

基于像元解混的止嗽青果丸混合均匀度可视化研究

沈婷婷¹, 朱捷强¹, 方翠芬², 董 婷², 罗 镭², 颜继忠¹, 龚行楚³, 张 慧^{1*}

1. 浙江工业大学药学院, 浙江 杭州 310014

2. 浙江省食品药品检验研究院, 浙江 杭州 310004

3. 浙江大学药学院, 浙江 杭州 310058

摘要: **目的** 为实现止嗽青果丸生产过程的质量控制, 将遥感领域的像元解混方法引入中药制剂的均匀度评价, 以可视化分析止嗽青果丸粉末混合均匀度和蜂蜜混合均匀度。**方法** 采用 SG 平滑 (Savitzky-Golay, SG)、一阶导数 (first derivative, 1D)、二阶导数 (second derivative, 2D)、标准正态变量变换 (standard normal variate, SNV)、多元散射校正 (multiplicative scatter correction, MSC) 等多种预处理方法优化光谱数据, 消除背景噪声等干扰。通过利用纯物质光谱, 结合混合调谐匹配滤波解混 (mixture tuned matched filtering, MTMF) 算法, 综合目标端元的丰度得分与混合可行性得分, 对混合样本像素点进行物质丰度估计与二值化, 从而实现药材粉末的空间分布可视化, 进一步构建了残差网络 (residual network, ResNet) 模型对蜂蜜含量进行预测与像素级可视化。**结果** ResNet 模型与偏最小二乘回归 (partial least squares regression, PLSR)、多元线性回归 (multiple linear regression, MLR)、岭回归 (ridge regression, RR)、最小绝对收缩和选择算子回归 (least absolute shrinkage and selection operator, Lasso)、随机森林 (random forest, RF)、ElasticNet 等传统定量模型相比, 预测集 R^2 从 0.837 6 显著提升至 0.931 1。**结论** 像元解混结合深度学习模型直观展示了药材原料与辅料在制剂中的空间分布, 为中药制剂的精细化生产与质量控制提供了新思路。

关键词: 止嗽青果丸; 高光谱; 像元解混; 混合均匀度; 可视化

中图分类号: R283.6 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-2670(2026)19-7560-13

DOI: 10.7501/j.issn.0253-2670.2026.19.007

Visualization research on mixing uniformity of Zhisou Qingguo Wan based on pixel unmixing

SHEN Tingting¹, ZHU Jieqiang¹, FANG Cuifen², DONG Ting², LUO Lei², YAN Jizhong¹, GONG Xingchu³, ZHANG Hui¹

1. College of Pharmaceutical Science, Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310014, China

2. Zhejiang Institute for Food and Drug Control, Hangzhou 310004, China

3. School of Pharmacy, Zhejiang University, Hangzhou 310058, China

Abstract: Objective To achieve quality control during the production of Zhisou Qingguo Wan (ZQW, 止嗽青果丸), the pixel unmixing method from remote sensing was introduced into the uniformity evaluation of traditional Chinese medicine preparations, so as to visually analyze the mixing uniformity of medicinal powder and honey in ZQW. **Methods** Multiple preprocessing methods, including Savitzky-Golay (SG) smoothing, first derivative (1D), second derivative (2D), standard normal variate (SNV) and multiplicative scatter correction (MSC) were adopted to optimize spectral data and eliminate interferences such as background noise and spectral scattering. Based on pure substance spectra combined with the mixture tuned matched filtering (MTMF) algorithm, the abundance scores and mixture feasibility scores of target endmembers were integrated. Material abundance estimation and binarization at the pixel level of mixed samples were then performed, enabling the visualization of the spatial distribution of medicinal powders. Meanwhile, a residual network (ResNet) model was constructed for the prediction and pixel-level visualization of honey content. **Results** Compared with traditional quantitative models such as partial least squares regression (PLSR), multiple linear regression

收稿日期: 2026-04-02

基金项目: 国家自然科学基金项目 (82474048)

作者简介: 沈婷婷, 硕士研究生, 研究方向为中药药效物质基础及质量评价。E-mail: stt718156428@163.com

*通信作者: 张 慧, 教授, 博士生导师, 主要从事中药药效物质辨识及过程质量控制研究。E-mail: zh889@zjut.edu.cn

(MLR), ridge regression (RR), least absolute shrinkage and selection operator (Lasso), random forest (RF) and ElasticNet, the R^2 of the prediction set was significantly improved from 0.837 6 to 0.931 1 with the proposed model. **Conclusion** The method combining pixel unmixing and deep learning intuitively presents the spatial distribution of medicinal raw materials and excipients in the preparation. A novel insight for the refined production and quality control of traditional Chinese medicine preparations is provided.

Key words: Zhisou Qingguo Wan; hyperspectral; pixel unmixing; mixing uniformity; visualization

中药制剂的质量均匀性直接影响其疗效与安全性, 因此, 在生产过程中实现原料与辅料的精细化混合与均匀度控制具有重要意义^[1-2]。近年来, 遥感领域的像元解混技术因其能够基于光谱特征对混合物成分进行定量估计而广泛应用于复杂系统的成分解析, 但其在中药制剂均匀度评价中的应用仍较少^[3-4]。

高光谱成像技术 (hyperspectral imaging, HSI) 是一种融合空间成像与光谱分析的新型无损检测技术, 实现了“图谱合一”的多维信息同步获取^[5]。该技术起源于 20 世纪 70 年代的遥感领域, 随着传感器、光学元件及计算处理能力的发展, 逐渐扩展至农业^[6-7]、食品^[8-10]、医药^[11-13]、环境监测^[14-15]等多个应用领域。在中药检测中, HSI 凭借能够同时获取样品空间分布信息与光谱化学特征的优势, 成为实现快速、无损、多指标同步检测的重要工具^[16-18]。与传统的可见光成像仅记录空间像素亮度信息不同, 高光谱成像能够在每个空间像素点上采集连续、高分辨率的光谱数据, 形成一个三维数据立方体, 即空间维 (X 、 Y) 与光谱维 (λ) 构成的高维数据集^[19-21]。这一特性使得 HSI 不仅可以揭示样品表面特征, 还能反映其内部化学成分的空间分布及物理状态变化, 有效弥补了传统检测方法只能获取平均信息, 无法反映空间分布差异的局限。

止嗽青果丸是《卫生部药品标准·中药成方制剂》(第十册) 收载药品, 常用于风寒束肺引起的咳嗽痰盛等症。标准中仅收载显微鉴别与冰片的薄层鉴别, 无制剂整体均匀度评价, 而空间分布均匀度是固体制剂的关键质量属性^[22-24], 它直接决定单位剂量中活性成分含量的一致性, 进而影响临床用药的安全性与有效性。

基于此, 本研究以止嗽青果丸为例, 引入像元解混方法, 通过结合多种光谱预处理手段对混合样本进行像素级成分丰度估计与二值化, 实现药材粉末在制剂中的空间分布可视化。同时, 通过构建基于 ResNet 的深度学习模型对蜂蜜含量进行预测与可视化, 为中药制剂的均匀度评价与精细化质量控制提供了新的思路与方法。

1 仪器与材料

1.1 仪器

H6d 型多功能食品加工机, 厦门合慧电子科技有限公司; 80 目不锈钢标准筛, 绍兴市上虞圣超仪器设备有限公司。

高光谱成像系统主要包含成像组件、光照装置、样品移动平台以及控制程序, 所有组件均放置在密闭暗箱内, 从而降低外界光线带来的影响。成像组件搭载有光谱区间在 400~1 002 nm 的相机 (型号 FX10c, 芬兰 SPECIM 公司)、可调节焦距的镜头 (型号 OLET15, 芬兰 SPECIM 公司)。样品依靠高精度水平移动平台 (DH-TRPOL-PY200, 中国大恒集团有限公司北京视觉图像技术分公司) 完成定位, 系统运行与数据获取由配套软件 (Lumo-Recorder, Specim, Oulu, Finland) 统一调控。本实验全部数据处理工作均在 ENVI5.3 软件、Spyder (Python 3.11.4) 和 Labelme 上完成。

1.2 材料

本实验所用西青果 (批号 YP2026010401)、麻黄 (批号 2026010402)、苦杏仁 (批号 2026010403)、石膏 (批号 2026010404)、甘草 (批号 2026010405)、紫苏子 (批号 2026010406)、紫苏叶 (批号 2026010407)、半夏 (批号 2026010408)、浙贝母 (批号 2026010409)、桑白皮 (批号 2026010410)、白果仁 (批号 2026010411)、黄芩 (批号 2026010412)、款冬花 (批号 2026010413)、冰片 (批号 2026010414) 等药材均由浙江省食品药品检验研究院提供, 药材规格均为药用饮片级。所有药材经浙江工业大学药学院张慧教授鉴定, 分别为使君子科榄仁树属植物诃子 *Terminalia chebula* Retz. 的干燥幼果, 麻黄科麻黄属植物草麻黄 *Ephedra sinica* Stapf 的干燥草质茎, 蔷薇科杏属植物杏 *Prunus armeniaca* L. 的干燥成熟种子, 硫酸盐类矿物石膏族石膏, 豆科甘草属植物甘草 *Glycyrrhiza uralensis* Fisch. 的干燥根和根茎, 唇形科紫苏属植物紫苏 *Perilla frutescens* (L.) Britt. 的干燥成熟果实、干燥叶, 天南星科半夏属植物半夏 *Pinellia ternata* (Thunb.) Breit. 的干燥块茎, 百合科贝母属植物浙贝母 *Fritillaria thunbergii* Miq.

