

基于深度学习与近红外光谱技术对海洋中药马刀的数智评价研究

王江涛¹, 刘至全¹, 庞晓凤², 郝二伟², 侯媛媛¹, 侯小涛^{2*}, 白 钢^{1*}, 邓家刚²

1. 南开大学药学院, 药物化学生物学全国重点实验室, 天津 300353

2. 广西中医药大学, 广西中药药效研究重点实验室, 广西 南宁 530200

摘要: **目的** 基于广西海洋中药马刀的潜在药效成分, 建立一种快速评价其药材品质与等级的智能分析方法。**方法** 参考《中国药典》2025 年版牡蛎项下方法, 测定马刀中碳酸钙、酸不溶性灰分及浸出物的含量, 并采用茚三酮法测定总氨基酸含量。构建多任务一维卷积神经网络(1D-CNN)模型, 以近红外光谱(near infrared spectroscopy, NIRS)数据为输入, 同步预测多成分含量, 并引入光谱注意力机制提升模型的可解释性。进一步结合 CRITIC 客观赋权法与 TOPSIS 多准则决策算法, 建立端到端的 AI-NIRS 智能评价平台, 依据综合得分实现品质等级的自动划分。**结果** 利用 1D-CNN 模型在 90 批次马刀样品的测定结果基础上建立了得分等级预测模型。与传统偏最小二乘(partial least squares, PLS)近红外模型相比, 多任务 CNN 模型的预测性能显著更优。验证结果表明, 马刀样品的综合得分呈高斯分布, 各质量等级间具有良好区分度, 说明本研究建立的等级评价方法具有良好的适用性和可靠性。**结论** 在现行的监管体系框架下, 实现了对马刀药材品质的快速综合评价与等级划分, 为贝类海洋中药的数智评价与科学监管提供了新的技术路径。

关键词: 马刀; 近红外光谱技术; 质量评价; 深度学习; 一维卷积神经网络

中图分类号: R282.6 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-2670(2026)14-5459-11

DOI: 10.7501/j.issn.0253-2670.2026.14.008

Digital-intelligent evaluation of marine traditional Chinese medicinal material Madao based on deep learning and near-infrared spectroscopy

WANG Jiangtao¹, LIU Zhiqian¹, PANG Xiaofeng², HAO Erwei², HOU Yuanyuan¹, HOU Xiaotao², BAI Gang¹, DENG Jiagang²

1. State Key Laboratory of Medicinal Chemical Biology, College of Pharmacy, Nankai University, Tianjin 300353, China

2. Guangxi Key Laboratory of Efficacy Study on Chinese Materia Medica, Guangxi University of Chinese Medicine, Nanning 530200, China

Abstract: **Objective** To establish a rapid and intelligent analytical method for evaluating the quality and grade of the marine traditional Chinese medicinal material Madao, from Guangxi, based on its potential pharmacodynamic components. **Methods** The contents of calcium carbonate, acid-insoluble ash, and extractives in Madao were determined following the methods specified for oysters in the Chinese Pharmacopeia (2025 edition). The total amino acid content was measured using the ninhydrin method. A multi-task one-dimensional convolutional neural network (1D-CNN) model was constructed, using near-infrared spectroscopy (NIRS) data as input to simultaneously predict the contents of multiple components. A spectral attention mechanism was introduced to enhance model interpretability. Furthermore, the criteria importance through intercriteria correlation (CRITIC) objective weighting method and the technique for order preference by similarity to ideal solution (TOPSIS) multi criteria decision making algorithm were integrated to develop an end-to-end AI-NIRS intelligent evaluation platform. This platform enables automatic classification of quality grade based on comprehensive scores. **Results** A score-grade prediction model was established based on the determination results of 90 batches of Madao samples using the 1D-CNN. Compared with the traditional partial least squares (PLS) NIRS model, the multi-task CNN model demonstrated significantly superior performance. Validation results showed that the comprehensive scores of the Madao samples followed a Gaussian distribution, with clear differentiation among the various quality grades. This indicates that the established

收稿日期: 2026-03-02

基金项目: “带土移植”人才引育计划项目(桂科 AA23026008); 广西海洋中药资源及标准调研(桂药监科(2023)001 号); 广西重大专项计划项目(桂科 JF2503980037)

作者简介: 王江涛, 男, 硕士研究生, 研究方向为中药质量控制。E-mail: 18332887497@163.com

*通信作者: 白 钢, 男, 教授, 研究方向为中药系统生物学与化学生物学。E-mail: gangbai@nankai.edu.cn

侯小涛, 女, 教授, 研究方向为海洋中药学。E-mail: xthou@126.com

evaluation method is effective and reliable. **Conclusion** Operating within the framework of the current regulatory system, this method achieved rapid, comprehensive quality assessment and grade differentiation for Madao. It provides a novel technological approach for the digital-intelligence evaluation and scientific supervision of shell-based marine traditional Chinese medicinal materials.

Key words: Madao; near-infrared spectroscopy; quality evaluation; deep learning; one-dimensional convolutional neural network

马刀为竹蛏科动物长竹蛏 *Solen strictus* Gould、大竹蛏 *Solen grandis* Dunker 及刀蛏科小荚蛏 *Siliqua minima* Gmelin 的贝壳^[1]。其活体多分布于我国沿海浅海及潮间带的沙质底中。因其壳形酷似武士佩刀，故得名“马刀”。在广西钦州、防城港等沿海地区，马刀已有数百年的药用历史^[1]，民间通常采用“壳-肉共入药”的方式：壳经煅研后外用，可敛疮止血、收湿生肌；鲜肉或煮汤服用，则具有清热化痰、软坚散结，常用于瘰疬、甲状腺肿、痰核等症状^[2]。与陆地植物药不同，海洋贝壳类药材（如牡蛎、石决明、马刀等）的品质形成具有鲜明的海洋环境依赖性。生长海域的盐度、温度、底质类型、潮间带位置及食物来源等因素，均可显著影响贝壳的矿化程度、有机基质组成及微量元素赋存状态。广西北部湾近岸海域营养盐丰富，温盐适宜，为海洋生物的生长、繁殖和栖息提供了良好环境。以马刀为例，其贝壳中碳酸钙以文石晶型为主，同时含有少量糖蛋白、几丁质、牛磺酸等海洋特征成分，后者与“清热化痰、软坚散结”等海洋中药特有效功密切相关^[3-4]。然而，现行的广西地方标准对马刀的质量控制主要参照陆地矿物药模式，仅对碳酸钙、浸出物及酸不溶性灰分等常规指标进行控制，难以反映海洋环境对其品质形成的差异化影响，也无法客观评价其整体质量。此外，马刀常与牡蛎、蛤壳等海洋贝壳类药材混用或替代流通，但它们在无机晶型、有机组成及功效偏向上存在差异，现行的质量控制方法难以实现其准确鉴别与评价^[5]。因此，亟需建立一种能够同时反映其无机结构特征与有机活性成分、并适用海洋药材复杂基源与环境差异的快速、综合评价方法，以保障马刀药材的质量稳定性，完善道地药材标准体系，推动海洋药材产业的规范发展。

