

# DB4403

深 圳 市 地 方 标 准

DB4403/T XXX—XXXX

## 中药鉴别数字化技术要求

General technical requirements for digitalization of  
traditional Chinese medicine identification

(送审稿)

XXXX-XX-XX 发布

XXXX-XX-XX 实施

深圳市市场监督管理局 发布



目 次

前 言 ..... II

1 范围 ..... 1

2 规范性引用文件 ..... 1

3 术语和定义 ..... 1

4 缩略语 ..... 1

5 总体原则 ..... 1

5.1 需求导向 ..... 2

5.2 规范兼容 ..... 2

5.3 人机互鉴 ..... 2

5.4 智能交互 ..... 2

5.5 持续改进 ..... 2

6 基本要求 ..... 2

6.1 人员 ..... 2

6.2 设施 ..... 2

6.3 智能技术 ..... 2

6.4 数据管理 ..... 3

7 中药鉴别数字化研究的技术要求 ..... 3

7.1 图像数据采集 ..... 3

7.2 中药图像数据预处理与标注 ..... 3

7.3 模型构建与性能验证 ..... 4

7.4 数据交付 ..... 5

附录 A（资料性） 菊花（贡菊）性状鉴别数字化示例 ..... 6

附录 B（资料性） 菊花显微鉴别数字化示例 ..... 11

B.3 图像预处理 ..... 12

B.4 菊花显微鉴别模型构建与性能验证 ..... 13

B.4.1 模型结构选择 ..... 13

附录 C（资料性） 肉桂薄层色谱鉴别数字化示例 ..... 15

C.1 肉桂薄层色谱图像采集 ..... 15

C.2 肉桂薄层色谱图像预处理 ..... 15

C.3 肉桂薄层鉴别数字化模型构建与性能验证 ..... 16

参 考 文 献 ..... 18

## 前 言

本文件按照 GB/T 1.1—2020《标准化工作导则 第1部分：标准化文件的结构和起草规则》的规定起草。

本文件的某些内容可能涉及专利，本文件的发布机构不承担识别专利的责任。

本文件由深圳市市场监督管理局提出并归口。

本文件起草单位：深圳市药品检验研究院、中国中药协会中药数字化专业委员会、深圳市中药协会、华润三九医药股份有限公司、哈尔滨工业大学（深圳）、广东省科学院智能制造研究所。

本文件主要起草人：李君瑶、谷丽菲、苏畅、王冰、王淑红、徐冰、庄文婷、卢光明、周谦、谈英、汪勇、吴正军、陈世彬、林丽娜、袁勤芬、董晨东、李彬。

# 中药鉴别数字化技术要求

## 1 范围

本文件确立了中药鉴别数字化总体原则，规定了中药鉴别数字化的基本要求，开展中药鉴别数字化研究的技术要求等内容。

本文件适用于中药性状、显微及薄层色谱项目数字化的研究与开发。

## 2 规范性引用文件

下列文件中的内容通过文中的规范性引用而构成本文件必不可少的条款。其中，注日期的引用文件，仅该日期对应的版本适用于本文件；不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

GB/T 31774 中药编码规则及编码

## 3 术语和定义

下列术语和定义适用于本文件。

### 3.1

**相对比距值** **relative position factor**

薄层色谱法中用于表征物质迁移特性的参数，是目标组分斑点至定位组分斑点距离与参考组分斑点至定位组分斑点距离的比值。

## 4 缩略语

下列缩略语适用于本文件。

CIE-Lab (L/a/b)：CIE-Lab 颜色空间 (CIE-Lab Color Space)

GPU：图像处理单元 (Graphic Processing Unit)

HSB (H/S/B)：色调—饱和度—亮度模型 (Hue-Saturation-Brightness Model)

JSON：JavaScript 对象标记 (JavaScript Object Notation)

ResNet：残差网络 (Residual Network)

R<sub>r</sub>：比移值 (Retention Factor)

RGB (R/G/B)：红—绿—蓝颜色模型 (Red-Green-Blue Color Model)

RP<sub>r</sub>：相对比距值 (Relative Position Factor)

XML：可扩展标记语言 (Extensible Markup Language)

## 5 总体原则

5.1 需求导向

宜紧扣中药产业链核心场景需求，聚焦真伪鉴别、品质评价、溯源等关键需求，确保数字化成果具备实际应用价值，解决中药传统鉴别效率低、经验依赖等实际问题。

5.2 规范兼容

宜遵循统一、开放的数据标准、接口协议与技术规范，建立开放兼容的数字化体系，实现不同系统、多源数据平台的无缝集成与交互操作，保障数据流通与系统协同。

5.3 人机互鉴

宜充分尊重、记录并传承中药传统鉴别专家的感官经验与逻辑判断，数字化系统应致力于量化、学习并融合人工经验，确保结果反映专家综合判断，实现人机优势互补。

5.4 智能交互

宜提供自然、高效的交互方式，支持多模态输入与实时反馈，自适应中药领域各类用户操作习惯。

5.5 持续改进

宜建立反馈与评估机制，对数据、模型、系统及中药标准进行动态维护和持续优化，实现迭代更新。

6 基本要求

6.1 人员

中药鉴别数字化项目开发的主要人员应具备中药学、计算机科学及相关领域专业背景，获得中级及以上技术职称，三年以上中药鉴定、数字化模型开发工作经历，并具有一定的标准研究经验。