的干燥鳞茎, 桑科桑属植物桑 *Morus alba* L. 的干燥根皮, 银杏科银杏属植物银杏 *Ginkgo biloba* L. 的干燥成熟种子, 唇形科黄芩属植物黄芩 *Scutellaria baicalensis* Georgi 的干燥根, 菊科款冬属植物款冬 *Tussilago farfara* L. 的干燥花蕾, 樟科樟属植物樟 *Cinnamomum camphora* (L.) Presl 的新鲜枝、叶经提取加工制成的冰片。

2 方法与结果

2.1 样本制备

将所有药材进行打粉, 随后过 80 目筛, 过筛后的粉末装入塑料皿中并压实, 用于高光谱图像的采集。药材粉末样本见图 1。将药材粉末按照《卫生部药品标准中药成方制剂》(第十册) 标准的止嗽青果丸各药材比例混合, 随后将混合后粉末与炼蜜分别按照 1:0.9、1:1.0、1:1.1、1:1.2、1:1.3、1:1.4 比例混合制丸, 并整齐排列在移动平台上, 用于高光谱数据的采集。

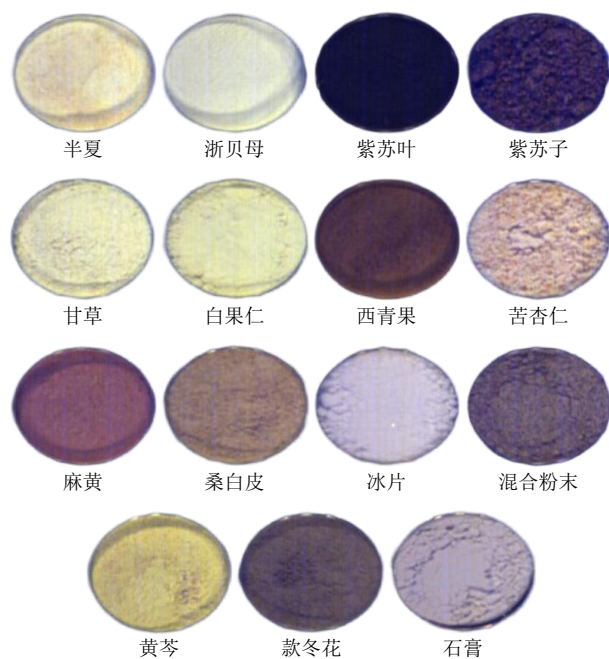


图 1 药材粉末样本

Fig. 1 Herbal powder samples

2.2 高光谱数据的采集

将装有样本的塑料皿与丸整齐排列在移动平台上, 在 400~1 002 nm 波段采集光谱数据。通过反复调试相机焦距与平台移动速度, 保证样品图像清晰完整、数据稳定可靠, 最终确定最优采集参数: 平台扫描速度为 3.1 mm/s, 曝光时间为 29 ms, 波段数为 224。

为削弱仪器暗电流、探测器噪声以及光源强度

波动对高光谱图像的影响, 采用标准黑白板法进行辐射校正。在与样品采集一致的光学条件下, 分别获取白板参考图像与黑板参考图像: 白板参考图像由反射率接近 100% 的聚四氟乙烯标准白板扫描获得, 黑板参考图像则在关闭电源、遮挡镜头的暗场环境下采集得到。利用上述黑白板参考图像对原始高光谱图像进行校正计算, 以获得真实有效的光谱数据, 校正公式见式 (1)。

$$R_c = (R_{\text{raw}} - R_{\text{dark}}) / (R_{\text{white}} - R_{\text{dark}}) \quad (1)$$

R_c 是反射率校正后图像, R_{raw} 是原始反射率图像, R_{dark} 是黑板参考图像, R_{white} 是白板参考图像

黑白校正后的高光谱图像, 使用 Labelme 软件选择 ROI 区域, 每个混合比例丸剂均选择 400 个像素点的光谱曲线作为样本, 共计 2 400 个样本。

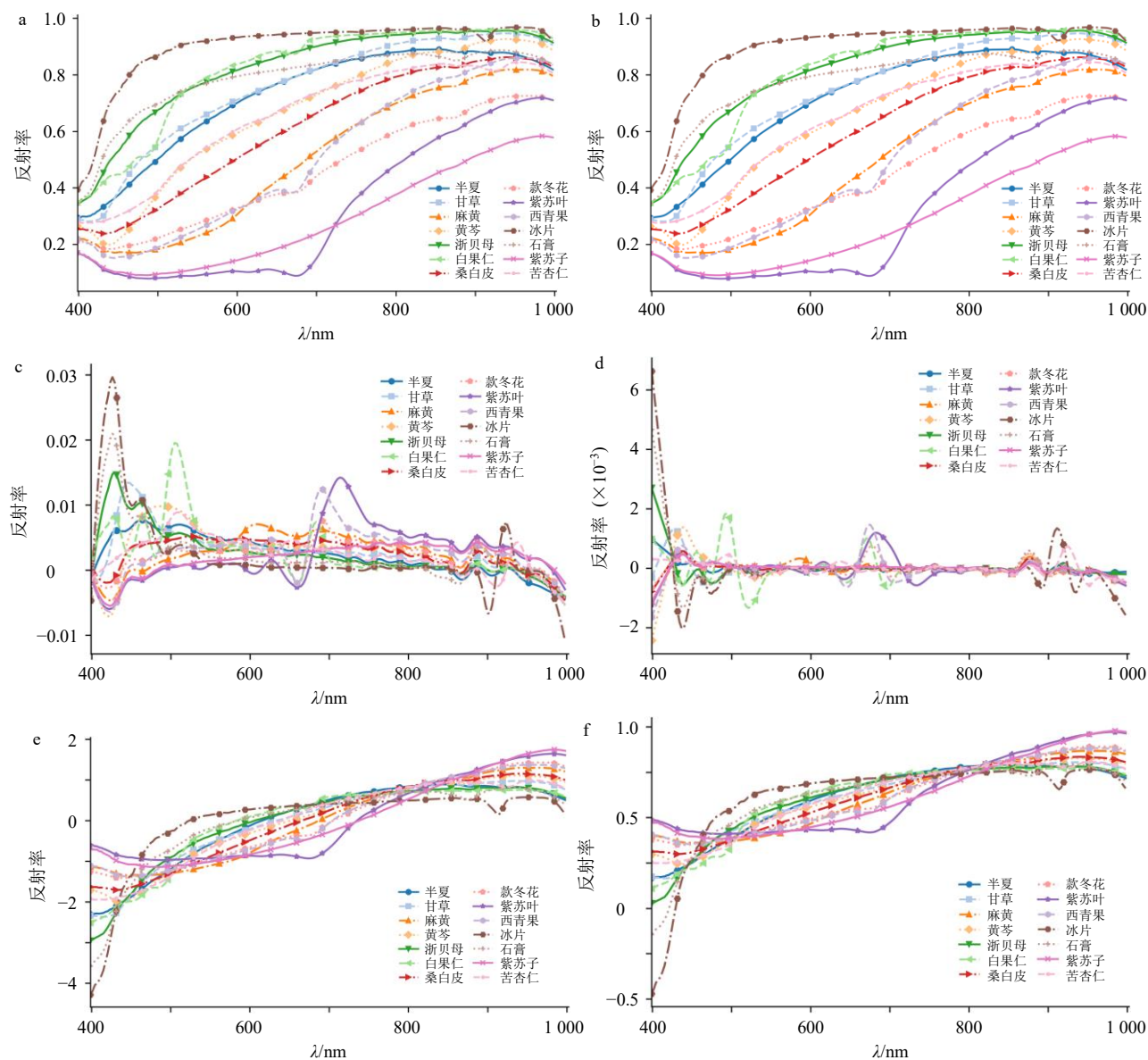
2.3 药材粉末光谱特征分析

采用 SG 平滑 (Savitzky-Golay, SG)、一阶导数 (first derivative, 1D)、二阶导数 (second derivative, 2D)、标准正态变量变换 (standard normal variate, SNV)、多元散射校正 (multiplicative scatter correction, MSC) 等算法对光谱进行预处理, 结果见图 2。由图 2 可知, 各纯物质光谱的整体变化趋势较为接近。在原始光谱及 SG 平滑处理后的光谱中, 甘草与苦杏仁均在约 950 nm 波长处呈现出明显的峰谷特征, 紫苏叶、西青果与白果仁则在约 690 nm 波长处出现相似的峰谷形态。此外, 部分物质在一定波段范围内光谱几乎重叠, 如黄芩与苦杏仁在 500~700 nm 的光谱曲线几乎重叠, 难以有效区分。经 1D 与 2D 预处理后, 各纯物质在 400~500 nm 及 690~720 nm 的光谱差异得到显著放大, 特征信息更为突出。经 SNV、MSC 预处理后, 各纯物质的光谱整体趋势依然相近, 散射效应得到一定程度的校正, 但样品间的区分度提升有限。

2.4 像元解混混合均匀度分析

2.4.1 光谱角匹配 (spectral angle mapper, SAM)

SAM 是一种基于光谱向量几何特征的像元解混方法。该方法将光谱视为高维空间中的向量, 通过计算观测像元光谱向量与参考端元光谱向量之间的夹角, 来衡量两者的相似程度^[23]。本研究通过设定光谱角阈值识别含有目标物质成分的像素。其中阈值设置采用均值减标准差倍数法进行动态设置, 该方法通过计算角度值的均值和标准差, 并利用一个常数因子进行阈值计算, 在本研究中, 常数因子设为 1。同时设置了阈值上限为 0.3, 防止计算结果显著



a-原始光谱; b-SG 平滑; c-1D; d-2D; e-SNV; f-MSC。

a-original spectra; b-SG smoothing; c-1D; d-2D; e-SNV; f-MSC.