近红外光谱（near-infrared spectroscopy, NIRS）是一种快速、无损、操作简便的分析技术，目前已在食品、农产品及医药等领域得到广泛应用^[6]。随着大数据与人工智能（artificial intelligence, AI）技术的发展，深度学习（deep learning, DL）通过构建多层非线性网络结构，能够逐层提取数据的高阶特征，有效挖掘复杂数据中的潜在规律，在处理具有高维度、强共线性及非线性关系的光谱数据中表现出显著

优势^[7-8]。相较于依赖人工特征提取或复杂预处理方法的传统光谱建模方式，深度学习可实现端到端建模，在减少人为干预的同时，提升了模型的泛化能力和预测稳健性^[9-10]。卷积神经网络（convolutional neural networks, CNN）通过卷积核对局部区域进行特征提取，结合权值共享与层级结构，在降低模型参数规模的同时增强了对局部模式的识别能力，近年来已在光谱定量分析、分类识别及质量评价等方面得到广泛应用^[11-12]。因此，将 DL 与 NIR 技术相结合，可显著克服传统方法在精度和效率上的局限性^[13]，为药材的快速鉴别与评价提供高效、准确的手段。

然而，如何将基于 NIR 预测的多指标分析结果转化为可用于质量评价的信息，仍是当前中药材检测领域面临的关键挑战^[14-15]。现有研究多集中于单一或多成分的定量分析，在多指标综合评价方面仍存在不足。尽管已有研究引入 F_q 等综合指标整合多成分信息^[16-17]，并将定量检测结果与统计学方法相结合，以增强评价的整体性与一致性^[18]，但多准则决策方法的应用仍受到限制。通过准则间相关性衡量准则重要性（criteria importance through intercriteria correlation, CRITIC）方法综合考虑各指标的标准差与相关性，能够客观衡量指标信息量及其冲突性，有助于避免人为赋权带来的主观偏差^[19]。同时，结合逼近理想解排序法（technique for order preference by similarity to ideal solution, TOPSIS）算法，通过计算样品之间的距离实现量化排序^[20]，该“权重确定+距离评价”的组合策略在多指标综合评价中发挥了重要作用^[21-22]。

本研究以海洋中药马刀为例，在测定 90 批样品中碳酸钙、氨基酸、浸出物及酸不溶性灰分含量的基础上，整合 NIRS-CNN 与 CRITIC-TOPSIS 等 AI 辅助技术，构建了针对不同基原马刀的快速等级评价模型，实现了其品质的数智评价，为海洋中药的质量控制提供了一种创新的评价范式。

1 仪器与材料

1.1 仪器

Master10D 型傅里叶变换近红外光谱仪，中国荧飒光学公司；TENSOR 37 型近红外光谱仪，德国 Brucker 公司；Spark 型多功能酶标仪，上海

TECAN 公司; HU3120B 型超声仪, 天津恒奥科技; DZKW-4 型电热恒温水浴锅, 北京永光明医疗仪器公司。CP224S 型电子分析天平 (德国赛多利斯公司), XS205 型电子分析天平 (瑞士梅特勒-托利多公司), KQ-600E 型数控超声波清洗器 (昆山市超声仪器有限公司), Milli-Q 型超纯水机 (美国 Millipore 公司)。

1.2 药材

90 批马刀样品 (S1~S90) 于 2025 年 1 月至 2025 年 8 月分别采自广西北海市 (29 批)、钦州市 (22 批) 及防城港市 (39 批) 的沿海潮间带及邻近海鲜市场, 具体见表 1。所有样品经广西中医药大学黄勇教授鉴定, 其中 18 批长竹蛏 *S. strictus* Gould、39 批大竹蛏 *S. grandis* Dunker、33 批小菱

表 1 马刀样品采集

Table 1 Sample collection information of Madao specimens

编号	名称	产地	采收时间	编号	名称	产地	采收时间
S1	长竹蛏	北海	2025-01	S46	小菱蛏	防城港	2025-01
S2	长竹蛏	防城港	2025-04	S47	小菱蛏	北海	2025-01
S3	长竹蛏	防城港	2025-04	S48	小菱蛏	钦州	2025-08
S4	长竹蛏	防城港	2025-04	S49	小菱蛏	钦州	2025-08
S5	长竹蛏	防城港	2025-04	S50	小菱蛏	钦州	2025-08
S6	长竹蛏	防城港	2025-04	S51	小菱蛏	防城港	2025-01
S7	长竹蛏	北海	2025-01	S52	大竹蛏	防城港	2025-01
S8	长竹蛏	防城港	2025-04	S53	大竹蛏	防城港	2025-01
S9	长竹蛏	防城港	2025-04	S54	大竹蛏	北海	2025-01
S10	长竹蛏	防城港	2025-04	S55	大竹蛏	钦州	2025-04
S11	长竹蛏	防城港	2025-08	S56	大竹蛏	北海	2025-08
S12	长竹蛏	防城港	2025-08	S57	大竹蛏	北海	2025-08
S13	长竹蛏	北海	2025-01	S58	大竹蛏	防城港	2025-01
S14	长竹蛏	防城港	2025-04	S59	大竹蛏	防城港	2025-01
S15	长竹蛏	防城港	2025-04	S60	大竹蛏	北海	2025-01
S16	长竹蛏	防城港	2025-04	S61	大竹蛏	钦州	2025-04
S17	长竹蛏	防城港	2025-04	S62	大竹蛏	北海	2025-04
S18	长竹蛏	防城港	2025-04	S63	大竹蛏	北海	2025-04
S19	小菱蛏	防城港	2025-01	S64	大竹蛏	防城港	2025-01
S20	小菱蛏	防城港	2025-01	S65	大竹蛏	防城港	2025-01
S21	小菱蛏	北海	2025-01	S66	大竹蛏	北海	2025-01
S22	小菱蛏	钦州	2025-08	S67	大竹蛏	北海	2025-04
S23	小菱蛏	钦州	2025-08	S68	大竹蛏	北海	2025-04
S24	小菱蛏	钦州	2025-04	S69	大竹蛏	防城港	2025-01
S25	小菱蛏	防城港	2025-01	S70	大竹蛏	北海	2025-01
S26	小菱蛏	防城港	2025-01	S71	大竹蛏	钦州	2025-04
S27	小菱蛏	北海	2025-01	S72	大竹蛏	北海	2025-04
S28	小菱蛏	钦州	2025-04	S73	大竹蛏	北海	2025-04
S29	小菱蛏	钦州	2025-04	S74	大竹蛏	防城港	2025-01
S30	小菱蛏	钦州	2025-04	S75	大竹蛏	防城港	2025-01
S31	小菱蛏	防城港	2025-01	S76	大竹蛏	北海	2025-01
S32	小菱蛏	防城港	2025-01	S77	大竹蛏	钦州	2025-04
S33	小菱蛏	北海	2025-01	S78	大竹蛏	北海	2025-04
S34	小菱蛏	钦州	2025-08	S79	大竹蛏	北海	2025-04
S35	小菱蛏	钦州	2025-08	S80	大竹蛏	防城港	2025-01
S36	小菱蛏	钦州	2025-08	S81	大竹蛏	北海	2025-01
S37	小菱蛏	防城港	2025-01	S82	大竹蛏	钦州	2025-04
S38	小菱蛏	防城港	2025-01	S83	大竹蛏	北海	2025-08
S39	小菱蛏	北海	2025-01	S84	大竹蛏	北海	2025-08
S40	小菱蛏	钦州	2025-04	S85	大竹蛏	防城港	2025-01
S41	小菱蛏	钦州	2025-04	S86	大竹蛏	防城港	2025-01
S42	小菱蛏	钦州	2025-04	S87	大竹蛏	北海	2025-01
S43	小菱蛏	防城港	2025-01	S88	大竹蛏	钦州	2025-04
S44	小菱蛏	钦州	2025-04	S89	大竹蛏	北海	2025-04
S45	小菱蛏	防城港	2025-01	S90	大竹蛏	北海	2025-04