6.2 设施

6.2.1 硬件环境配置

宜根据人工智能模型训练与运算需求，配备计算设备。在本地计算机、服务器或通过租赁方式在云平台上进行训练，训练环境宜使用 GPU 显卡，以保障对海量中药图像、数据的快速处理，尤其在多卡环境下进行训练，可显著提升运算效率，加速模型收敛。对于大规模的中药材检验数据处理，可考虑配置专业的计算服务器，其 CPU 核心数应不少于 32 核，以确保数据读取、预处理等环节的流畅运行。

6.2.2 软件开发工具

模型训练可使用编程语言训练框架，搭配计算平台、编程模型（如 CUDA）进行模型部署和训练。服务器端可使用编程语言（如 Python）实现，选择适宜框架（如 FastAPI），搭配数据库工具（如 Alembic）进行数据管理。客户端可使用编程语言（如 JavaScript）实现，选择适宜框架（如 React）。

6.2.3 操作系统与平台

模型构建与性能确认及使用的相应软件应搭建在适宜的操作系统。

6.3 智能技术

通过智能技术实现数字化结果应与中药传统经验逻辑一致，支持人工干预与结果修正。常用的深度学习模型包括卷积神经网络、视觉几何组网络、残差网络、稠密连接网、视觉变换器网络等，常用的开

发框架为Pytorch与TensorFlow，常用的开发语言为Python。确保鉴别过程的可信性、可解释性及跨平台兼容性。

## 6.4 数据管理

### 6.4.1 数据标准化管理

遵循统一数据标准构建中药本体库、标准文本库、信息标注库、图像图谱库等数据库。原始数据、预处理数据及模型输出数据宜分类存储，路径命名规则统一，避免混淆。实施数据版本管理，记录变更时间、人员、内容及备份路径，确保训练数据可追溯。

### 6.4.2 数据存储与备份

数据应尽可能保存在本地服务器或云平台上，本地服务器需具备良好的安全性能，配备防火墙、入侵监测系统安全设备，防止数据泄露与非法访问。云平台应选择具备严格安全认证，如ISO 27001信息安全管理认证的服务商。在存储容量方面，除满足当前数据存储需求外，还应预留一定的扩展空间，以适应未来数据量的增长。建立完善的数据备份机制，采用全量备份与增量备份相结合的方式。

## 7 中药鉴别数字化研究的技术要求

### 7.1 图像数据采集

为增强模型的稳定性与泛化能力，应制定图像数据采集方案，确保所用图像数据具备多样性。图像数据多样性方案宜考虑样品差异、采集设备、拍摄条件（如背景、光照、角度）、实验条件（如环境温度、薄层板来源、展开距离）以及数据来源渠道（如网络、数据库）等方面。

### 7.2 中药图像数据预处理与标注

#### 7.2.1 图像数据命名与初步分类

基于中药基原、炮制状态、显微结构特征、薄层色谱检测条件等信息，对图像数据进行统一命名与分类，以确保数据的组织有序、可追溯并具备良好扩展性。图像数据命名基于样品名称、样品批次、图像类型（性状、显微特征、薄层色谱图）等要素建立统一规则。图像数据分类可根据样品名称、图像类型、拍摄条件、检测条件等维度建立文件目录或数据库。图像数据宜进行初步质量筛选，剔除过于模糊、曝光过度的图像，选出满足需求的图像数据。

#### 7.2.2 图像数据预处理

采集的图像数据宜在标注前进行统一的预处理，以提高图像质量、标准化输入格式，并提升模型训练的稳定性。图像数据预处理操作包括但不限于图像裁剪与居中处理、图像缩放与尺寸统一、图像格式转换等。预处理操作应以不破坏图片数据中关键识别特征为前提，确保模型训练对有效特征保持敏感性。预处理过程应记录参数设置、处理时间等元信息，并与原始图像和标注数据建立对应关系，以支持结果的可追溯性。

#### 7.2.3 图像数据标注

图像数据标注应结合实际需求，明确需要识别的关键属性，构建多维度、多标签的数据结构。标注内容如品种标注、炮制状态标注、显微特征标注、薄层色谱特征斑点标注（包含斑点距离和颜色）等。标注结果宜以结构化格式存储，以便于系统处理和后续使用。

#### 7.2.4 图像数据复核

所有标注的图像数据在投入模型训练前应进行复核，确保数据的完整性、一致性、准确性和唯一性。图像数据复核内容包括但不限于图像数据命名、数据分类、预处理结果、标注内容与格式等。图像数据复核宜记录复核结果、修改记录等关键信息。