图 2 不同预处理方法下的纯物质平均光谱

Fig. 2 Average spectra of pure substances under different pretreatment methods

假阳性。解混结果见表 1, 表中数据为不同算法解混后计算的该药材含量。采用 SAM 算法结合不同预处理方法进行解混均未检出冰片, 这主要是因为该方法基于混合样本中各像素点的光谱与纯物质光谱的光谱角相似度匹配进行组分判别与丰度反演。

SAM 算法对原始光谱解混得到的各组分解混丰度图及二值化图像见图 3。其中, 丰度图色标数值代表对应像素下目标药材的占比, 二值化图中黑色区域为未检出该组分区域, 白色则为检出区域。图中多种物质的检出区域与含量结果较为接近。

在实际混合样本中, 单个像素通常由多种成分

共同构成, 目标光谱与参考光谱之间的相似度较低, 而各组间的光谱相似度较高, 结果如表 2 所示。因此, 这种基于全局光谱角匹配的解混方式在止嗽青果丸这种复杂多组分体系中易出现光谱混淆与丰度估计偏差, 从而导致部分成分无法有效识别, 且各组分解混精度受限。

2.4.2 经典最小二乘法 (constrained least squares, CLS) CLS 算法是一种基于线性混合模型的有监督像元解混算法^[24], 该算法假设混合像元的光谱向量可表示为各端元光谱的线性加权叠加, 计算公式见式 (2)。

表 1 解混结果
Table 1 Unmixing results

模型	预处理	不同算法解混后计算的该药材含量/%													
		半夏	甘草	麻黄	黄芩	浙贝母	白果仁	桑白皮	款冬花	紫苏叶	西青果	冰片	石膏	紫苏子	苦杏仁
SAM	原始光谱	15.07	15.15	7.38	14.98	15.27	15.15	14.98	12.04	15.42	14.00	0.00	0.65	15.29	15.12
	SG	15.18	15.22	6.61	15.13	15.27	15.20	15.10	12.12	15.35	14.64	0.00	0.80	15.20	15.24
	1D	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
	2D	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
	SNV	0.00	0.00	11.53	9.28	0.00	0.00	15.11	12.77	15.46	13.10	0.00	0.00	15.15	0.01
	MSC	15.15	15.30	11.38	15.43	15.19	15.29	15.07	12.69	15.39	12.97	0.00	0.00	15.12	15.17
CLS	原始光谱	86.21	32.83	55.56	27.33	60.17	15.54	0.05	95.25	5.71	99.78	1.46	39.85	0.69	85.08
	SG	87.08	32.28	58.49	28.25	65.43	13.94	0.03	96.70	5.73	99.87	0.97	38.45	0.55	88.19
	1D	51.51	50.38	30.08	37.67	38.95	49.98	41.66	51.94	4.16	91.85	18.61	54.86	34.98	43.92
	2D	46.79	45.10	46.37	46.73	49.89	51.29	51.97	49.05	21.95	71.07	30.48	48.21	46.54	49.41
	SNV	16.14	55.28	29.49	45.62	11.49	53.54	30.03	15.87	3.63	100.00	9.73	83.36	2.14	29.69
	MSC	3.19	45.87	7.40	39.97	27.07	25.90	54.75	33.69	1.91	100.00	1.41	51.67	0.85	25.06
NMF	原始光谱	10.86	8.30	1.46	2.90	0.00	28.08	0.00	0.29	38.68	99.70	0.02	5.17	0.21	0.01
	SG	11.27	8.71	1.63	2.80	0.00	27.21	0.00	0.51	39.53	99.59	0.02	4.85	0.26	0.01
	1D	0.00	0.24	0.00	0.00	0.00	30.74	0.00	0.00	24.27	99.52	3.47	0.64	0.02	0.02
	2D	0.00	0.06	0.00	0.26	0.00	41.89	0.00	0.00	2.12	61.30	6.41	13.03	0.00	36.97
	SNV	0.91	0.92	0.55	0.29	0.00	0.66	0.00	0.12	36.94	99.94	0.00	2.49	0.17	0.03
	MSC	4.32	0.08	0.68	0.19	0.00	1.86	0.00	0.01	55.75	99.94	0.00	1.04	0.13	0.01
VCA	原始光谱	99.18	14.70	1.45	0.00	1.20	55.42	3.27	2.80	2.09	12.51	7.63	0.00	0.12	0.01
	SG	1.20	14.52	99.17	1.47	0.00	3.37	2.95	2.14	12.82	7.48	55.55	0.00	0.13	0.01
	1D	99.81	0.02	24.09	0.00	0.00	0.09	0.00	0.08	30.61	0.25	0.00	0.00	0.36	3.73
	2D	13.62	37.04	0.00	0.08	60.70	0.00	42.44	0.00	1.47	0.00	0.00	0.31	0.00	6.04
	SNV	0.17	99.94	0.13	0.54	0.00	0.29	36.63	0.03	0.95	0.94	0.00	0.58	2.37	0.00
	MSC	99.94	0.01	0.68	0.00	0.13	0.18	55.74	0.01	0.08	4.30	0.00	1.81	0.99	0.00
ICA	原始光谱	0.00	0.00	0.52	0.00	14.38	5.88	4.38	2.19	0.00	0.29	1.40	0.34	99.68	54.56
	SG	0.00	0.53	14.20	0.00	2.24	6.40	4.51	0.01	0.00	1.41	0.27	99.64	0.34	54.67
	1D	5.19	6.80	0.00	37.68	0.00	2.47	1.80	0.00	0.05	0.02	0.01	99.81	39.92	0.31
	2D	1.74	46.18	0.01	0.84	0.20	1.26	2.97	4.68	1.14	73.01	35.10	39.07	3.17	24.18
	SNV	56.80	0.14	99.93	0.68	0.01	0.00	0.24	0.01	5.86	4.61	0.14	0.00	3.80	0.00
	MSC	0.13	55.74	0.68	99.94	0.01	0.00	0.19	0.01	0.08	4.30	1.82	0.00	0.99	0.00
SUnSAL	原始光谱	35.99	1.24	7.74	18.62	0.00	12.70	0.00	1.04	67.66	99.92	0.00	0.03	0.19	2.48
	SG	36.32	1.22	8.09	19.08	0.00	12.07	0.00	1.01	68.31	99.92	0.00	0.03	0.19	2.75
	1D	0.00	4.30	0.00	0.14	0.00	43.98	0.00	0.08	29.62	99.96	8.41	9.91	0.06	2.22
	2D	0.08	2.51	0.39	0.72	6.54	43.24	0.39	1.68	2.02	78.42	4.02	35.34	36.55	45.45
	SNV	7.44	0.08	0.68	0.24	0.00	4.52	0.00	0.02	58.57	99.94	0.00	3.51	0.14	0.01
	MSC	46.28	0.01	8.32	1.41	0.00	1.22	0.00	0.60	97.25	99.97	0.00	0.26	0.15	0.86
MTMF	原始光谱	3.88	3.43	14.53	7.09	0.62	2.32	11.03	24.15	24.45	29.66	0.00	0.18	23.81	4.32
	SG	3.88	3.42	14.49	7.05	0.63	2.29	11.03	24.11	24.46	29.57	0.00	0.19	23.82	4.39
	1D	7.22	9.86	14.92	8.05	7.47	5.73	12.69	25.57	24.82	29.78	3.67	5.55	24.16	5.65
	2D	8.15	10.30	14.82	8.03	9.71	5.89	12.70	26.32	25.26	32.72	6.27	10.72	24.17	5.68
	SNV	0.00	0.00	11.94	0.00	0.00	0.00	0.93	24.86	0.73	31.29	0.00	0.00	7.73	0.00
	MSC	3.94	7.27	14.97	6.54	4.29	1.07	11.13	24.91	23.89	31.49	0.00	1.96	19.48	2.46

$$x = Ea + \varepsilon$$

(2)

端元光谱构成的端元矩阵, $a \in R^N$ 为待求的丰度向量, ε 为 $x \in R^B$ 为混合像元光谱 (B 为波段数), $E \in R^{B \times N}$ 表示由 N 种