蛭 *S. minima* Gmelin。样品采集后立即去除软体组织，洗净贝壳表面附着物，阴干、粉碎，过二号筛，备用。

1.3 试剂

甘氨酸、苯酚、茚三酮、乙二胺四醋酸二钠滴定液 (0.05 mol/L)、碳酸钙对照品 (质量分数 99% 计)、氢氧化钠、甲基红、钙黄绿素、盐酸均购自。

2 方法与结果

2.1 4项指标的含量测定

2.1.1 总氨基酸的测定^[23] 取 0.5 g 马刀粉末，加 10 mL 10%稀盐酸溶解，离心，弃去上清，将沉淀转移到 10 mL 水解管内，加 5 mL 6 mol/L 盐酸，同时加入 2~3 滴苯酚，充氮气，密封，于 150 °C 烘箱内反应 2 h 后取出，转移至 10 mL 量瓶中，加入 6 mol/L 氢氧化钠溶液 5 mL 定容至刻度，用 0.45 μm 滤膜滤过后即得。分别精密移取甘氨酸对照品溶液 (1.0 mg/mL) 0.1、0.2、0.4、0.6、0.8、1.0 mL 置于带塞试管中，加入 1 mL pH 6 的磷酸盐缓冲溶液混匀，再加入 1.5 mL 2%茚三酮溶液，于 100 °C 沸水浴中反应 20 min 后，转移至 10 mL 量瓶，定容，混匀后于 568 nm 处测定吸光度 (*A*) 值。以质量浓度为横坐标 (*X*)，*A* 值为纵坐标 (*Y*) 绘制标准曲线， $Y=0.011\ 5\ X-0.038\ 7$ ，其中相关系数 R^2 为 0.999 3，甘氨酸在 0.01~0.100 mg/mL 线性关系良好。方法学考察结果显示，精密度 $RSD\leq 1.33\%$ ；重复性 $RSD\leq 0.87\%$ ；120 min 内的稳定性 $RSD\leq 0.72\%$ ；加样回收率在 94.2%~106.2%， $RSD\leq 1.94\%$ ，以上实验结果表明该方法能满足总氨基酸含量测定要求。马刀样品中总氨基酸含量见表 2。

2.1.2 碳酸钙的测定^[23] 精密称取碳酸钙对照品适量，置于置锥形瓶中，加稀盐酸 10 mL，加热使溶解，加水 20 mL 与甲基红指示液 1 滴，滴加 10% 氢氧化钾溶液至溶液显黄色，再继续加入 10 mL，随后加入少量钙黄绿素指示剂，用乙二胺四醋酸二钠滴定液 (0.05 mol/L) 滴定至溶液黄绿色荧光消失而显橙色。每 1 mL 乙二胺四醋酸二钠滴定液 (0.05 mol/L) 相当于 5.004 mg 碳酸钙 (CaCO_3)。以对照品用量为横坐标 (*X*)，以乙二胺四醋酸二钠滴定溶液消耗体积为纵坐标 (*Y*)，得回归方程 $Y=200.21\ X-0.04$ ，相关系数 R^2 为 0.999 8，在 20~120 mg 内线性关系良好。重复性实验显示，其 $RSD\leq 1.02\%$ ；样品溶液在测定时间内稳定性良好， $RSD\leq 1.56\%$ ；加样回收率在 99.3%~101.6%， $RSD\leq 0.96\%$ ，表明该方法重复性、稳定性和准确度均满足分析要求。

马刀样品中碳酸钙含量见表 2。

2.1.3 酸不溶性灰分及浸出物测定 酸不溶性灰分按《中国药典》2025 年版通则 2302 测定^[23]，浸出物按通则 2201 项下的热浸法测定，旨在模拟马刀水煎煮汤剂的水溶性成分溶出情况，与传统用法保持一致。马刀样品中酸不溶性灰分及浸出物含量见表 2。

2.2 NIRS 采集

将马刀样品粉碎后过二号筛，取约 1 g 的供试品粉末均匀地置于直径 2 cm 的石英杯中，通过 Master 10D 傅里叶变换近红外光谱仪在漫反射模式下，扫描并采集 NIRS 光谱 (图 1)。光谱采集范围为 12 000~4 000 cm^{-1} ，分辨率为 8 cm^{-1} ，每个光谱扫描 64 次。每个批次样品平行测定 3 次，分别对 90 批次的马刀样品进行 NIRS 光谱采集，取平均光谱用于后续分析。

2.3 偏最小二乘法 (partial least squares, PLS) 建立定量模型

参照文献方法^[18]，用于预测马刀四项检测指标的含量。建模预处理方法均选用一阶导数加矢量归一化，建模波段选择在 6 000~4 000 cm^{-1} 内，光谱数据经标准化和方差过滤 (阈值 0.001) 后，并利用 PLS 建立近红外定量回归建模。模型在 80 批次训练集上拟合，将预测值反标准化后计算 10 批测试集评价指标 (R^2 、RMSE)。PLS 模型旨在评估线性方法在多组分预测中的性能，并用于与后续 CNN 模型进行对比。由图 2 可知，总氨基酸、碳酸钙、浸出物、及酸不溶性灰分的所有 NIRS 预测模型 R^2_{text} 平均值为 0.78，RMSE 平均值为 0.370 2，表明 PLS 模型在一定程度上可满足快速检测的要求。

2.4 多任务 CNN 深度学习框架的构建

基于多任务 CNN 结构构建深度学习框架，网络由特征提取模块、多头自注意力模块 (multi-head self attention, MHSA) 和回归预测模块组成 (图 3)。特征提取模块包含 4 个卷积块：第 1 块为 64 个 1D 卷积核 (核大小 30)、批归一化 (batch norm, BN) 及空间 Dropout (0.2)；第 2 块为 128 个卷积核 (核大小 15，步长 2)、BN 及最大池化 (池大小 2)；第 3 块为 256 个卷积核 (核大小 10，步长 2)、BN 及最大池化；第 4 块为 512 个卷积核 (核大小 5，步长 1)、BN。随后引入残差连接：经 512 个卷积核 (核大小 3) 的卷积层输出与输入相加，经修正线性单元 (rectified linear unit, ReLU) 激活。MHSA 设置