### 7.3 模型构建与性能验证

#### 7.3.1 数据集划分

宜在模型训练前将标注的图像数据进行划分，形成互相独立的训练集、验证集和测试集。数据划分应确保各子集均具有代表性与多样性的图像数据，覆盖可能影响识别性能的变量。数据划分应遵循样本不重叠原则，确保验证集和测试集中的图像在训练阶段未被模型见过，以保证性能评估的客观性和泛化性。数据划分方案应保存记录，支持结果可追溯与复现。训练集、验证集和测试集的常见划分比例为7:1:2，可参照以下比例划分：

- 训练集占比宜为60%~80%，用于模型学习，薄层鉴别项目的训练集占比可扩充为30%~80%；
- 验证集占比宜为10%~20%，用于模型参数调整与最佳模型储存；
- 测试集占比宜为10%~20%，用于模型性能最终评估。

#### 7.3.2 模型训练

7.3.2.1 宜在已划分好的训练集上完成，结合任务目标和数据特点，合理设定模型架构、训练参数与训练策略。模型训练过程应支持版本管理、过程追踪与结果复现，确保可重复性与可验证性。

7.3.2.2 中药鉴别数字化模型训练过程应遵循如下要求：

- 模型结构选择：选用适用于图像分类或目标检测任务的算法、公式，如卷积神经网络、轻量网络、残差网络、视觉变换器网络、相对位移值等，结构应与中药图像识别任务规模与复杂度相匹配；
- 特征提取：采用多视图特征提取、通道注意力、空间注意力等方法，从药材图像中提取关键特征信息，包括性状特征（整体形状、大小、颜色、表面特征等）、显微特征（表皮细胞、纤维、石细胞、栅状细胞、导管、油室、树脂道、淀粉粒、花粉粒、草酸钙结晶等）及薄层图像中的斑点颜色与相对位置等；
- 损失函数设定：可选交叉熵、焦点损失等；
- 参数设置优化：应明确学习率、优化器类型、批次大小、最大训练轮数等；
- 训练过程管理：应记录损失函数值、学习率变化等信息，并以结构化格式存档。

#### 7.3.3 模型验证

7.3.3.1 宜在模型验证过程中使用验证集对模型进行性能监控，通过对比模型在测试集与验证集上的性能，判断模型的性能：欠拟合、过拟合或满足要求。模型验证结果应记录关键参数与性能指标，以支持模型版本间的比较与选择。

7.3.3.2 中药性状、显微模型验证宜在训练过程中动态监控训练损失与验证准确率变化，调节模型参数并确定最佳训练轮次。根据训练结果对模型进行优化，如果模型欠拟合，则需增加模型复杂度，如增加模型层数，调小正则化项的系数，调小随机丢弃（dropout）的比例；如果模型过拟合，则需降低模型复杂度，例如减少模型层数，调大正则化项的系数，调大 dropout 的比例。

7.3.3.3 对分类错误的图片进行分析，找出它们的共性，进而对图像处理方法或模型设计进行针对性改进。



### 7.3.4 模型评估与判定

7.3.4.1 宜使用独立测试集对最终模型性能进行验证。必要时可结合中药专业技术人员判别一致性作为补充参考，确保模型在中药图像识别场景下具备足够稳定性与判别力。

7.3.4.2 宜设定模型的评价指标，如准确率、精确率、召回率、F1 分数等，并根据样本和模型特点设定阈值；可使用多个评价指标进行多维度评价。

7.3.4.3 当模型达到预设性能指标要求时，可判定模型建立完成。模型建立完成后，应保存模型文件、结构定义文档、参数配置说明、训练验证日志、性能评估报告等内容，用于模型应用落地与溯源管理。宜对已建立模型进行版本管理，以便后续模型优化、迭代或部署使用。

7.3.4.4 宜建立常态化模型迭代机制，迭代流程符合“数据更新—模型重构—性能评估—版本发布”闭环。基于新增标注数据或修正数据对模型进行重新训练，必要时结合中药专业技术人员判别结果确认有效性。每次迭代后，需生成新的版本号，同步更新模型文件、结构文档、参数说明及评估报告，明确迭代内容（如数据增量、算法优化点、性能提升幅度等），并与历史版本一同归档，确保迭代过程可追溯，且支持回退至历史稳定版本。

## 7.4 数据交付

交付成果应具备完整的版本号、生成时间、适用范围、用途说明，并按批次归档管理，便于后续应用集成与溯源。中药鉴别数字化项目可形成以下类型的数据交付：

- 图像数据集；
- JSON、XML 等结构化格式的标注文件；
- 模型文件；
- 性能评估报告；
- 知识库（如图谱、标签库）；
- 软件。

附录 A  
(资料性)  
菊花（贡菊）性状鉴别数字化示例

A.1 图像数据采集

A.1.1 样品

本次菊花（贡菊）样品共收集 3 批。

A.1.2 采集设备

本次图像数据采集使用 1 台数码相机（佳能 EOS 5D Mark III）、16 台手机。手机型号见表 A.1。

表 A.1 手机型号

序号	手机型号	序号	手机型号
1	荣耀 30S	8	荣耀×40GT
2	iPhone 11	9	Redmi K50 pro
3	OPPO reno5K	10	华为 nova 8
4	红米 note12turbo	11	iPhone 12
5	Oppo Reno12	12	华为 nova12 pro
6	iQOO neo5	13	红米 k50
7	真我 GT Neo 闪速版		