残差噪声项

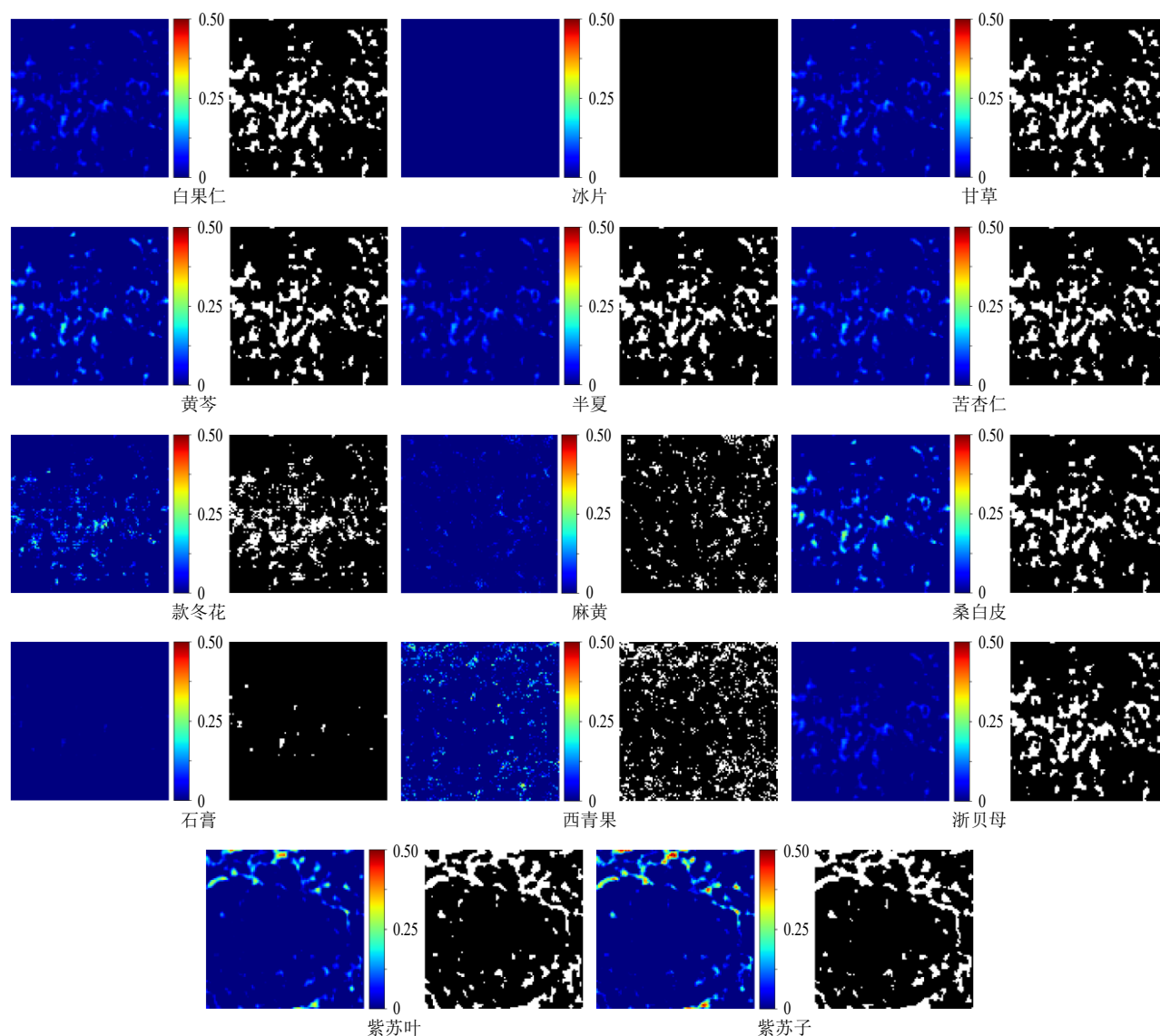


图 3 基于 SAM 的粉末丰度及对应二值化图

Fig. 3 Abundance and corresponding binary images of powder based on SAM

表 2 各组分光谱角相似度匹配得分

Table 2 Spectral angle similarity matching scores of each component

中药	光谱角相似度匹配得分													
	姜半夏	甘草	麻黄	黄芩	浙贝母	白果仁	桑白皮	款冬花	紫苏叶	西青果	冰片	石膏	紫苏子	苦杏仁
姜半夏	1.000 0	0.989 4	0.917 4	0.966 3	0.978 6	0.985 3	0.960 4	0.932 2	0.836 9	0.910 7	0.949 8	0.963 4	0.877 9	0.983 4
甘草	0.989 4	1.000 0	0.921 4	0.970 2	0.977 0	0.980 3	0.964 0	0.937 9	0.843 5	0.915 8	0.948 5	0.962 1	0.884 1	0.983 4
麻黄	0.917 4	0.921 4	1.000 0	0.946 2	0.900 9	0.905 6	0.956 7	0.976 2	0.910 3	0.984 4	0.874 7	0.888 0	0.950 0	0.932 7
黄芩	0.966 3	0.970 2	0.946 2	1.000 0	0.947 9	0.955 6	0.986 1	0.959 8	0.865 3	0.940 7	0.919 5	0.933 2	0.906 3	0.981 0
浙贝母	0.978 6	0.977 0	0.900 9	0.947 9	1.000 0	0.985 2	0.942 7	0.918 1	0.825 1	0.895 2	0.970 9	0.984 5	0.865 6	0.964 0
白果仁	0.985 3	0.980 3	0.905 6	0.955 6	0.985 2	1.000 0	0.948 5	0.921 9	0.827 5	0.899 7	0.959 4	0.972 1	0.868 6	0.971 7
桑白皮	0.960 4	0.964 0	0.956 7	0.986 1	0.942 7	0.948 5	1.000 0	0.969 3	0.873 7	0.949 7	0.915 0	0.928 7	0.915 0	0.975 7
款冬花	0.932 2	0.937 9	0.976 2	0.959 8	0.918 1	0.921 9	0.969 3	1.000 0	0.903 7	0.975 7	0.893 1	0.906 0	0.944 7	0.946 7
紫苏叶	0.836 9	0.843 5	0.910 3	0.865 3	0.825 1	0.827 5	0.873 7	0.903 7	1.000 0	0.921 8	0.804 1	0.815 3	0.951 3	0.851 0
西青果	0.910 7	0.915 8	0.984 4	0.940 7	0.895 2	0.899 7	0.949 7	0.975 7	0.921 8	1.000 0	0.869 7	0.882 6	0.958 8	0.925 9
冰片	0.949 8	0.948 5	0.874 7	0.919 5	0.970 9	0.959 4	0.915 0	0.893 1	0.804 1	0.869 7	1.000 0	0.985 7	0.843 3	0.935 4

表 2 (续)

中药	光谱角相似度匹配得分													
	姜半夏	甘草	麻黄	黄芩	浙贝母	白果仁	桑白皮	款冬花	紫苏叶	西青果	冰片	石膏	紫苏子	苦杏仁
石膏	0.963 4	0.962 1	0.888 0	0.933 2	0.984 5	0.972 1	0.928 7	0.906 0	0.815 3	0.882 6	0.985 7	1.000 0	0.855 0	0.949 1
紫苏子	0.877 9	0.884 1	0.950 0	0.906 3	0.865 6	0.868 6	0.915 0	0.944 7	0.951 3	0.958 8	0.843 3	0.855 0	1.000 0	0.892 4
苦杏仁	0.983 4	0.983 4	0.932 7	0.981 0	0.964 0	0.971 7	0.975 7	0.946 7	0.851 0	0.925 9	0.935 4	0.949 1	0.892 4	1.000 0

采用 CLS 算法结合多种预处理方法进行像元解混均出现明显的假阳性现象。基于该算法对原始光谱解混得到的各组分解混丰度图及二值化图像见图 4，其中目标区域内大量像素点被误判为目标成分。半夏、西青果的含量不论采用哪种模型组合预测结果均超过 70%，显著高于实际结果。这主要是因为 CLS 算法进行解混的前提是噪声、基底干扰小，而在本研究样本中，各成分均匀混合，存在严

重的光谱重叠、非线性混合等问题，导致模型假设与实际光谱混合存在偏差。因此，CLS 这种基于线性光谱混合假设的约束最小二乘解混方法，在止嗽青果丸这类光谱高度重叠的中药制剂样本中适用性有限，易出现假阳性识别问题。

2.4.3 非负矩阵分解 (non-negative matrix factorization, NMF) NMF 是一种基于矩阵分解的非线性解混方法^[25]。该方法无需预先提取端元光谱，

