态协同的轻量化机制，而非简单堆叠后压缩。

6.3 展望

中药质量智能检测正经历从“单模态、实验室、离线分析”向“多模态、生产线、在线检测”的转型。多模态光谱融合已在研究层面证明了其价值，但从实验室走向产业常规应用，仍面临数据、模型与工程 3 方面瓶颈。硬件成本的持续下降为技术普及创造了条件，融合算法的不断成熟提供了核心驱动力，而行业标准的建立则是大规模应用的前提。未来研究应进一步加强多源光谱数据规范化建设，提升模型在复杂生产环境下的鲁棒性，并推动算法方法与中药生产检测场景的深度融合，以支持中药质量评价的智能化与在线化发展。

本文系统梳理了多模态光谱融合技术在中药质量智能检测领域的研究进展，从单模态光谱的基础特性出发，依次论述了融合策略的分类体系、建模算法的发展脉络，并分析了数据层与模型层的核心挑战。

单模态光谱方面，NIR、MIR、Raman 等技术各有特定的分子振动响应机制，单一模态难以全面表征中药复杂体系的化学信息，多模态互补成为必然选择。融合策略方面，初级融合实现简单但易受

噪声干扰，高级融合鲁棒性强但损失模态间相关性，中级融合在信息完整度与鲁棒性之间取得平衡，应用最为广泛。建模算法方面，从偏最小二乘等传统机器学习到卷积神经网络、Transformer 等深度学习模型，特征提取能力持续提升；XAI 为缓解“黑箱”问题提供了可行路径。

挑战分析方面，数据层面临采集标准化缺失、高维小样本困境、标注成本高昂及模态异质性等问题；模型层面临不同类型的光谱信息融合困难、过参数化、可解释性不足、模态缺失鲁棒性差及跨场景迁移障碍等瓶颈。这些挑战相互交织，制约着技术从学术研究向产业应用的转化。

综上所述，多模态光谱融合通过信息互补机制，在中药真伪鉴别、产地溯源及成分定量等任务中已展现出显著优于单模态方法的性能优势。本文所综述的策略、算法与挑战，共同构成了中药质量智能检测新范式的核心框架。该范式的确立与完善，将为中药质量控制体系的现代化升级提供重要的技术支撑与理论依据。

利益冲突 所有作者均声明不存在利益冲突

参考文献

[1] 陈丽华, 肖发林, 黄诗雨, 等. 中药质量评价研究思路及创新发展趋势 [J]. 中草药, 2021, 52(9): 2541-2547.

[2] 李天娇, 包永睿, 王帅, 等. 中药质量控制与评价创新方法研究进展及应用 [J]. 中草药, 2022, 53(20): 6319-6327.

[3] 王胜鹏, 梁重恒, 李鹏, 等. 基于作用机制的中药质量研究体系 [J]. 中国科学: 生命科学, 2025, 55(4): 607-617.

[4] 郭强, 李铭轩, 窦慧, 等. 中药饮片数智化质控范式变革: 技术驱动下的行业升级之路 [J]. 中国中药杂志, 2025, 50(21): 5905-5914.

[5] 解文欣, 张紫萱, 刘越, 等. 人工智能在中药质量中的应用及研究进展 [J]. 中草药, 2025, 56(15): 5616-5631.

[6] 伍洲游, 于洋, 赵倩, 等. 光谱技术在中药快速检测领域的研究进展及应用 [J]. 天津中医药大学学报, 2025, 44(12): 1119-1126.

[7] 杨念, 戴胜云, 吴东雪, 等. 基于近红外光谱和高光谱技术结合化学计量学的草乌叶产地溯源分析 [J]. 中国药学杂志, 2026, 61(7): 734-744.

[8] 赵喆, 谭吉锋, 陈鹏, 等. 基于多光谱传感技术的中药材生长监测系统设计与应用研究 [J]. 科技资讯, 2024, 22(24): 160-162.

[9] 万鑫浩, 陶青, 王子千, 等. 基于机器学习的中药制剂快速无损检测技术研究进展 [J]. 中国中药杂志, 2024, 49(24): 6541-6548.

[10] Li M Y, Zhu J Q, Liu X N, *et al*. Application and research progress on artificial intelligence in the quality of traditional Chinese medicine [J]. *Front Pharmacol*, 2025, 16: 1687681.

[11] 李国沼, 陈莘雨, 高建平, 等. 基于文献计量学的近红外光谱技术在中药质量控制领域的研究热点与趋势分析 [J]. 药物评价研究, 2025, 48(8): 2327-2338.