表 2 马刀 4 项检测指标的定量测定结果

Table 2 Determination results of four indicators in Madao

编号	碳酸钙/%	总氨基酸/%	酸不溶性灰分/%	浸出物/%	编号	碳酸钙/%	总氨基酸/%	酸不溶性灰分/%	浸出物/%
S1	92.97	0.20	1.28	0.18	S46	92.39	0.26	0.96	0.35
S2	93.93	0.26	1.29	0.25	S47	92.09	0.25	0.87	0.21
S3	94.70	0.33	1.55	0.39	S48	89.61	0.44	0.72	0.31
S4	94.95	0.30	0.89	0.26	S49	91.69	0.47	0.40	0.33
S5	94.93	0.25	0.62	0.16	S50	91.19	0.35	0.54	0.34
S6	93.62	0.05	0.97	0.31	S51	95.85	0.84	0.23	0.25
S7	93.14	0.36	1.55	0.24	S52	94.01	0.30	0.42	0.11
S8	93.05	0.39	1.08	0.07	S53	94.80	0.73	0.99	0.22
S9	95.23	0.07	0.42	0.34	S54	94.31	0.49	1.21	0.18
S10	93.92	0.04	0.37	0.26	S55	96.55	0.40	1.29	0.25
S11	95.01	0.48	0.41	0.30	S56	94.25	0.33	1.55	0.23
S12	96.10	0.69	1.24	0.21	S57	94.17	0.26	0.89	0.24
S13	95.66	0.67	1.83	0.20	S58	94.68	0.23	0.94	0.29
S14	96.60	0.44	0.90	0.22	S59	90.28	0.29	1.45	0.14
S15	96.48	0.59	0.67	0.05	S60	94.15	0.48	1.02	0.07
S16	94.31	0.07	0.83	0.18	S61	89.78	0.33	0.42	0.34
S17	92.23	0.71	1.87	0.45	S62	91.57	0.20	0.34	0.26
S18	90.67	0.52	1.46	0.72	S63	89.42	0.47	0.35	0.30
S19	93.66	0.21	1.50	0.49	S64	93.34	0.66	1.21	0.21
S20	93.14	0.06	1.18	0.40	S65	94.35	0.63	1.70	0.14
S21	93.59	0.27	0.87	0.21	S66	93.39	0.37	0.90	0.22
S22	94.80	0.27	0.72	0.34	S67	94.96	0.58	0.67	0.05
S23	93.50	0.44	0.86	0.40	S68	94.29	0.71	0.82	0.08
S24	94.20	0.36	0.55	0.36	S69	92.86	0.52	1.86	0.14
S25	92.45	0.47	0.25	0.25	S70	89.74	0.18	1.38	0.72
S26	94.80	0.35	0.42	0.19	S71	92.70	0.25	1.42	0.48
S27	94.80	0.32	1.00	0.26	S72	90.92	0.26	1.15	0.40
S28	94.31	0.74	1.25	0.18	S73	94.14	0.22	0.96	0.34
S29	96.55	0.49	1.29	0.25	S74	93.93	0.43	0.87	0.21
S30	94.25	0.40	1.55	0.30	S75	93.56	0.36	0.72	0.28
S31	94.17	0.26	0.89	0.25	S76	93.18	0.47	0.71	0.33
S32	95.39	0.23	0.58	0.13	S77	89.69	0.35	0.33	0.24
S33	95.89	0.39	0.95	0.30	S78	94.56	0.84	0.54	0.33
S34	92.91	0.48	1.50	0.18	S79	95.31	0.28	0.21	0.25
S35	93.00	0.33	1.05	0.07	S80	92.91	0.72	0.90	0.07
S36	91.77	0.20	0.35	0.26	S81	93.09	0.49	0.96	0.31
S37	90.42	0.48	0.38	0.30	S82	96.31	0.39	0.40	0.02
S38	94.25	0.67	1.22	0.21	S83	94.09	0.32	1.07	0.36
S39	95.50	0.65	0.90	0.22	S84	93.95	0.26	0.43	0.44
S40	95.10	0.40	0.67	0.05	S85	94.90	0.23	0.30	0.34
S41	92.34	0.59	0.83	0.12	S86	91.96	0.39	0.35	0.02
S42	91.57	0.07	1.86	0.25	S87	94.17	0.28	1.24	0.17
S43	89.08	0.71	1.42	0.72	S88	91.41	0.48	0.73	0.37
S44	93.75	0.52	1.46	0.48	S89	95.39	0.33	0.41	0.11
S45	92.12	0.19	1.16	0.40	S90	91.32	0.33	0.63	0.01