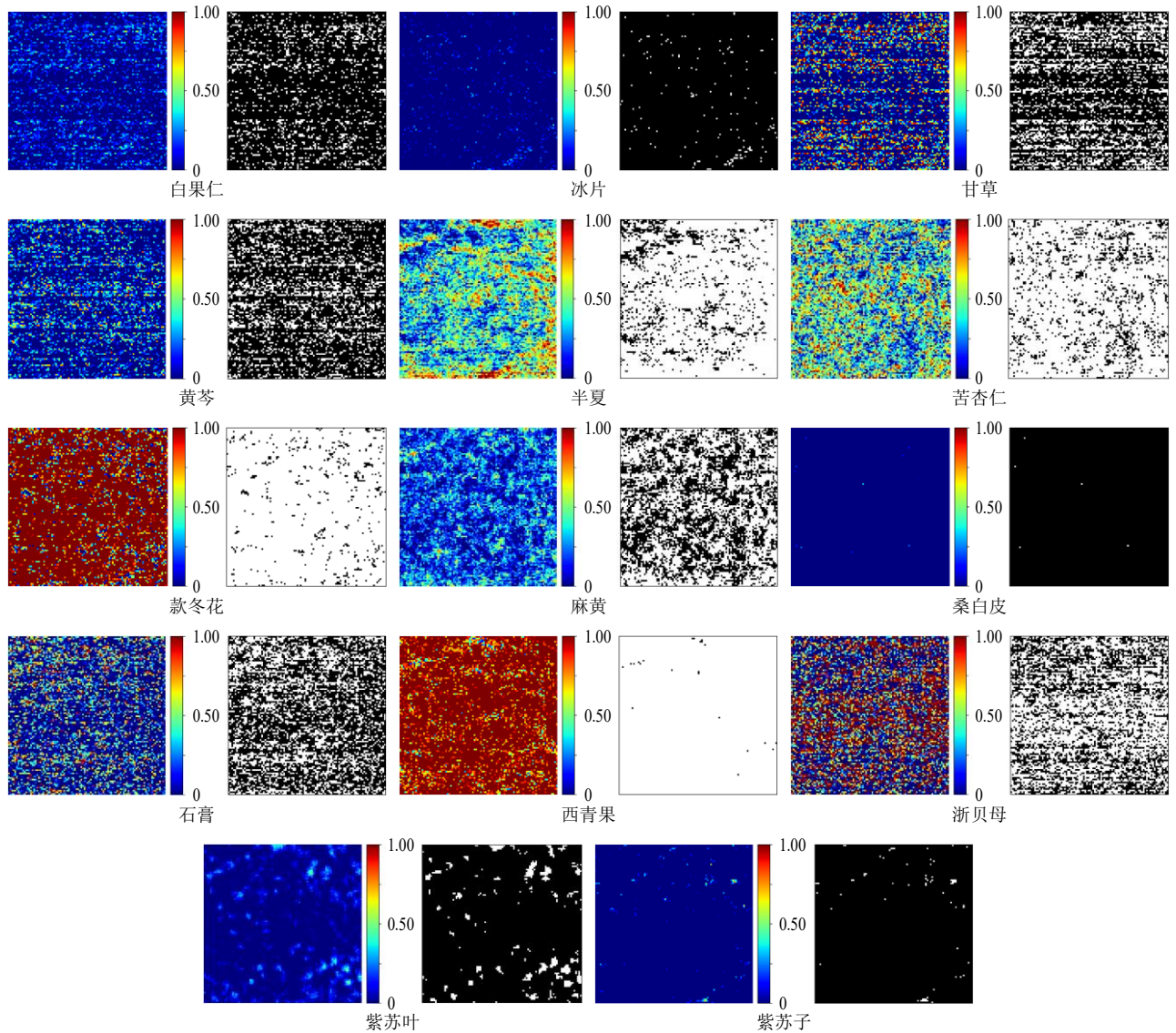


图 4 基于 CLS 的粉末丰度及对应二值化图

Fig. 4 Abundance and corresponding binary image of powder based on CLS

而是将高光谱数据矩阵 $R \in R^{B \times P}$ (B 为波段数, P 为像元总数) 同时分解为端元矩阵, $E \in R^{B \times N}$ 与丰度矩阵 $A \in R^{N \times P}$ 的乘积, 结果见公式 (3)。

$$R \approx EA \quad (3)$$

其目标函数定义为最小化重建误差的 F 范数, 计算公式见式 (4)。

$$\min_{E,A} \|R - EA\|_F^2 \text{ s.t. } E \geq 0, A \geq 0 \quad (4)$$

在解混过程中同步学习端元光谱特征与对应丰度系数, 且强制 2 个矩阵元素均非负, 通过乘法更新规则 (multiplicative update rules, MUR) 对端元矩阵与丰度矩阵交替迭代优化, 直至目标函数收敛。采用 NMF 算法结合多种预处理方法出现多种物质无法检出现象, 且西青果的含量预测结果除结合 2D 预处理方法外, 其余均超过 99%。

2.4.4 顶点成分分析 (vertex component analysis, VCA) VCA 是一种基于几何学理论的无监督端元提取算法^[26]。本研究将 VCA 提取的伪端元通过余弦相似度匹配替换为已知纯光谱, 再结合全约束最小二乘对每个像元求解丰度向量。采用 VCA 算法出现个别物质丰度预测异常偏高与部分物质无法检出现象, 如预测出的半夏含量为 99.18%, 而黄芩、石膏未检出, 苦杏仁预测含量仅为 0.01%, 与实际结果差异较大。这主要是因为该算法解混的前提是数据中存在足够纯净的像元作为各端元的代表, 而在本研究中, 14 种药材粉末混合, 各像素点包含多种组分, 不存在真正意义上的纯像元。

2.4.5 独立成分分析 (independent component analysis, ICA) ICA 是一种基于统计盲源分离理论的像元解混算法^[27]。在本研究中, 该算法将每个波段的像元光谱视为混合观测信号, 各端元的空间丰度分布视为相互独立的源信号, 通过余弦相似度将各独立成分与已知纯光谱进行匹配, 以确定端元对应关系, 最后结合非负最小二乘求解各像元的丰度向量。采用 ICA 结合多种预处理方法较多物质无法检出, 如 SG 平滑后无法检出半夏、黄芩, 1D 处理后无法检出麻黄。这主要是因为多种组分在颜色外观相近的情况下其可见光反射光谱形状高度重叠, 各组分之间存在较强的光谱相关性。尽管 ICA 算法通过余弦相似度将提取端元替换为已知的纯物质光谱, 但由于分解阶段所估计的混合矩阵本身已存在严重偏差, 因此, 计算的权重信息无法准确反映各组分在像元中的真实比例关系。

2.4.6 稀疏解混变量分裂增广拉格朗日算法

(sparse unmixing by variable splitting and augmented lagrangian, SUnSAL) SUnSAL 是一种基于稀疏优化理论的像元解混算法, 该算法假设在一个包含大量候选端元的光谱库中, 每个混合像元实际上仅由少数几种端元线性组合而成, 丰度向量具有天然的稀疏性^[28]。SUnSAL 采用交替方向乘子法将原问题分裂为若干子问题交替求解, 这种求解方式可以将复杂的约束优化问题转化为一列简单子问题的交替迭代, 在保证收敛性的同时显著提升了计算效率。采用 SUnSAL 结合多种预处理方法进行像元解混, 紫苏叶与西青果的含量预测结果显著假阳性, 同时 3 种预处理结合方法未检出浙贝母和桑白皮。

2.4.7 混合调谐匹配滤波解混 (mixture tuned matched filtering, MTMF) MTMF 是一种结合匹配滤波与混合可行性约束的半监督像元解混方法, 同样无需已知图像中所有端元的信息^[23]。设高光谱数据矩阵为 $R \in R^{B \times P}$, 目标端元光谱向量为 $t \in R^L$ 。首先, 对数据进行最小噪声分离变换, 以降低数据维度并抑制噪声, 获得降维后的特征子空间表达 $R' \in R^{k \times P}$ ($k \ll B$)。在此基础上, 匹配滤波步骤通过最大化目标信号响应, 抑制背景干扰, 估计每个像元中目标端元的匹配滤波得分 (matched filtering score, MF score), 其滤波算子定义见公式 (5)。

$$f = C^{-1}(t' - \mu)(t' - \mu)^T C^{-1}(t' - \mu) \quad (5)$$

C 为背景协方差矩阵, μ 为背景均值向量, t' 为目标端元在 MNF 子空间中的投影

在所有尝试的解混算法与预处理方法组合中, MTMF 结合 1D 预处理的检测结果与实际组分含量最为接近, 该算法组合得到的解混丰度图及二值化图像见图 5, 所有组分都得到了有效识别。从算法机制角度来看, 这是因为 MTMF 在匹配滤波的基础上引入了不可行性评分作为双重筛选机制, MF 得分衡量目标端元与像元光谱之间的相似程度, 而不可行性评分则评估该像元是否落在物理上合理的混合范围之内, 只有同时满足 MF 得分高且不可行性得分低的像元才被判定为检出, 这一双重约束有效抑制了单一相似度指标下的假阳性响应, 使检测结果具有更强的物理可解释性。

与其他解混算法相比, MTMF 不依赖全局丰度求和约束, 也不施加强制稀疏假设, 各端元的检测过程相互独立, 避免了多端元竞争机制导致的丰度压制问题, 因此, 在 14 种组分均匀共存的复杂体系中表现出更强的鲁棒性。从预处理角度来看, 1D 处