[12] 傅饶, 史亚博, 李铭轩, 等. 基于多源数据融合的丹参饮片产地溯源研究 [J]. 南京中医药大学学报, 2024, 40(12): 1414-1423.

[13] 孙昱, 徐敢, 马双成. 中药质量整体评价研究思路探讨 [J]. 药学学报, 2021, 56(7): 1749-1756.

[14] 王洋. 基于多源光谱融合技术结合随机森林的黄芪药材与制剂的判别分析方法 [D]. 西安: 西北大学, 2022.

[15] 胡晓蓉. 光谱技术在食品安全检测中的应用研究进展 [J]. 食品安全导刊, 2024(17): 158-160.

[16] 李真, 周立红, 叶正良, 等. 近红外光谱分析技术在药物质量分析中的应用进展 [J]. 药物评价研究, 2016, 39(4): 686-692.

[17] 陶益, 陈林, 朱菲, 等. 人工智能视域下拉曼光谱分析技术融合深度学习算法在中药生产过程质量控制中的应用 [J]. 中国现代中药, 2022, 24(1): 176-180.

[18] Zhao R, Wang Q S, Wang Y Q, *et al*. Surface enhanced Raman scattering (SERS) for traditional Chinese medicine analysis: Current status and future perspectives [J]. *Trac Trends Anal Chem*, 2025, 193: 118479.

[19] 栾美琪, 熊丰, 戴瑶瑶, 等. 基于高光谱技术的中药材丹参中酚酸类成分快速检测技术研究 [J]. 中国中药杂志, 2025, 50(22): 6319-6327.

[20] 赵倩, 缪培琪, 刘长青, 等. 基于 LIBS 的中药质量检测技术与应用 [J]. 天津中医药, 2022, 39(6): 809-816.

[21] 谢玉玉, 陈志慧, 侯雪玲, 等. 近红外光谱结合化学计量学快速测定阿里红饮片中齿孔酸含量 [J]. 光谱学与光谱分析, 2024, 44(10): 2981-2987.

[22] Cao L, Zhao Y W, Chen X L, *et al*. Integrated quality evaluation of traditional Chinese medicine based on chemical composition and biological effects using high-level data fusion of near-infrared and ultraviolet spectroscopy combined with machine learning [J]. *Measurement*, 2026, 258: 118972.

[23] Zhang L, Huo Q L, Li D L, *et al*. A multimodal tensor data fused *Astragalus Slices* quality grades method [J]. *Big Data Min Anal*, 2026, 9(2): 519-535.

[24] Tian M Y, Ma X B, Liang M Y, *et al*. Application of rapid identification and determination of moisture content of *Coptidis Rhizoma* from different species based on data fusion [J]. *J AOAC Int*, 2023, 106(5): 1389-1401.

[25] Zhang J, Xu X H, Li L, *et al*. Multi critical quality attributes monitoring of Chinese oral liquid extraction process with a spectral sensor fusion strategy [J]. *Spectrochim Acta Part A Mol Biomol Spectrosc*, 2022, 278: 121317.

[26] 韩燕雨, 吴志生, 戴平, 等. 多源信息融合的中药制造

白术饮片多维质量属性一致性的诊断策略 [J]. 中国中药杂志, 2024, 49(9): 2434-2440.

[27] 刘宇强, 石胜群, 张猛胜, 等. LIBS-NIR 光谱信息融合的黄芪产地鉴别 [J]. 红外与激光工程, 2025, 54(6): 20250003.

[28] 张娇, 王元忠, 杨维泽, 等. ATR-FTIR 和 UV-Vis 结合数据融合策略鉴别滇黄精产地 [J]. 光谱学与光谱分析, 2021, 41(5): 1410-1416.

[29] Ren X Y, Sun Y Y, He T, *et al*. Species discrimination and VIP-stacking quantitative models for *Curcumae Rhizoma* utilizing multi-modal spectra combined with machine learning algorithm [J]. *J Pharm Biomed Anal*, 2025, 266: 117092.

[30] Zhang H, Zhang H X, Wu S R, *et al*. Precise classification of traditional Chinese medicine sources using intelligent fusion of hyperspectral imaging-mass spectrometry data combined with machine learning: A case study of American ginseng [J]. *Spectrochim Acta Part A Mol Biomol Spectrosc*, 2025, 336: 126066.

[31] Jiao Y, Wu X M, Wang Q, *et al*. Multisource spectral fusion combined with variable selection for rapid geographical origin discrimination of *Salvia miltiorrhiza* [J]. *Front Chem*, 2025, 13: 1730996.