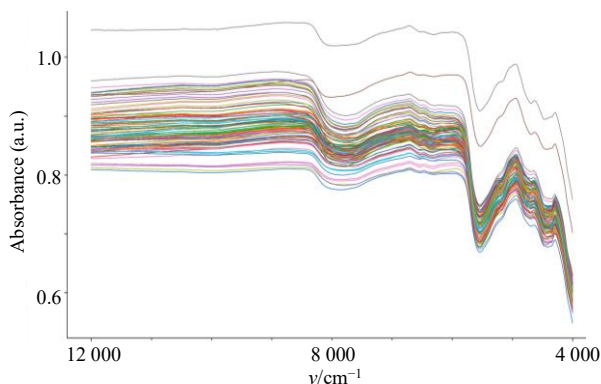


图1 90批马刀的NIRS原始光谱图

Fig. 1 Raw NIRS spectra for 90 batches of Madao

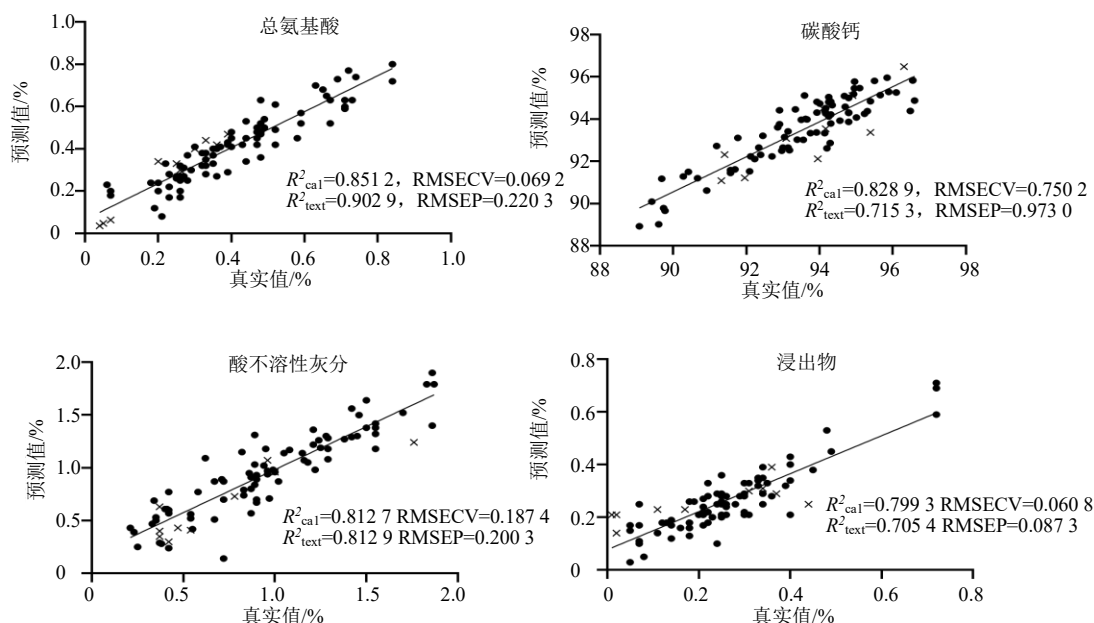


图2 基于PLS的马刀近红外定量模型

Fig. 2 PLS-based near-infrared quantitative model for Madao

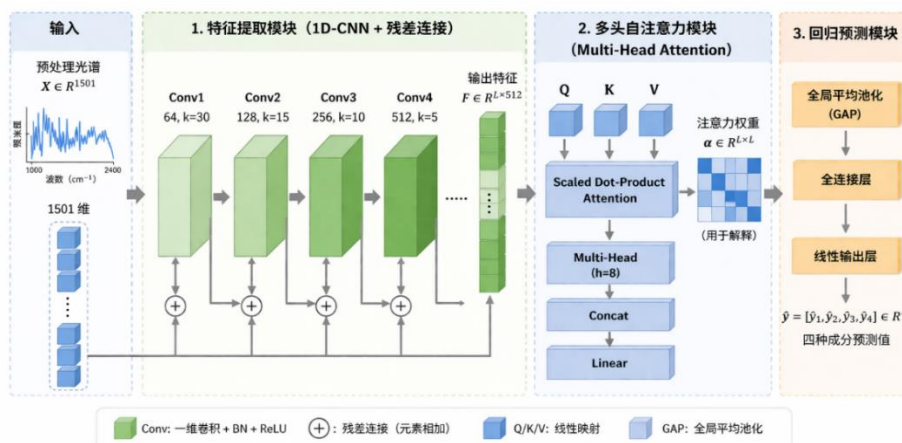


图3 多任务CNN模型的架构图

Fig. 3 Architecture diagram of multi-task CNN model

8个注意力头，键维度为32。输入特征图经线性变换得到查询、键、值矩阵，计算缩放点积注意力，将多头输出拼接后投影回原通道数，并输出每个位置的重要性权重。该模块可捕捉光谱的全局依赖关系。回归预测模块首先对注意力输出进行全局平均池化，得到固定长度向量，然后依次经过256和128个神经元的全连接层（Dropout率分别为0.4和0.3），最后通过线性输出层得到4种检测指标的预测值。

将90批样品按分层随机抽样划分为训练集（80批）和测试集（10批）。为评估多任务CNN模型对4个输出指标（总氨基酸、碳酸钙、酸不溶性灰分、浸出物）的同步预测能力，在训练集上采用五折交

叉验证进行超参数调优, 计算各指标的预测决定系数 (R^2_{text}) 和均方根误差 (RMSE), 最终在测试集上评估模型泛化性能。由图 4 可知, 所有模型 R^2_{cal} 均超过 0.88, 表明模型能够有效提取光谱与成分间的非线性关联。总体而言, 多任务学习

通过共享表示增强了模型的泛化能力, 四个指标的平均 R^2_{text} 达到 0.91, 平均 RMSEP 为 0.163 6, 预测能力比采用完全相同预处理流程的近红外 PLS 建模方法更强 (表 3), 能更好满足快速评价对精度的要求。

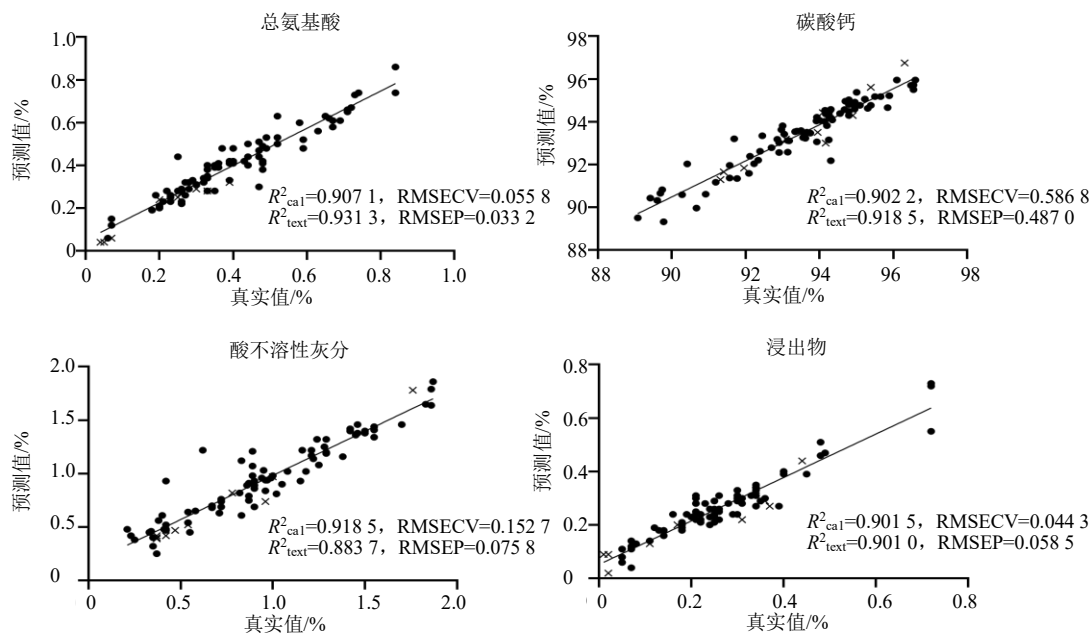


图 4 基于多任务 CNN 结构的 4 个定量模型结果

Fig. 4 Results of four quantitative models based on multi-task CNN structure

表 3 基于 PLS 与 CNN 的马刀 4 项指标定量模型性能比较

Table 3 Performance comparison of PLS and CNN models for quantitative prediction of four indicators in razor clam

指标	建模方法	R^2_{cal}	RMSECV	R^2_{text}	RMSEP
总氨基酸	PLS	0.851 2	0.069 2	0.902 9	0.220 3
	CNN	0.901 7	0.055 8	0.931 3	0.033 2
碳酸钙	PLS	0.828 9	0.750 2	0.715 3	0.973 0
	CNN	0.902 2	0.586 8	0.918 5	0.487 0
浸出物	PLS	0.812 7	0.187 4	0.812 9	0.200 3
	CNN	0.918 5	0.152 7	0.883 7	0.075 8
酸不溶性灰分	PLS	0.799 3	0.060 8	0.705 4	0.087 3
	CNN	0.901 5	0.044 3	0.901 0	0.058 5

2.5 基于多任务 CNN 模型的马刀品质智能评价平台的建立

平台整体流程如下: 采集马刀近红外光谱, 经预处理后输入训练好的多任务 CNN 模型, 模型同时输出 4 种指标预测值及注意力权重; 利用注意力权重识别关键波长区域, 增强模型可解释性; 将成分预测值输入 CRITIC-TOPSIS 模块, 计算综合得分并划分质量等级。由于酸不溶性灰分为负向指标, 在 TOPSIS 计算前采用极差变换法进行正向化

处理, 其余 3 个指标为正向指标。具体流程如图 5 所示。

待测样本的光谱数据首先进行标准正态变换 (standard normal variate transformation, SNV)、Savitzky-Golay 平滑及 Z-score 标准化, 并经方差阈值筛选保留 1 501 个特征波数。将处理后的光谱向量输入已训练的多任务 CNN 模型, 该模型由特征提取、MHSA 及回归预测 3 部分组成。特征提取模块通过四层卷积 (卷积核数 64→128→256→512, 核