A.1.3 拍摄条件

本次图像拍摄条件见表 A.2。

表 A.2 拍摄条件

条件	内容
背景	白色、桌面、地面、手掌
光照	摄影棚补光状态、室内灯光、室外自然光线
角度	正面、侧面、底面

A.1.4 图像数据采集数量

每一个品种图像应不少于 500 张。本次共采集菊花（贡菊）701 张图片，其中 201 张较为模糊，数据单独存储。

A.1.5 菊花（贡菊）示例图

采集的菊花（贡菊）性状图像见图 A.1～A.6。



图 A.1 正面

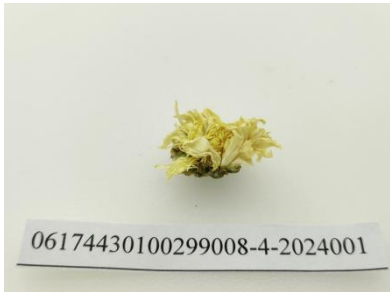


图 A.2 侧面

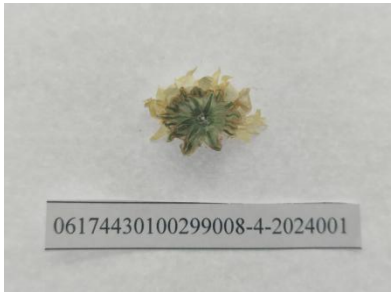


图 A.3 底面

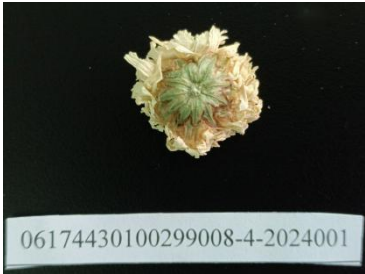


图 A.4 实验台



图 A.5 地面



图 A.6 手掌

A.2 图像数据命名与分类

A.2.1 命名原则

图片数据命名格式：中药编码—批号—拍摄角度—流水号。编码规则应符合 GB/T 31774 的要求。  
示例如下：

菊花（贡菊）第一批正面第一张图：0617440100299008-2024001-Z-001

菊花（贡菊）第二批底面第三张图：0617440100299008-2024002-D-003

A.2.2 图像分类

将菊花（贡菊）图像数据按光照条件分为四类，数量见表 A.3。

表 A.3 四类图片数量

单位为张

摄影棚补光状态	室内光源	室外自然光线	模糊
100	250	150	201

A.3 图像预处理

A.3.1 数据集划分

按照 7:1:2 比例将数据划分为训练集、验证集和测试集，并对训练集数据采取系列数据增强策略。

#### A. 3. 2 随机转置

50%的训练图像宽高交换进行转置操作。

#### A. 3. 3 随机水平、垂直翻转

每张训练图像以 50%概率进行左右、上下镜像变换。

#### A. 3. 4 随机平移、缩放、旋转变换

每张训练图像以 50%概率进行平移、缩放、旋转组合变换。

#### A. 3. 5 随机调整亮度对比度

每张图像以 50%概率调整亮度和对比度，亮度调整在 $-10\%$ 到 $+10\%$ 之间波动，随机对比度调整也在 $-10\%$ 到 $+10\%$ 之间波动。

#### A. 3. 6 应用标签平滑

采取标签平滑的思想并搭配软目标损失函数，提高最终分类精度。

#### A. 3. 7 图像尺寸统一

待训练的数据输入模型前，统一图像的输出尺寸为 $224 \times 224$ 像素大小。

### A. 4 菊花（贡菊）性状鉴别模型构建与性能验证

#### A. 4. 1 模型结构选择

本次研究使用残差网络 50 层（ResNet-50）深度学习模型。其主要特点是通过引入残差连接（residual connection）来解决深度神经网络在训练过程中遇到的梯度消失和退化问题。ResNet-50 网络包含 50 层，通过堆叠多个残差块，每个残差块包含 $3 \times 3$ 的卷积层，并通过跳跃连接将输入直接加到输出上，从而有效缓解了深度网络训练中的困难。相关模型结构图见图 A. 7。