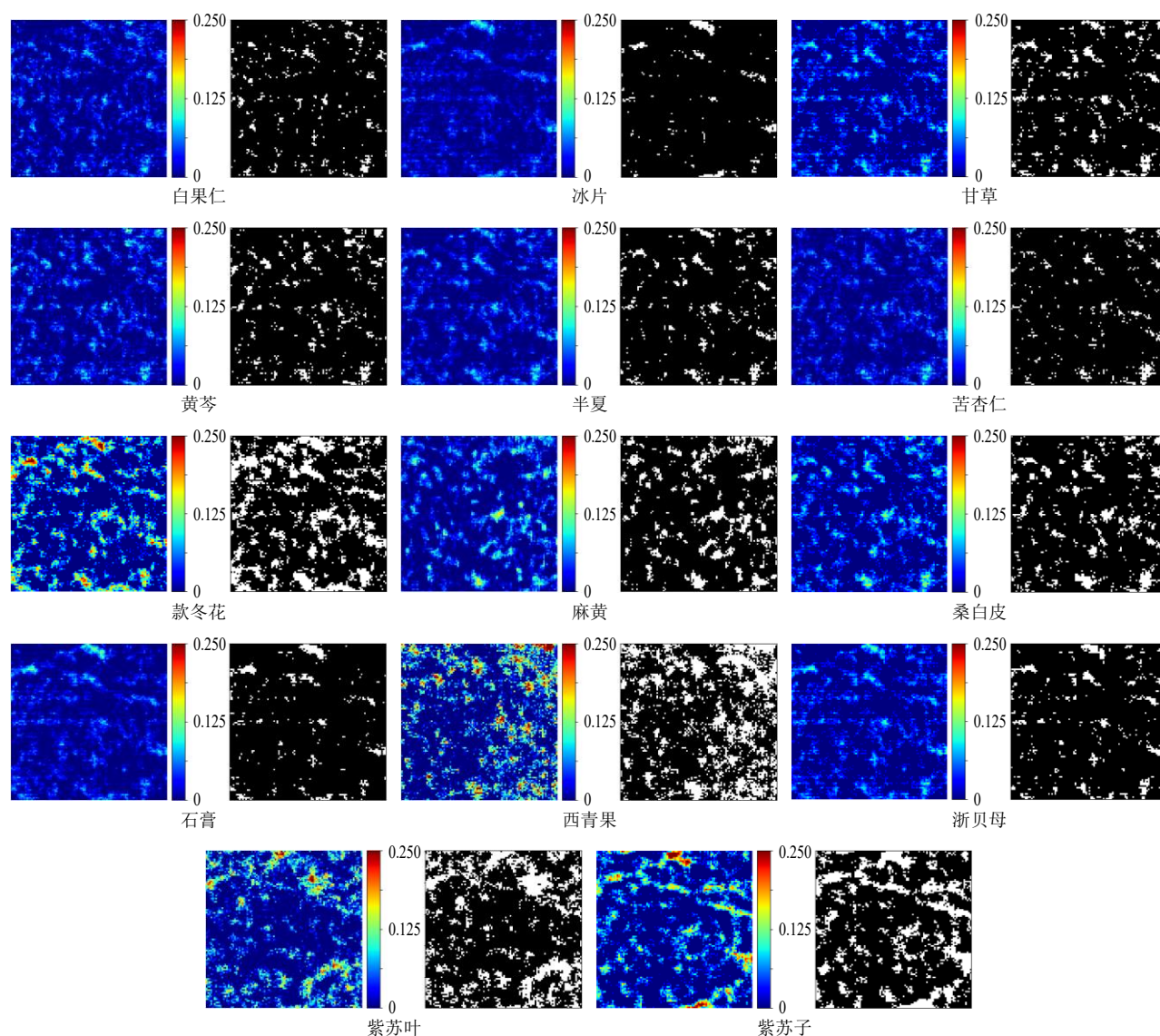


图 5 基于 MTMF 的粉末丰度及对应二值化图

Fig. 5 Abundance and corresponding binary images of powder based on MTMF

理能够有效消除光谱基线的常数偏移,突出各组分在可见光波段吸收峰位置与斜率上的差异特征,在不引入二阶导数所带来的高频噪声放大效应的前提下,适度增强了各端元光谱之间的可分性,使 MTMF 的匹配滤波过程能够更准确地捕捉各组分的特征响应。两者的结合在一定程度上弥补了可见光波段药材粉末光谱高度重叠、幅值差异显著等固有缺陷,从而在所有方法中取得了最接近实际含量的解混结果。

2.4.8 药材粉末混合均匀度评价 基于 1D-MTMF 最优解混结果,以各药材的像素级丰度值为基础,计算 14 种药材的 RSD 值,量化评价粉末混合均匀度^[29-30],RSD 值越小,说明分布越均匀,结果白果仁、冰片、甘草、黄芩、半夏、苦杏仁、款冬花、麻

黄、桑白皮、石膏、西青果、浙贝母、紫苏叶、紫苏子像素级丰度值的 RSD 分别为 1.491 2%、1.572 1%、1.504 9%、1.498 2%、1.516 1%、1.492 5%、1.516 0%、1.515 9%、1.507 9%、1.572 9%、1.506 1%、1.526 7%、1.500 7%、1.570 7%,14 种药材的 RSD 值均处于 1.491 2%~1.572 9%,且各组分间 RSD 差异较小,表明该粉末样本各药材原料的分布较为均匀,混合效果较好。

2.5 基于 ResNet 的蜂蜜定量与混合均匀度表征

2.5.1 蜂蜜光谱特征分析 将 2 400 个不同含量蜂蜜的样本进行 SG、1D、2D、SNV 预处理,结果如图 6 所示。从图 6 中可以看出,无论是原始光谱,还是经过不同预处理方法处理后的光谱,所有曲线均在约 690、890 nm 波长处呈现出明显的波动特征。

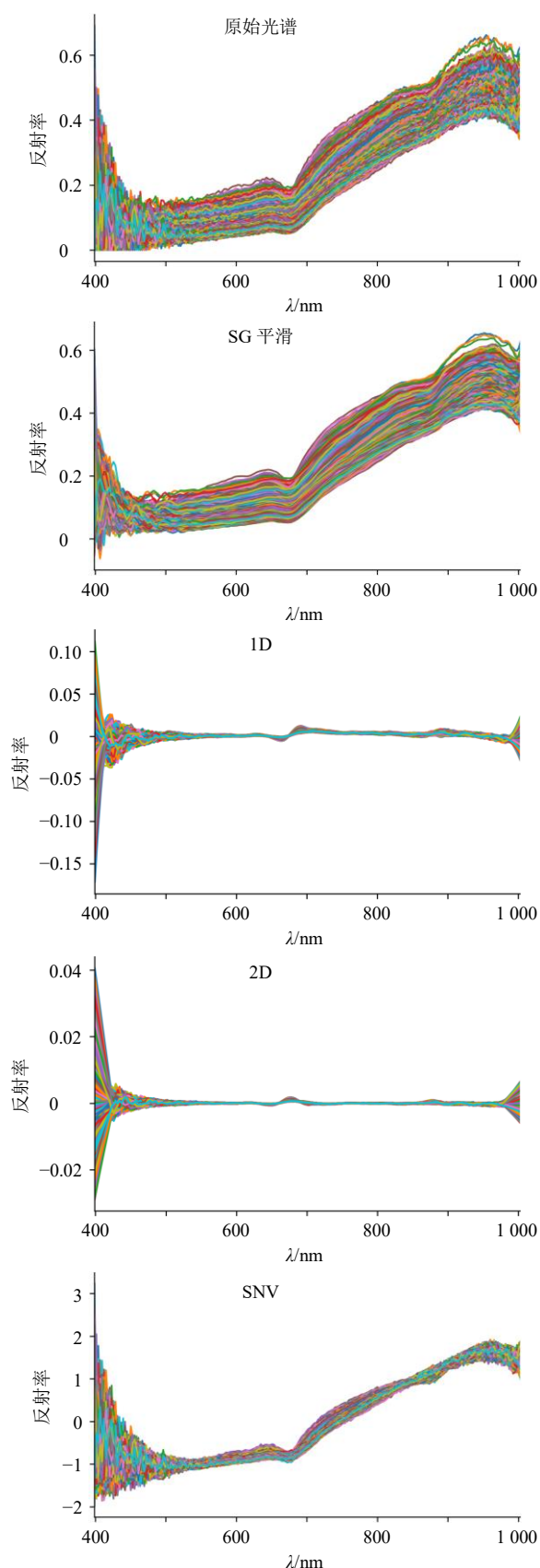


图 6 不同预处理方法下的蜂蜜平均光谱
Fig. 6 Average spectra of honey under different pretreatment methods

这可能与蜂蜜中的所含糖类物质的 O-H 键和水分的 C-H 键有关。

2.5.2 传统定量模型构建与性能对比 基于多种预处理方法处理的光谱, 分别构建 PLSR、MLR、RR、Lasso、RF、ElasticNet 等 6 种传统定量模型, 以 R^2 和 RMSE 为评价指标, 对比模型的预测性能。 R^2 越接近 1, RMSE 越小, 证明模型性能越好, 具体结果见表 3。从表 3 中可知, 传统模型的定量结果整体较差。同时, 大多数模型 R^2 均小于 0.6, 定量精度较差。表现最佳的模型为 1D-MLR, 预测集 R^2 为 0.837 6, 但仍难以满足实际定量分析的精度要求。这可能是因为蜜丸样本中蜂蜜含量的变化所引起的