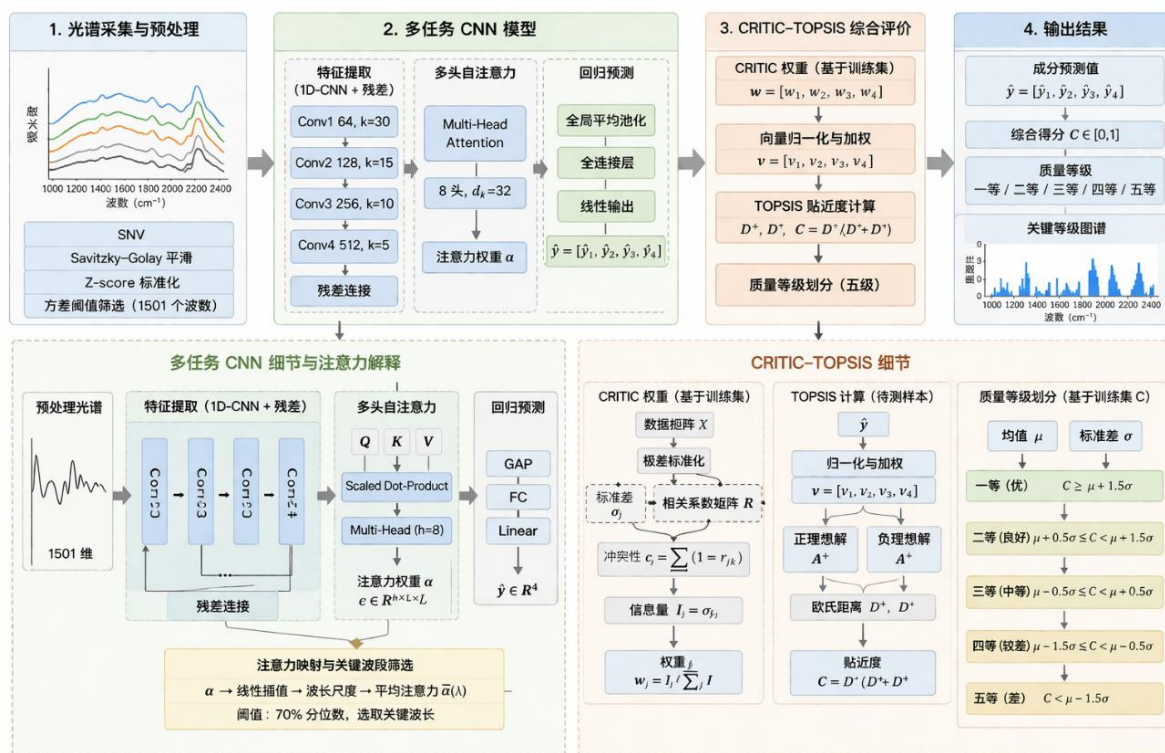


图 5 马刀品质智能评价平台的工作流程图

Fig. 5 Workflow diagram of intelligent evaluation platform for Madao quality

大小 30、15、10、5) 和残差连接提取局部特征; MHSA 模块 (8 头, 键维度 32) 捕获全局依赖关系, 输出增强特征及每个位置的重要性权重 α ; 增强特征经全局平均池化和全连接层后, 线性输出四种成分的预测值。模型前向传播过程中, 注意力权重 α 通过线性插值映射回原始波长尺度, 计算各波长平均注意力, 筛选高于 70% 分位数的波长作为关键波段, 用于光谱解释。将预测成分 $\hat{y}$ 送入 CRITIC-TOPSIS 模块进行综合质量评价。首先基于训练集真实成分含量, 采用 CRITIC 确定 4 个指标的客观权重最后, 依据训练集 C 值的均值 μ 标准差 σ , 将 C 划分为 5 个等级: 一等 (优, $C \geq \mu + 1.5\sigma$)、二等 (良好, $\mu + 0.5\sigma \leq C < \mu + 1.5\sigma$)、三等 (中等, $\mu - 0.5\sigma \leq C < \mu + 0.5\sigma$)、四等 (较差 $\mu - 1.5\sigma \leq C < \mu - 0.5\sigma$)、五等 (差, $C < \mu - 1.5\sigma$)。平台最终输出每个样本的 4 种指标预测值、综合得分 C 及质量等级, 同时提供关键波长重要性图谱, 实现从光谱到质量等级的自动化评价。整个流程在 Python 环境中运行^[23]。

为揭示模型预测关注的特征波段, 使神经网络预测去黑箱化, 将光谱注意力层 (spectral attention) 训练得到的权重向量经 3 次样条插值还原至原始波数 (12 000~4 000 cm⁻¹)。图 6 展示了所有样品参

与建模时的注意力权重的平均值曲线。模型权重主要集中在 6 000~4 000 cm⁻¹, 表明该区域为近红外建模的主要信息来源。该波段主要对应 O-H、N-H 及 C-H 振动的倍频与组合频。其中 5 600~5 200 cm⁻¹ 区域权重最为集中, 其反映了氨基酸中 N-H 及 C=O 结构以及多糖和水分的共同贡献, 表现出浸出物中的共线性特征。此外, 5 200~4 800 cm⁻¹ 和 4 800~4 300 cm⁻¹ 区域的高权重进一步表明模型对有机碳结构的高度敏感性。相比之下, 碳酸钙和酸灰在该区间缺乏直接吸收, 其预测主要依赖于与有机组分之间的间接相关关系。结果表明引入注意力机制能够自主识别与预测任务强相关的光谱区间, 为模型的预测提供了一定的可解释性依据。

基于训练集 80 批样品的数据, 采用 CRITIC 计算各指标的客观权重, 其中总氨基酸为 0.313 1、碳酸钙为 0.206 4、浸出物为 0.242 9、酸不溶性灰分为 0.237 5, 进而得到 TOPSIS 综合得分。基于 CRITIC-TOPSIS 方法对 80 批样品进行综合评价, 结果表明样品得分主要分布在 0.25~0.86, 呈现近似正态分布特征, 其中一等样品 7 个 (得分: 1.0~0.64)、二等样品 13 个 (得分: 0.64~0.48)、三等样品 33 个 (得分: 0.48~0.33), 四等样品 25 个 (得分: 0.33~