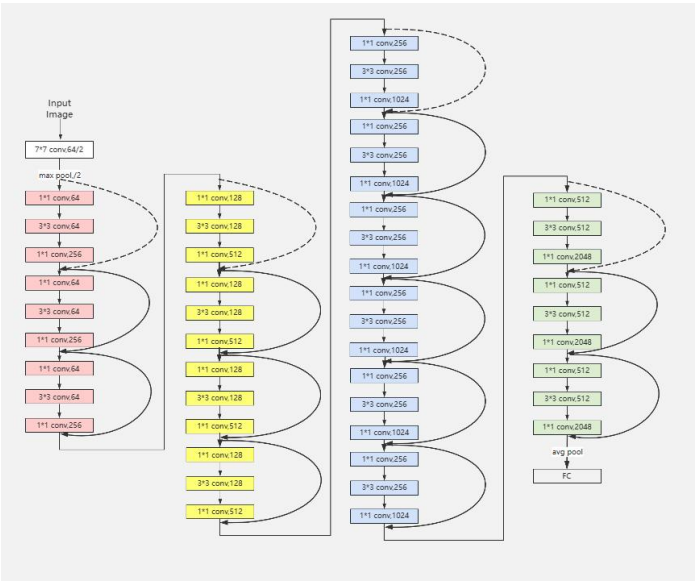


图 A.7 ResNet-50 模型总览图

A. 4. 2 模型训练

A. 4. 2. 1 输入与初始处理

输入的训练图像进入网络。它会先经过一个 $7\times 7$ 的卷积层，这个卷积层有64个滤波器，步长(stride)为2。这一步会初步提取图像的低级特征，并将特征图的空间尺寸（高和宽）减半，通道数变为64。紧接着，特征图会通过一个步长为2的最大池化层，这会进一步将空间尺寸减半，同时保留最显著的特征。

A. 4. 2. 2 第一阶段残差块（图 A.7 粉色区域）

A. 4. 2. 2. 1 经过初始处理的特征图进入残差网络的第一个主要阶段。这个阶段包含3个残差块（residual block）。这些块采用了“瓶颈”（bottleneck）设计：

- 先用 $1\times 1$ 卷积降维（例如第一个块从输入通道数降到64）；
- 然后用 $3\times 3$ 卷积进行特征提取（通道数保持64）；
- 最后用 $1\times 1$ 卷积升维（通道数增加到256）。

A. 4. 2. 2. 2 关键的残差链接：每个块的输入会通过一条“捷径”直接加到该块卷积层处理后的输出上。图 A.7 中的虚线残差连接通常表示输入和输出的维度（如通道数或空间尺寸）不匹配，需要通过一个额外的 $1\times 1$ 卷积（通常带步长）来调整维度后再相加。实线连接则表示维度匹配，直接相加。这个阶段主要学习更复杂的特征，输出的特征图通道数为256，空间尺寸与进入此阶段时相同。

A. 4. 2. 3 第二阶段残差块（图 A.7 黄色区域）

来自第一阶段的输出特征图进入第二阶段，包含4个残差块：

- 此阶段的第一个残差块通常会将空间尺寸减半（通过在 $3\times 3$ 卷积或第一个 $1\times 1$ 卷积中使用步长2实现），并将通道数翻倍。瓶颈结构变为： $1\times 1$ 卷积（128通道）， $3\times 3$ 卷积（128通道）， $1\times 1$ 卷积（512通道）；
- 同样存在残差连接，第一个块由于维度变化（空间尺寸减半，通道数从256增至512）使用虚线连接进行维度匹配；
- 后续的3个块保持空间尺寸和512的通道数，使用实线连接。此阶段输出特征图通道数为512，空间尺寸是上一阶段的一半。

#### A. 4. 2. 4 第三阶段残差块（图 A. 7 蓝色区域）

过程类似第二阶段，包含 6 个残差块：

- 第一个块再次将空间尺寸减半，通道数翻倍至 1024（瓶颈结构变为 256→256→1024 通道），需要虚线连接进行维度匹配；
- 后续 5 个块保持尺寸和 1024 通道数，使用实线连接。此阶段输出特征图通道数为 1024，空间尺寸再减半。

#### A. 4. 2. 5 第四阶段残差块（图 A. 7 绿色区域）

这是最后一个卷积阶段，包含 3 个残差块：

- 第一个块将空间尺寸减半，通道数翻倍至 2048（瓶颈结构变为 512→512→2048 通道）。需要虚线连接；
- 后续 2 个块保持尺寸和 2048 通道数，使用实线连接。此阶段输出特征图通道数为 2048，空间尺寸是整个网络中最小的（相对于输入图像，通常是 1/32）。

#### A. 4. 2. 6 全局平均池化与全连接层

最后阶段的输出特征图（尺寸高×宽×2048）经过一个全局平均池化层。这一层会将每个通道的高×宽特征图计算平均值，得到一个 1×1×2048 的特征向量（或者说一个长度为 2048 的向量）。这个向量随后被送入一个全连接层，该层将 2048 维的特征映射到最终的类别数量，输出每个类别的预测概率或得分。