表 3 传统定量模型结果

Table 3 Results of traditional quantitative models

预处理	模型	校正集		预测集	
		R^2	RMSE	R^2	RMSE
原始光谱	PLSR	0.722 9	0.019 8	0.636 0	0.022 0
	MLR	0.931 5	0.009 8	0.819 3	0.015 5
	RR	0.737 2	0.019 3	0.629 8	0.022 2
	Lasso	0.495 4	0.026 7	0.506 8	0.025 6
	RF	0.974 0	0.006 1	0.798 0	0.016 4
	ElasticNet	0.556 0	0.025 0	0.553 3	0.024 4
SG	PLSR	0.698 1	0.020 6	0.638 8	0.021 9
	MLR	0.876 0	0.013 2	0.824 0	0.015 3
	RR	0.720 7	0.019 9	0.644 7	0.021 7
	Lasso	0.495 5	0.026 7	0.506 4	0.025 6
	RF	0.975 5	0.005 9	0.836 9	0.014 7
	ElasticNet	0.555 7	0.025 0	0.551 9	0.024 4
1D	PLSR	0.663 8	0.021 8	0.539 8	0.024 7
	MLR	0.941 7	0.009 1	0.837 6	0.014 7
	RR	0.671 7	0.021 5	0.527 3	0.025 1
	Lasso	0.350 7	0.030 3	0.330 9	0.029 8
	RF	0.963 8	0.007 2	0.725 9	0.019 1
	ElasticNet	0.465 4	0.027 5	0.441 2	0.027 3
2D	PLSR	0.652 5	0.022 2	0.508 4	0.025 6
	MLR	0.907 0	0.011 5	0.670 0	0.021 0
	RR	0.662 4	0.021 8	0.517 2	0.025 3
	Lasso	0.321 6	0.031 0	0.300 2	0.030 5
	RF	0.947 6	0.008 6	0.575 1	0.023 8
	ElasticNet	0.399 5	0.029 1	0.370 7	0.028 9
SNV	PLSR	0.706 4	0.020 4	0.563 4	0.024 1
	MLR	0.845 6	0.014 8	0.671 4	0.020 9
	RR	0.706 5	0.020 4	0.565 8	0.024 0
	Lasso	0.436 0	0.028 2	0.409 1	0.028 0
	RF	0.959 4	0.007 6	0.695 5	0.020 1
	ElasticNet	0.505 0	0.026 4	0.468 6	0.026 6

光谱差异相对细微,而 PLSR、MLR 等传统方法对非线性、强耦合的光谱特征提取能力有限。RF 等模型虽然具备一定的非线性建模能力,但在高维光谱输入下容易出现过拟合或欠拟合问题,泛化性能下降。此外,蜜丸是由蜂蜜与多种药材粉末混合制成的复杂固体制剂,药材粉末的光谱信号对蜂蜜的近红外特征吸收存在严重的基质干扰,光谱信息高度混叠,传统线性或浅层模型难以有效区分蜂蜜与药材各自的特征信息。

2.5.3 ResNet 深度学习模型构建 本研究构建 ResNet 模型用于蜂蜜的含量预测,模型结构共分为 3 层。首先是 Stem 层,使用一个卷积核大小为 7 的一维卷积将单通道输入映射至 64 个特征通道,并经批归一化与 GeLU 激活函数,完成初步特征提取。随后经过 3 个残差块,每个残差块包含 2 层卷积,且均带有批归一化,通过将块的输出与输入直接相加后再激活,保留了原始光谱的细节信息。最后通过自适应平均池化将特征序列压缩至固定长度 16,展平后经全连接层与 Dropout 正则化,输出预测值,即对应的蜂蜜含量。

使用 ResNet 定量模型对蜂蜜含量进行预测的结果见表 4。从表 4 中可以看出,该模型性能整体显著优于传统模型。其中经 SG 平滑处理后的模型在预测集中 R^2 达 0.931 1。同时,即使是使用原始光谱建模,预测集 R^2 也能达到 0.898 8,说明该模型对光谱数据的质量依赖程度相对较低,具有较强的鲁棒性。这可能是因为该模型通过多层一维卷积操作,能够自动从高维光谱数据中逐层提取局部和全局的深层非线性特征,相较于传统模型具有更强的特征表达能力,能够有效捕捉蜂蜜在复杂蜜丸基质背景下的细微光谱响应。而模型中引入的批归一化和 Dropout 机制,在一定程度上抑制了过拟合,增强了模型对不同样本的泛化能力。

2.5.4 蜂蜜含量空间分布可视化表征 利用训练好

的最佳 ResNet 模型对样本中每个像素点的蜂蜜含量进行逐像素预测,并以热图形式进行可视化,结果如图 7 所示。在建模前,本研究通过对各像素点光谱进行散射校正与归一化处理,有效消除了因丸体曲面导致的光程差异和漫反射不均匀等光学几何误差,保证了不同空间位置像素点光谱的可比性。由图 7 可知,6 幅热图色标范围统一,各像素颜色由蓝至红代表蜂蜜含量占比由低至高。从整体趋势来看,随着粉末与蜂蜜的配比逐渐增大,由图 7-a 的 1:0.9 增大至图 7-f 的 1:1.4,热图中红色区域面积逐渐扩大,蓝绿色区域相应减少,各样本整体预测蜂蜜含量呈现出与配比相符的递增趋势,验证了 ResNet 定量模型的可靠性。从空间分布来看,各样本内部蜂蜜含量并非完全均匀分布。图 7-a、b 中,蓝绿色像素占比高且分布较为分散,随着蜂蜜含量升高,橙红色区域逐渐向样本大部分区域扩展,但仍可见局部蓝色低浓度区域。这一空间分布与蜜丸样本在捏合搓圆工艺过程中,蜂蜜分布在物理上较难完全均匀的性质吻合。

2.5.5 蜂蜜混合均匀度评价 基于最佳 ResNet 模型,以该模型对各像素点蜂蜜含量的预测值为基础,

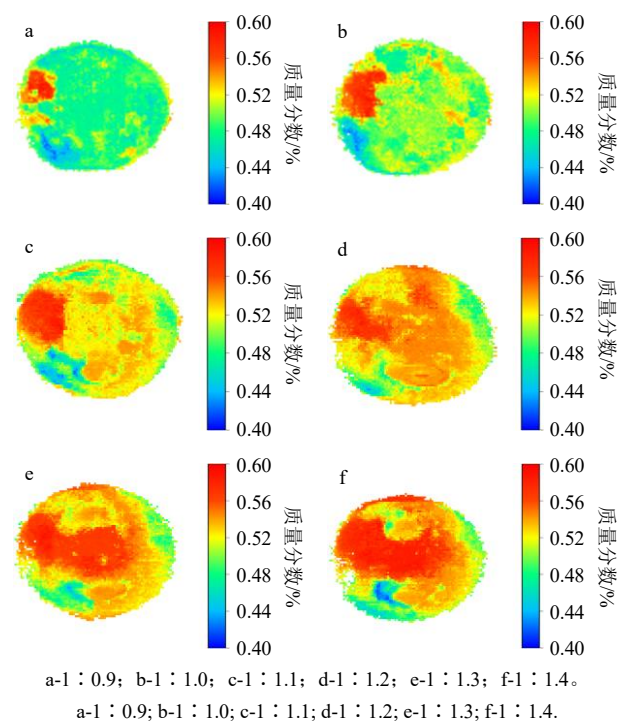


图 7 不同药材粉末与蜂蜜配比蜜丸样本中蜂蜜含量分布可视化

Fig. 7 Visualization of honey content distribution in honeyed pill samples with different medicinal powder-honey ratios

表 4 ResNet 定量结果

Table 4 Quantitative results of ResNet

预处理	校正集		预测集	
	R^2	RMSE	R^2	RMSE
原始光谱	0.976 7	0.005 7	0.898 8	0.011 7
SG	0.998 7	0.001 4	0.931 1	0.009 7
1D	0.928 0	0.010 1	0.766 2	0.017 9
2D	0.934 5	0.009 6	0.613 2	0.023 0
SNV	0.977 9	0.005 6	0.693 7	0.020 4

计算每个样本的 RSD 值, 结果见表 5。6 组配比样本的 RSD 值均处于 3.98%~6.19%, 其中, 配比为 1:1.2 的样本 RSD 值最低, 为 3.98%, 蜂蜜分布最为均匀, 对应图 7-d, 样本整体呈现橙红色, 色彩分布较为连续均一。配比为 1:1.4 的样本 RSD 值最高, 为 6.19%, 对应图 7-f, 该样本局部仍存在较深的蓝色低浓度区域, 这可能与蜂蜜用量增大时, 样本在捏合搓圆过程中蜂蜜出现局部聚集, 导致部分区域蜂蜜含量相对偏低有关。

表 5 不同配比蜜丸样本蜂蜜含量预测的 RSD

Table 5 RSD of honey content prediction for honey pill samples with different ratios

药材粉末与 蜂蜜质量比	RSD/%	药材粉末与 蜂蜜质量比	RSD/%
1:0.9	4.981 4	1:1.2	3.979 4
1:1.0	5.176 5	1:1.3	4.669 7
1:1.1	4.957 7	1:1.4	6.186 4

3 讨论

本研究以止咳青果丸为研究对象, 围绕其生产过程中粉末混合均匀度与蜂蜜混合均匀度的质量控制需求, 将高光谱成像技术与像元解混、深度学习模型相结合, 构建了一套可视化定量分析框架。在光谱预处理方面, 本研究系统比较了 SG 平滑、一阶导数、二阶导数、SNV 及 MSC 等多种预处理方法对光谱数据质量的影响, 有效消除了背景噪声、散射效应等干扰因素, 为后续建模提供了高质量的光谱输入。