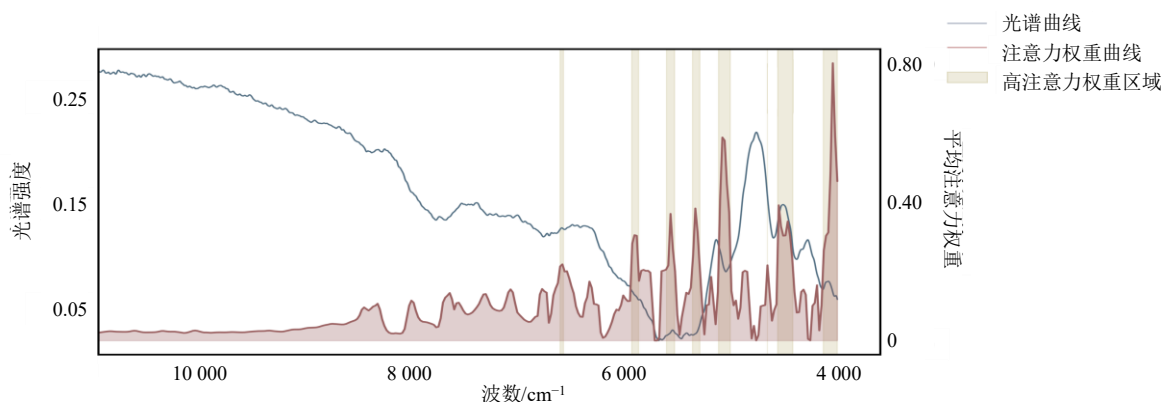


图 6 波数范围的注意力权重分析

Fig. 6 Attention weight analysis of wavenumber range

0.18), 五等样品 2 个 (得分: 0.18~0.00)。其中三等样品占比最高, 说明样品整体品质处于中等水平; 一等样品数量较少, 表明同时具备优良氨基酸含量、较高浸出物及较低矿物成分的样品有限。此外, 各等级之间界限清晰 (图 7)。采用单因素方差分析 (analysis of variance, ANOVA) 检验 5 个等级间综合得分的差异, 结果显示 $F(4,75)=177.089$, $P<0.001$, 表明各等级间整体差异极显著。进一步的事后检验 (Tukey HSD) 显示, 结果表明相邻等级间均存在显著差异 ($P<0.001$), 说明该等级划分具有良好的区分能力与统计学可靠性。

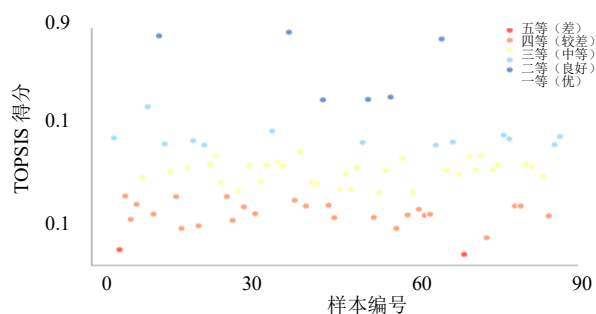


图 7 训练集样品的得分分布图

Fig. 7 Score distribution of training set samples

3 讨论

海洋贝壳类药材普遍具有以碳酸钙等无机成分为主骨架、微量有机活性物为功效核心的二元结构特征。传统理化检测难以综合反映由产地环境差异、基源混淆及加工方式所导致的整体质量波动。为此, 本研究构建了基于 1D-CNN 与光谱注意力机制的 AI-NIRS 数智评价平台, 以马刀为例, 实现了从近红外光谱采集到质量等级输出的端到端分析, 为海洋中药的快速、智能、可解释性评价提供了新的研究范式。需指出的是, 马刀药材在现行商品流

通及监管体系中尚缺乏统一的传统等级分类标准, 因此无法直接进行一致性比较。在此背景下, 本研究借助客观赋权与多指标综合评分所建立的五级质量划分体系, 首次为该药材提供了量化、可重现的分级依据, 有效填补了分级监管方面的空白。

近年来, 近红外光谱技术以其可获取样品整体化学指纹信息的优势, 结合化学计量学方法, 可实现多成分的同步预测^[24]。然而, 传统 PLS 在处理非线性、强共线性光谱数据的能力有限。相比之下, 深度学习方法, 特别是 CNN 能够有效挖掘光谱中的非线性特征, 显著提升复杂体系中多指标测定的准确性^[25-26]。在多指标综合评价方面, 多准则决策方法 (如 CRITIC 客观赋权法、TOPSIS 理想解法) 通过融合多成分信息并计算综合得分, 已在食品、农产品等领域展现出良好的应用效果^[27]。本研究采用多任务 1D-CNN 同步预测总氨基酸、碳酸钙、浸出物及酸不溶性灰分 4 项指标。五折交叉验证显示, 4 个指标的平均预测决定系数 (R^2_{test}) 达 0.91, 显著优于 PLS 模型的 0.78, 说明深度学习能够有效提取光谱中隐含的非线性信息, 实现对多指标测定结果的精准预测。

为进一步提升模型透明度, 本研究引入光谱注意力机制、梯度加权类激活映射 (Grad-CAM) 等手段, 识别模型关注的关键波数区间, 为“黑箱”模型提供一定的化学可解释性^[28-29]。注意力权重分析显示, 模型主要关注 $5\,600\sim4\,300\text{ cm}^{-1}$, 该区域对应氨基酸 (N-H 伸缩振动二级倍频, 如 $5\,100\text{ cm}^{-1}$ 附近)、糖类 (O-H 组合频, $5\,600\sim5\,400\text{ cm}^{-1}$) 等有机成分的特征吸收, 而碳酸钙在近红外区无明显直接吸收。该结果表明模型对无机成分的预测依赖

于其与有机组分的协同变化关系,而非直接光谱响应。注意力机制不仅提升了模型的可解释性,还为后续基于有机波段间接评估无机物以及药理作用建立关联提供了理论依据,在一定程度上弥补了当前检测方法的局限性。

中药化学成分复杂、药理作用多样,单一或少数指标难以全面反映其整体质量特性^[30-31]。多指标综合评价是中药质量研究的重要发展方向^[32],但现有方法多依赖离线检测与主观赋权。本研究将 CRITIC 客观赋权法与 TOPSIS 多准则决策算法嵌入平台后端,基于 CNN 预测的 4 项指标自动计算综合得分,并按高斯分布概率成功将样品划分为 5 个质量等级。CRITIC 权重分析(总氨基酸 0.313、浸出物 0.243、酸不溶性灰分 0.238、碳酸钙 0.206)较为客观反映了各指标的信息量与冲突性,避免了人为赋权偏差。等级间方差分析(ANOVA)及事后检验证实相邻等级均存在显著差异,表明该分级体系具有良好的区分度与稳健性。与传统“合格/不合格”二元判定模式相比,本平台实现了从多指标预测到综合质量等级划分的智能化提升。

需指出的是,近红外光谱模型对训练样本分布具有较强依赖性,当样本来源扩展或生产批次变动时,模型可能需要重新校正或迁移学习。对于无机成分(如碳酸钙),其在近红外区的吸收信号较弱,预测结果主要依赖相关性建模,机理解释尚不充分。此外,注意力机制虽能提示关键波数,但其结果仍属统计关联,尚不能完全替代化学分析。未来可结合多源光谱融合、迁移学习及机制建模等方法,进一步提高模型的泛化能力与解释深度。其次,本研究所用酸水解条件主要针对蛋白质及游离氨基酸,对几丁质等含氮多糖的水解效率有限,因此测得的总氨基酸含量主要反映可水解蛋白质及游离氨基酸部分,尚存在与药理活性方面缺少直接的关联。未来可尝试分段水解法或直接测定 *N*-乙酰葡萄糖胺以更全面表征含氮活性成分。最后,对测试集中预测误差最大的 3 个样本进行分析发现,它们均来自长竹蛎且采集于夏季。该基源在训练集中占比仅 20%,且夏季样品中有机成分含量波动较大,提示模型对稀有基源和季节变异的泛化能力有待加强。后续可通过增加样本多样性,引入域自适应或半监督学习算法提升鲁棒性。