#### A. 4. 3 模型评估

本次研究使用精确率和召回率评价效果。菊花(贡菊)性状图像识别的精确率 99. 29%，召回率 99. 29%。

附录 B  
(资料性)  
菊花显微鉴别数字化示例

B.1 图像数据采集

B.1.1 样品

本次菊花显微结构样品共收集 14 批。

B.1.2 采集设备

本次显微图像数据采集使用 2 台生物显微镜，分别是奥林巴斯 BX53 和莱卡 DM2500。

B.1.3 拍摄条件

分别在两台显微镜的日光视野和偏光镜视野下观察显微特征。

B.1.4 显微制片

取菊花粉末适量，放入载玻片，加入水合氯醛试液，进行加热透明化处理，再加入稀甘油封片进行观察。

B.1.5 图像数据采集数量

本次共采集菊花显微图像 345 张。

B.1.6 菊花显微特征示例图

采集的菊花显微特征图像见图 B.1~B.5。



图 B.1 T 形毛



图 B.2 腺毛



图 B.3 花粉粒

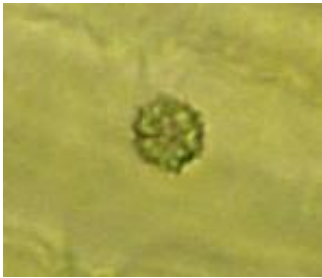


图 B.4 草酸钙簇晶



图 B.5 草酸钙簇晶（偏光）

B.2 图像数据命名与分类

B.2.1 命名原则

图片数据命名格式：中药编码—批号—显微特征—流水号。编码规则应符合 GB/T 31774 的要求。  
示例如下：

菊花第一批腺毛第一张图：0617440100299008-2024001-XM-001

菊花第二批草酸钙簇晶第三张图：0617440100299008-2024002-CJ-003

B.2.2 图像分类

将菊花图像数据按显微特征分为五类，数量见表 B.1。

表 B.1 五类显微特征的图片数量

单位为张

T 形毛	腺毛	花粉粒	草酸钙结晶	草酸钙结晶（偏光）
56	56	62	91	80

B.3 图像预处理

B.3.1 数据集划分

按照 7:1:2 比例将数据划分为训练集、验证集和测试集，并对训练集数据采取系列数据增强策略。

B.3.2 随机转置

50%的训练图像宽高交换进行转置操作。

B.3.3 随机水平、垂直翻转

每张训练图像以 50%概率进行左右、上下镜像变换。

B.3.4 随机平移、缩放、旋转变换

每张训练图像以 50%概率进行平移、缩放、旋转组合变换。

B.3.5 随机调整亮度对比度

每张图像以 50%概率调整亮度和对比度，亮度调整在 -10%到 +10%之间波动，随机对比度调整也在 -10%到 +10%之间波动。



B.3.6 应用标签平滑

采取标签平滑的思想并搭配软目标损失函数，提高最终分类精度。

B.3.7 图像尺寸统一

待训练的数据输入模型前，统一图像的输出尺寸为 224×224 像素大小。

B.4 菊花显微鉴别模型构建与性能验证

B.4.1 模型结构选择

相较于菊花性状分类研究，为提高分类准确率，菊花显微结构分类模型融合若干分类模型，通过最终不同模型预测类别的加权融合输出最终结果。具体使用了 ResNet-34、ResNet-50 和稠密连接网络-161 层（DenseNet-161）三种分类任务模型。ResNet-50 模型已在附录 A.4 中进行了详细解释，ResNet-34 相比而言只是减少了残差块数量，整体架构相似。对比其他模型，DenseNet 最大的特点是“密集连接”：每一层都与前面所有层直接相连，从而增强了特征复用、缓解了梯度消失，并减少了参数数量。密集块相关结构图见图 B.6。

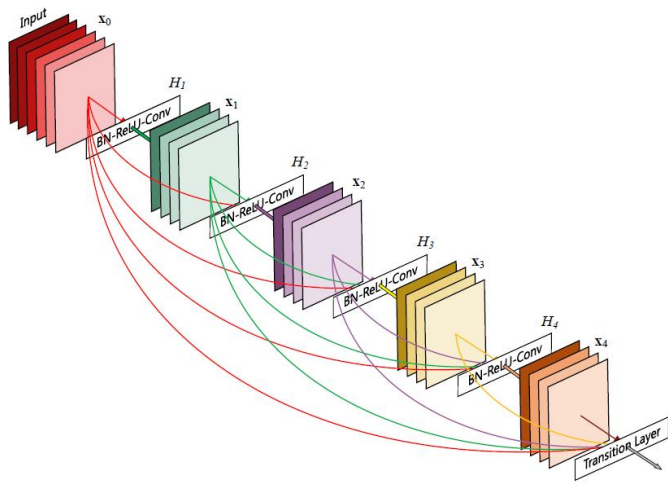


图 B.6 密集块结构图

图 B.6 表示一个增长率为 4，包含 5 层深的密集块，包括了四层卷积层和一层过渡层。针对每一层的输出，都会连接到其之后的所有层作为输入，从而丰富了输入特征，同时缓解了梯度消失的风险。DenseNet-161 包括了四块密集块，层数分别是 6、12、32、32。在每一个密集块之间穿插过渡层用以下采样与压缩通道。每一个密集块的增长率  $k$  均为 32，即每一层卷积层输出特征图通道数为 32。