在粉末混合均匀度评价方面, 通过将遥感领域的像元解混思路引入中药制剂分析, 以各药材粉末纯物质光谱作为端元, 比较了 SAM、CLS、NMF、VCA、ICA、SUnSAL、MTMF 共 7 种像元解混算法的性能表现。结果表明, MTFM 算法通过综合评估目标端元的丰度得分与混合可行性得分, 能够更准确地实现对混合样本中各像素点的物质丰度估计与二值化处理, 其空间分布可视化效果优于其他算法, 实现了各药材粉末在混合物中空间分布状态的直观呈现, 为粉末混合均匀度的可视化评价提供了有效手段。

在蜂蜜含量定量预测方面, 通过构建 ResNet 深度学习模型, 并与 PLSR、MLR、RR、Lasso、RF 及 ElasticNet 等多种传统定量模型进行了系统比较。结果表明, 传统模型受制于蜜丸复杂基质的干扰及其自身特征提取能力的局限, 整体预测性能较差, 最

佳模型的预测集 R^2 仅为 0.837 6。而 ResNet 模型凭借其深层非线性特征提取能力与残差连接结构的优势, 在经 SG 平滑处理后预测集 R^2 显著提升至 0.931 1, 预测精度大幅改善。通过利用训练好的模型对蜜丸样本进行逐像素预测, 本研究以热图形式实现了蜂蜜含量的空间分布可视化。

本研究以各样本逐像素点的丰度预测值与蜂蜜含量预测值为基础, 引入 RSD 作为空间统计指标对混合均匀程度进行评价。《中国药典》2025 年版通则 0941 “含量均匀度检查法” 主要基于单剂相对含量的均值与标准差来判定制剂整体含量的合规性, 该方法属于破坏性的整体性检验手段。本研究依托高光谱像素级空间解析优势, 实现了对制剂混合均匀性的非破坏性、空间精细化评价, 能够直观识别局部成分富集与分布不均等质量问题, 弥补了传统方法在空间分辨能力上的不足。未来, 本研究方法可作为中药制剂生产过程工艺优化的辅助评价手段, 与药典常规方法形成有效互补。

本研究提出的像元解混与深度学习相结合的高光谱分析方法, 能够直观、定量地呈现止咳青果丸中药材原料与辅料的空间分布信息, 为中药制剂生产过程的精细化质量控制提供了可行的方法参考。同时, 目前以配比理论值作为实际含量参考值, 暂未结合 HPLC 等精确化学定量手段进行实测真值验证, 后续研究可采用 HPLC 等经典检测手段获取实际含量数据, 用于模型校正与方法验证, 进一步提升该方法的可靠性。

利益冲突 所有作者均声明不存在利益冲突

参考文献

- [1] Zhao J, Tian G, Qu H B. Research on comprehensive quality consistency evaluation strategy for TCM granules: A case study with sugar-free Yangwei Granules produced by fluid-bed granulation [J]. *Chin Herb Med*, 2025, 17(3): 575-583.
- [2] 王静, 吴志生, 李明爽, 等. 银杏叶片体外溶出度与空间分布均匀度评价及关联辨识研究 [J]. *中草药*, 2024, 55(18): 6144-6153.
- [3] 戴佳乐. 高光谱遥感混合光谱特征分析与解混模型研究 [D]. 唐山: 华北理工大学, 2023.
- [4] 蒋婷婷. 基于混合像元分解技术砾石空间分布信息提取研究 [D]. 成都: 成都理工大学, 2021.
- [5] Zhong L Y, Shao M G, Li T T, *et al.* Identification of crude drugs and processed drugs in Chinese herbal slices using hyperspectral imaging [J]. *J Food Compos Anal*, 2025,

- 148: 108669.
- [6] 张少华, 高越之, 程钱雅, 等. 基于地面高光谱遥感的小麦氮效率品种分类及评估技术研究 [J]. 植物营养与肥料学报, 2026, 32(3): 545-561.
- [7] 樊阳阳, 宋华鲁, 梁志超, 等. 基于高光谱成像技术的番茄叶片烟粉虱侵害程度检测 [J]. 山东农业科学, 2026, 58(3): 151-159.
- [8] 罗金凤, 蒲钰, 刘辰姣. 基于高光谱成像与深度学习的食品品质快速无损检测方法研究 [J]. 食品安全导刊, 2025(20): 179-182.
- [9] 李帅彬, 张碧莹, 鲁嘉晟, 等. 高光谱成像技术在食品质量控制与安全检测中的应用研究 [J]. 食品工业科技, 2026, 47(14): 512-521.
- [10] Guo D M, Pan Y J, Wang S S, *et al.* Rapid identification of *Astragalus membranaceus* processing with rice water based on intelligent color recognition and multi-source information fusion technology [J]. *Chin Herb Med*, 2025, 17(4): 724-733.
- [11] 江恩赐, 陈林, 颜继忠, 等. 智能高光谱成像融合 CARS 特征波段筛选快速检测硫熏牛膝 SO_2 含量 [J]. 中国中药杂志, 2022, 47(7): 1864-1870.
- [12] Sun Y Z, Zhang H X, Li Y F, *et al.* Integrating multimodal data fusion for comprehensive characterization, antioxidant marker discovery, and geographical origin tracing of *Platycodonis Radix* [J]. *Food Chem*, 2026, 507: 148231.
- [13] Zhang H, Zhu J Q, Shen T T, *et al.* Authenticity identification of *Pinellia ternata* based on hyperspectral imaging combined with spectral-texture multimodal data fusion strategy [J]. *Microchem J*, 2025, 218: 115133.
- [14] Sheng Y C, Hu X Q, He X W, *et al.* Hyperspectral BRDF based on UAV measurements can characterize optical properties of flat desert surfaces: A comprehensive comparison with laboratory and satellite data [J]. *Remote Sens Environ*, 2026, 334: 115228.
- [15] Medina-García M, Amigo J M, Martínez-Domingo M A, *et al.* Strategies for analysing hyperspectral imaging data for food quality and safety issues-A critical review of the last 5 years [J]. *Microchem J*, 2025, 214: 113994.
- [16] 李梦, 周聪, 王慧, 等. 高光谱成像技术结合机器学习和特征波段筛选的识别人参年限研究 [J]. 中草药, 2026, 57(5): 1887-1895.
- [17] 潘忆瑕, 张弘旭, 颜继忠, 等. 基于高光谱与纹理特征融合的甘草药材基源鉴别研究 [J]. 分析测试学报, 2024, 43(11): 1745-1753.
- [18] 殷文俊, 彭攀, 陈星, 等. 基于高光谱成像技术对甘草饮片甘草苷和甘草酸含量快速无损检测 [J]. 中医药导报, 2026, 32(5): 61-68.
- [19] Saeed F, Liu S M, Liu Y L, *et al.* Hyperspectral image compression with deep learning: A review [J]. *Signal Process*, 2026, 239: 110270.
- [20] Gupta S, Kumar A, Garg R D, *et al.* Exploring Kolmogorov-Arnold networks for hyperspectral crop classification-An evaluative study [J]. *Adv Space Res*, 2026, 77(10): 10175-10193.
- [21] Xing W H, Wang X Q, Ma Z Y, *et al.* Rapid discrimination of *Platycodonis Radix* geographical origins using hyperspectral imaging and deep learning [J]. *Optics*, 2025, 6(4): 52.
- [22] 王逸飞, 章烨雯, 王景雁, 等. 基于近红外化学成像技术的市售凝胶贴膏空间分布均匀性评价方法研究 [J]. 中华中医药杂志, 2017, 32(4): 1830-1832.
- [23] 张芳语, 林玲, 曾敬其, 等. 中药大品种制造关键质量属性表征: 空间分布均匀度质量属性的同仁牛黄清心丸贵细药混合过程控制可视化方法研究 [J]. 中国中药杂志, 2021, 46(7): 1585-1591.
- [24] 林玲, 张芳语, 张静, 等. 中药大品种制造关键质量属性表征: 空间分布均匀度属性的银杏叶片质量控制可视化方法研究 [J]. 中国中药杂志, 2021, 46(7): 1616-1621.
- [25] Offroy M, Ayadi A, Govohetchan L, *et al.* Enhanced Raman hyperspectral imaging using RS-NMF: A novel regularized sparse non-negative matrix factorization for spectral unmixing [J]. *Chemom Intell Lab Syst*, 2026, 269: 105602.
- [26] Schmidt R W, Ariese F, Omidikia N. A comparison of multivariate curve resolution with endmember extraction methods in hyperspectral Raman imaging [J]. *Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc*, 2024, 323: 124868.
- [27] Huang B S, Li S H, Long T, *et al.* Research on predicting photosynthetic pigments in tomato seedling leaves based on near-infrared hyperspectral imaging and machine learning [J]. *Microchem J*, 2024, 204: 111076.
- [28] Wang J J, Huang T Z, Huang J, *et al.* A two-step iterative algorithm for sparse hyperspectral unmixing via total variation [J]. *Appl Math Comput*, 2021, 401: 126059.
- [29] 廖志超, 徐冰, 唐雪芳, 等. 基于离散元法的桂枝茯苓胶囊仿真混合过程与在线监控点设计研究 [J]. 中草药, 2025, 56(4): 1194-1201.
- [30] 万娜, 林环玉, 伍振峰, 等. 基于中药粒子设计结合近红外光谱技术研究清润丸原料粉末的混合均匀性 [J]. 中草药, 2020, 51(17): 4425-4432.

[责任编辑 郑礼胜]