综上所述,本研究融合多任务深度学习预测、光谱注意力机制与客观综合评价算法,构建了端到

端的 AI-NIRS 数智评价平台。该平台针对海洋贝壳类药材基源相近、形态相似、品质差异细微等共性难点,利用近红外全谱信息间接捕捉有机与无机组分间的协同变化,可有效用于牡蛎、石决明、蛤壳等同类药材的快速分等与真伪鉴别。与传统依赖多步化学检测、主观赋权及分级方法相比,本平台实现了“光谱→多成分预测→综合得分→等级”的自动化流程,显著缩短检测周期,为口岸监管、药材集散地及生产线现场的数智评价提供了便捷高效的科学工具。该技术范式兼具良好的可迁移性,有望拓展至其他贝壳类海洋药材的检测,推动构建“一机多药、动态更新”的智能化科学监管体系。

利益冲突 所有作者均声明不存在利益冲突

参考文献

- [1] 广西壮族自治区卫生厅. 广西中药志 [M]. 南宁: 广西壮族自治区人民出版社, 1959: 56.
- [2] 吴丽竹, 郭溶, 祝溢阳, 等. 海洋贝壳类中药化学成分组成与炮制机理研究进展 [J]. 中药材, 2024, 47(3): 774-778.
- [3] 邢源昊, 张坤, 崔荣华, 等. 贝壳珍珠层水溶性有机质在生物医学领域的研究进展 [J]. 生物医学工程研究, 2025, 44(3): 196-200.
- [4] 管华诗, 王曙光. 中华海洋本草精选本 [M]. 上海: 上海科学技术出版社, 2014: 89.
- [5] Pasquini C. Near Infrared Spectroscopy: Fundamentals, practical aspects and analytical applications [J]. *J Braz Chem Soc*, 2003, 14(2): 198-219.
- [6] Schmidhuber J. Deep learning in neural networks: An overview [J]. *Neural Netw*, 2015, 61: 85-117.
- [7] Goodfellow I, Bengio Y, Courville A. *Deep Learning* [M]. Cambridge, Mass.: MIT Press, 2016.
- [8] Li T H, Wei W S, Xing S J, *et al*. Deep learning-based near-infrared hyperspectral imaging for food nutrition estimation [J]. *Foods*, 2023, 12(17): 3145.
- [9] Xiao Q L, Wu N, Tang W T, *et al*. Visible and near-infrared spectroscopy and deep learning application for the qualitative and quantitative investigation of nitrogen status in cotton leaves [J]. *Front Plant Sci*, 2022, 13: 1080745.
- [10] Luo N, Xu D M, Xing B, *et al*. Principles and applications of convolutional neural network for spectral analysis in food quality evaluation: A review [J]. *J Food Compos Anal*, 2024, 128: 105996.
- [11] Lankasena N, Nugara R N, Wisumperuma D, *et al*. Misidentifications in ayurvedic medicinal plants: Convolutional neural network (CNN) to overcome identification confusions [J]. *Comput Biol Med*, 2024, 183:

- 109349.
- [12] Peng C, Zhang M Y, Kong M D, *et al.* Integrating deep learning and near-infrared spectroscopy for quality control of traditional Chinese medicine extracts [J]. *Microchem J*, 2024, 205: 111310.
- [13] Xiao Q L, Wu N, Tang W T, *et al.* Visible and near-infrared spectroscopy and deep learning application for the qualitative and quantitative investigation of nitrogen status in cotton leaves [J]. *Front Plant Sci*, 2022, 13: 1080745.
- [14] Xiao Y X, Zhou L, Zhao Y Y, *et al.* Deep learning-based regression of food quality attributes using near-infrared spectroscopy and hyperspectral imaging: A review [J]. *Food Chem*, 2025, 493: 145932.
- [15] 白钢, 刘昌孝, 张铁军, 等. 基于质量综合评价指数的药材品质快速评价 [J]. 中草药, 2021, 52(2): 313-320.
- [16] 白钢, 丁国钰, 侯媛媛, 等. 引进近红外技术用于中药材品质的快速评价 [J]. 中国中药杂志, 2016, 41(19): 3501-3505.
- [17] 闫孟琳, 丛龙飞, 张子玥, 等. 基于质量标志物的当归抗炎功效近红外快速评价 [J]. 分析测试学报, 2020, 39(11): 1320-1326.
- [18] 王江涛, 王雯爽, 翟珊珊, 等. 基于理气关键药效成分的厚朴药材质量的近红外快速评价 [J]. 药物评价研究, 2025, 48(4): 899-909.
- [19] Diakoulaki D, Mavrotas G, Papayannakis L. Determining objective weights in multiple criteria problems: The critic method [J]. *Comput Oper Res*, 1995, 22(7): 763-770.
- [20] Hwang C L, Yoon K. *Multiple Attribute Decision Making* [M]. Berlin, Heidelberg: Springer, 1981.
- [21] Liu P D, Ali A, Rehman N, *et al.* Artificial intelligence in medical practice: The CRITIC-TOPSIS method based on $\lambda(pq)$ -cubic quasi rung orthopair fuzzy robust aggregation operators and their applications [J]. *Inf Sci*, 2025, 710: 122076.
- [22] Hassan I, Alhamrouni I, Azhan N H. A CRITIC-TOPSIS multi-criteria decision-making approach for optimum site selection for solar PV farm [J]. *Energies*, 2023, 16(10): 4245.
- [23] 中国药典 [S] 四部. 2025: 163.
- [24] Beć K B, Huck C W. Breakthrough potential in near-infrared spectroscopy: Spectra simulation. a review of recent developments [J]. *Front Chem*, 2019, 7: 48.
- [25] Zhou M F, Hu Y C, Wang R Z, *et al.* An end-to-end deep learning approach for Raman spectroscopy classification [J]. *J Chemom*, 2023, 37(2): e3464.
- [26] Osa-Sanchez A, Del Barrio I, Bernardo-Seisdedos G, *et al.* Detection of LTP in food using near-infrared spectroscopy and explainable artificial intelligence [J]. *Food Anal Meth*, 2025, 18(11): 2520-2541.
- [27] Guo Y L, Zhang L N, He Y K, *et al.* Online inspection of blackheart in potatoes using visible-near infrared spectroscopy and interpretable spectrogram-based modified ResNet modeling [J]. *Front Plant Sci*, 2024, 15: 1403713.
- [28] Puška A, Nedeljković M, Prodanović R, *et al.* Market assessment of pear varieties in Serbia using fuzzy CRADIS and CRITIC methods [J]. *Agriculture*, 2022, 12(2): 139.
- [29] Ying X Y, Zhang Q, Wang T X, *et al.* Quality evaluation of rotary microwave vacuum drying of *Codonopsis pilosula* based on CRITIC weight-TOPSIS method [J]. *Microchem J*, 2024, 200: 110481.
- [30] Nie L X, Zha Y F, Yu J D, *et al.* Quality grade evaluation of Niu Huang Qingwei Pills based on UPLC and TCM reference drug: A novel principle of analysis of multiple components in ready-made Chinese herbal medicine [J]. *Processes*, 2022, 10(6): 1166.
- [31] Li Y L, Fan J, Jin H Y, *et al.* New vision for TCM quality control: Elemental fingerprints and key ingredient combination strategy for identification and evaluation of TCMs [J]. *Eur J Med Chem*, 2025, 281: 117006.
- [32] Chen J, Li L F, Lin Z Z, *et al.* A quality-comprehensive-evaluation-index-based model for evaluating traditional Chinese medicine quality [J]. *Chin Med*, 2023, 18(1): 89.

[责任编辑 时圣明]