B.4.2 模型训练

B.4.2.1 输入与初始处理

图像被加载并进行预处理后，进行标准化（如减去 ImageNet 数据集的均值，再除以标准差）。这使得图像数据符合模型的训练分布。预处理后的  $224 \times 224 \times 3$  图像首先通过一个  $7 \times 7$  的卷积层，该层有 64 个滤波器，步长为 2。输出的特征图尺寸变为  $112 \times 112 \times 64$ 。接着，这个  $112 \times 112 \times 64$  的特征图通过一个  $3 \times 3$  的最大池化层，步长为 2。空间尺寸再次减半，输出变为  $56 \times 56 \times 64$ 。作为第一个密集块的输入。

#### B.4.2.2 模型训练流程

B.4.2.2.1 经过初始处理的特征图进入 DenseNet 的第一个密集块。这个阶段包含 6 个卷积层，具体如下：

- 第 1 层：输入是  $56 \times 56 \times 64$  的特征图。经过“批归一化 (batch normalization) → ReLU 激活 →  $1 \times 1$  卷积 → 批归一化 → ReLU 激活 →  $3 \times 3$  卷积”的处理后，产生  $k=32$  个新的特征图。然后，这 32 个新特征图与输入的 64 个特征图进行拼接，形成  $56 \times 56 \times (64 + 32) = 56 \times 56 \times 96$  的输出；
- 第 2 层：输入是上一层输出的  $56 \times 56 \times 96$  特征图。它同样产生 32 个新特征图，并与输入的 96 个特征图拼接，形成  $56 \times 56 \times (96 + 32) = 56 \times 56 \times 128$  的输出。

以此类推，直到第 6 层。第 6 层的输入通道数为  $64 + 5 \times 32 = 224$ 。经过 6 层后，最终输出的特征图通道数为  $64 + 6 \times 32 = 256$ 。尺寸为  $56 \times 56 \times 256$ 。

B.4.2.2.2 之后特征图首先通过一个  $1 \times 1$  的卷积层。该层的滤波器数量是输入通道数的一半（压缩因子=0.5），即  $256 \times 0.5 = 128$ 。输出变为  $56 \times 56 \times 128$ 。然后，通过一个  $2 \times 2$  的平均池化层，步长为 2，将空间尺寸减半。输出  $28 \times 28 \times 128$  的特征图，准备进入第二个密集块，之后重复“密集块→过渡层”的模式，具体如下：

- 密集块 2（12 层）：输入  $28 \times 28 \times 128$ ，输出通道为  $128 + 12 \times 32 = 512$ 。输出尺寸为  $28 \times 28 \times 512$ ；
- 过渡层 2：输入  $28 \times 28 \times 512$ ，压缩并下采样后，输出  $14 \times 14 \times 256$ ；
- 密集块 3（32 层）：输入  $14 \times 14 \times 256$ ，输出通道为  $256 + 32 \times 32 = 1280$ 。输出尺寸为  $14 \times 14 \times 1280$ ；
- 过渡层 3：输入  $14 \times 14 \times 1280$ ，压缩并下采样后，输出  $7 \times 7 \times 640$ ；
- 密集块 4（32 层）：输入  $7 \times 7 \times 640$ ，输出通道为  $640 + 32 \times 32 = 1664$ 。这是最后一个密集块，不再有过渡层；
- 最终特征图： $7 \times 7 \times 1664$ 。这个高维张量包含了从低级到高级的丰富语义信息。

#### B.4.2.3 全局平均池化与全连接层

最后阶段的输出特征图（尺寸  $7 \times 7 \times 1664$ ）经过一个全局平均池化层。这一层会将每个通道的  $7 \times 7$  特征图计算平均值，得到一个  $1 \times 1 \times 1664$  的特征向量（或者说一个长度为 1664 的向量）。这个向量随后被送入一个全连接层，该层将 1664 维的特征映射到最终的类别数量，输出每个类别的预测概率或得分。

#### B.4.3 模型评估

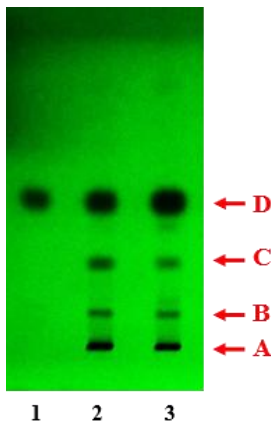
本次研究使用精确率和召回率评价效果。菊花显微特征图像识别的精确率与召回率均在 95% 以上。

附录 C  
(资料性)  
肉桂薄层色谱鉴别数字化示例

C.1 肉桂薄层色谱图像采集

肉桂薄层鉴别按照《中华人民共和国药典》（2020 年版）一部中肉桂各论描述的薄层鉴别方法开展试验。

取肉桂粉末 0.5 g，加乙醇 10 mL，冷浸 20 分钟，时时振摇，滤过，取滤液作为样品溶液。另取桂皮醛对照品，加乙醇制成每 1 mL 含 1 μL 的溶液，作为对照品溶液。吸取供试品溶液 5 μL、对照品溶液 2 μL，点于硅胶 G 薄层板上，以石油醚（60~90℃）—乙酸乙酯（17：3）为展开剂，展开，取出，晾干，喷以二硝基苯肼乙醇试液，254 nm 下检视，拍照，得到薄层色谱图（图 C.1）。