[32] Chen X F, Du H J, Liu Y, *et al*. Fully connected-convolutional (FC-CNN) neural network based on hyperspectral images for rapid identification of *P. ginseng* growth years [J]. *Sci Rep*, 2024, 14: 7209.

[33] Lan Z W, Zhang Y, Sun Y, *et al*. A mid-level data fusion approach for evaluating the internal and external changes determined by FT-NIR, electronic nose and colorimeter in *Curcumae Rhizoma* processing [J]. *J Pharm Biomed Anal*, 2020, 188: 113387.

[34] 宋超. 基于多谱融合—稀疏模型在黄芪原产地质量管理评价中的应用 [D]. 南京: 南京财经大学, 2017.

[35] Fu R, Chen P, Dong W H, *et al*. Integrated multidimensional spectra and multilevel data optimization for rapid origin tracing and quality assessment of *Salvia miltiorrhiza* [J]. *Microchem J*, 2025, 213: 113755.

[36] Shang R H, Xie Y H, Zhang W T, *et al*. Joint adversarial network with semantic and topology fusion for cross-scene hyperspectral image classification [J]. *IEEE Trans Geosci Remote Sens*, 2024, 62: 5521116.

[37] Bai L, Zhang Z T, Yuan D P, *et al*. Spectroscopic techniques combined with DD-SIMCA model and explainable artificial intelligence for rapidly and accurately identifying the quality of *Astragali Radix* [J]. *Ind Crops Prod*, 2025, 231: 121140.

[38] 吴雪梅. 数据融合策略结合化学计量学对滇重楼产地溯源研究 [D]. 昆明: 云南中医药大学, 2019.

[39] Yan B, Sun G X. Monitoring quality consistency of Liuwei Dihuang Pill by integrating the ultraviolet spectroscopic fingerprint, a multi-wavelength fusion fingerprint method, and antioxidant activities [J]. *J Sep Sci*, 2018, 41(6): 1182-1191.

[40] 毛胜楠. 余甘子立地条件及品质特征的研究 [D]. 成都: 成都中医药大学, 2019.

[41] Mishra P, Biancolillo A, Roger J M, *et al*. New data preprocessing trends based on ensemble of multiple preprocessing techniques [J]. *Trac Trends Anal Chem*, 2020, 132: 116045.

[42] LeCun Y, Bengio Y, Hinton G. Deep learning [J]. *Nature*, 2015, 521(7553): 436-444.

[43] Bai R B, Xiong F, Wang H, *et al*. Deep learning-based fusion of color and spectral features from hyperspectral imaging for the origin identification of *Salvia miltiorrhiza* [J]. *Sci Tradit Chin Med*, 2025, 3(3): 250-258.

[44] Contreras J, Bocklitz T. Explainable artificial intelligence for spectroscopy data: A review [J]. *Pflugers Arch*, 2025, 477(4): 603-615.

[45] Brenner M, Reyes N H, Susnjak T, *et al*. MM5: Multimodal image capture and dataset generation for RGB, depth, thermal, UV, and NIR [J]. *Inf Fusion*, 2026, 126: 103516.

[46] 刘忆森, 周松斌, 李昌, 等. 一种基于生成对抗网络的半监督高光谱数据定量分析方法: CN110320162A [P]. 2019-10-11.

[47] Jiao T Z, Guo C P, Feng X Y, *et al*. A comprehensive survey on deep learning multi-modal fusion: Methods, technologies and applications [J]. *Comput Mater Continua*, 2024, 80(1): 1-35.

[48] Pankajakshan P, Padmasanan A, Sundar S. Deep architectures fail to generalize: A lightweight alternative for agricultural domain transfer in hyperspectral images [J]. *Sensors*, 2026, 26(1): 174.

[49] Yan Y H, Xu R J, Zhao Z Y, *et al*. Integrating digital image analysis, flash GC e-nose, and SHAP-driven interpretable deep learning for non-destructive aging assessment of *Citri Reticulatae Pericarpium* [J]. *Food Chem X*, 2025, 30: 102927.

[50] Sikdar A, Teotia J, Sundaram S. Contrastive learning-based spectral knowledge distillation for multi-modality and missing modality scenarios in semantic segmentation [J/OL]. *arXiv* (2023-12-04) [2026-07-07]. https://arxiv.org/abs/2312.02240.

[51] Wang W Z, Liu F, Liu J, *et al*. Cross-domain few-shot hyperspectral image classification with class-wise attention [J]. *IEEE Trans Geosci Remote Sens*, 2023, 61: 5502418.

[责任编辑 赵慧亮]