标引序号说明：  
1——桂皮醛对照品条带  
2——肉桂样品 1 条带  
3——肉桂样品 2 条带

图 C.1 肉桂薄层色谱图示意图

按照上述方法检测，收集不同硅胶薄层层析板（默克股份两合公司、青岛海洋化工有限公司），不同温度（24℃、50℃），不同相对湿度（32%、59%、88%）的肉桂薄层色谱图。

C.2 肉桂薄层色谱图像预处理

C.2.1 肉桂薄层色谱图命名

根据肉桂药材的来源、批次、薄层色谱条件（薄层板、温度、湿度）等信息对肉桂薄层色谱图进行命名。

C.2.2 肉桂薄层色谱图预处理

薄层色谱图多为多批次合并拍摄，以不破坏图像关键特征为前提，可对肉桂薄层色谱图进行裁剪与居中处理，形成一批次样本为一图像的数据集。

### C.2.3 肉桂薄层色谱图复核

对所有已命名的薄层色谱图进行复核，确保基本信息的准确性、完整性和一致性。记录图像数据复核的结果、修改记录等关键信息。

### C.2.4 肉桂薄层色谱图特征提取

采用 TLC Measure 软件采集各特征斑点在颜色空间体系 RGB (R/G/B)、HSB (H/S/B) 和 CIE-Lab (L/a/b) 通道的校准数值以及特征斑点的间距值，用于构建薄层色谱特征斑点颜色与位置的数字化模型。

## C.3 肉桂薄层鉴别数字化模型构建与性能验证

### C.3.1 数据集划分

将肉桂薄层色谱图谱划分为建立方法用肉桂样品 54 批（训练集），验证方法用肉桂样品 18 批（验证集），测试方法用肉桂样品 17 批（测试集），其中训练集涵盖各种硅胶 G 板、各个温度及各种相对湿度。

### C.3.2 模型训练

#### C.3.2.1 斑点有无判断模型的建立

选择图 C.1 中 B、C、D 斑点为特征斑点，其  $R_f$  值分别为 0.11、0.27、0.47。基于训练集特征斑点颜色空间体系通道的校准数值，筛选对肉桂薄层色谱图中强斑点（明显可见）、弱斑点（隐约可见）和缺失斑点的区分效果最佳的色彩空间体系通道，并以存在特征斑点的最小通道值作为分析阈值，拟定肉桂薄层色谱 3 个特征斑点的色调（H 值）应在 120~129 范围内，在 HSB 体系亮度（B 值）应大于 2.8，判定为存在斑点。

#### C.3.2.2 间距比判断模型的建立

在肉桂薄层色谱图原点标注为 A，特征斑点分别为 B、C、D。沿溶剂展开方向，计算 AC 与 BD 的距离分别为 3.52、4.69，即 AC 距离 < BD 距离，将原点 A 加入作为一个特征斑点进行分组，即斑点 A、B、C 为第一组，斑点 B、C、D 为第二组。

在第一组中测量斑点 C 分别与斑点 B 和斑点 A 的距离 CB 和 CA，计算最小距离 CB 与最大距离 CA 之间的比值，记为  $RP_1$ ，以该间距比  $RP_1$  为评价指标，根据训练集各特征斑点组的间距比  $RP_1$ ，建立  $RP_1$  的评价标准范围为 0.54~0.71。

在第二组中测量斑点 B 分别与斑点 C 和斑点 D 之间的距离 BC 和 BD，计算最小距离 BC 与最大距离 BD 之间的比值，记为间距比  $RP_2$ ，以该  $RP_2$  为评价指标，根据训练集各特征斑点组的  $RP_2$ ，建立  $RP_2$  的评价标准范围为 0.51~0.59。

### C.3.3 模型验证

C.3.3.1 在斑点有无判断模型中，肉桂薄层色谱验证集在 HSB 颜色体系 B 通道中，强斑点、弱斑点和缺失斑点均位于相应的拟定范围之内，所有特征斑点全部判断正确，判定准确率为 100%。

C.3.3.2 在间距比判断模型中，肉桂薄层色谱验证集第一组的  $RP_f$  值均在拟定评价标准范围，但在第二组中，有两批样品的  $RP_f$  值均为 0.49，在拟定评价标准范围之外，溯源样品图谱后发现这两批样品的薄层色谱图中斑点 B 缺失，判断为不合格样品，需重新进行实验，进而反证肉桂薄层色谱数字化评价方法具有高度可行性。

#### C.3.4 模型评估

计算肉桂薄层色谱图中第一组和第二组特征斑点  $RP_f$  值的标准偏差，分别为 0.07 和 0.04，小于各组特征斑点  $RP_f$  值的标准偏差，判断模型性能良好。

## 参 考 文 献

- [1] GB/T 31774 中药编码规则及编码
- [2] 国家药典委员会. 中华人民共和国药典（2020 年版）一部[M]. 北京：中国医药科技出版社，2020