《名家专栏》：利用机器学习解码复杂光谱：化学分析中光谱解混技术的研究进展

第四期：拉曼光谱解混的应用案例与实验分析

除第三期介绍的高光谱解混以外，在拉曼光谱中，混合信号的解析同样关键，且面临不同的物理约束和噪声特性。最后一篇将转向拉曼光谱解混的应用案例与实验分析。并且在最后总结概括其他各类技术的常见问题、经典方法等，并且做出展望与挑战。

6.拉曼光谱解混的应用案例与实验分析

拉曼光谱解混技术在医学影像分析、工业检测与质量控制中的应用，为这两个领域的科研与生产提供了强大的技术支撑。通过解混技术，可从复杂的光谱数据中提取关键信息，提升疾病诊断的准确率与生产过程的质量控制水平。

6.1 医学影像分析

拉曼光谱解混技术在医学影像分析中的应用，涵盖脑肿瘤分析、药物分析、阿尔茨海默病研究与皮肤癌分析等领域。通过对复杂生物样品的解混，拉曼光谱可揭示疾病的早期分子变化与病理特征，为疾病的早期诊断、病情监测与个性化治疗提供有力支撑[4, 60, 61, 224]。但这些应用同样面临光谱信号重叠、数据噪声、信号解析复杂等挑战。

肿瘤分析面临的核心问题是组织异质性[1]。脑肿瘤组织的异质性，表现为不同区域的细胞类型、肿瘤分化程度、肿瘤微环境存在差异[5]。通过将高分辨率拉曼成像与 ICA 解混模型相结合，可获取肿瘤的精细显微分布信息，实现肿瘤组织与正常脑组织的区分。Krafft 等人对 25 例人类胶质瘤样本开展拉曼成像，通过特定光谱特征的分析，成功将肿瘤细胞密度与组织病理恶性分级相关联[5]。此外，该团队还对人类膀胱切除样本进行拉曼成像，采集了 5000 个样本，训练支持向量机分类器区分癌变与正常组织[4]，术中诊断的灵敏度达 98.2%，特异度达 96.5%，定位误差小于 200μm。 Li 与 Wang 提出了一种基于拉曼光谱的稀疏混合丰度估计模型，用于胶质瘤边界的精准判定。该团队通过顶点成分分析，从正常脑组织与胶质瘤组织中提取代表性拉曼光谱，构建了可适配同一物质光谱变异性的端

北京卓立汉光仪器有限公司 电话: 010 56370168 邮箱: info@zolix.com.cn
www.zolix.com.cn 北京市通州区金桥产业基地联东U谷中试区68B
最终解释权归北京卓立汉光仪器有限公司所有

元库，共采集了 136 例正常脑组织样本、148 例胶质瘤组织样本与 112 例边界组织样本。与传统算法（FCLS、KFCLS）相比，该模型的均方误差（MSE）展现出最低的平均绝对误差，在合成光谱测试中表现出更优异的性能[1]。研究证实，基于拉曼光谱解混的空间分布图，可有效反映肿瘤异质性，机器学习模型可在短时间内输出组织分类结果，为术中边界评估提供分子层面的证据。

药物分析中拉曼光谱解混面临的主要问题是光谱重叠[6]。药物通常由多种活性成分、辅料与其他化学物质构成，不同组分的拉曼光谱信号可能存在相似性或重叠，导致解混过程中难以有效区分单个组分。Boiret 等人利用 ICA，成功从药物拉曼成像数据中分离出活性药物成分、两种辅料与包衣层的纯光谱及空间分布图，清晰展示了各组分在片剂中的定位。Coic 等人对复方片剂开展拉曼成像，以 1 μm 步长扫描 10×10 mm 的区域[6]. 单个样本生成 10 万个像素，光谱分辨率达 4 cm^{-1}，对活性成分的定量误差小于 1.5%，对辅料分布的可视化精度达 95%。这类方法可检测微米级的组分分布不均或微量杂质，为药物研发与生产过程的质量控制提供了高分辨率的分子成像工具[7].

阿尔茨海默病研究面临的核心问题是光谱相似性。阿尔茨海默病的早期诊断难度极大，因为其病理特征与正常脑组织的分子组成可能高度相似。Fonseca 等人对阿尔茨海默病双转基因小鼠模型的脑切片开展拉曼成像，并进行统计解混分析，每个样本分析 1024 个光谱点，总数据量达 15 GB。研究结果成功生成了表征 Aβ斑块分布的图谱，与传统组织学染色识别的斑块位置高度一致，斑块检测的曲线下面积（AUC）达 0.97，且可在组织病理确诊前 6 个月实现检测。这一结果证实，拉曼解混技术可特异性识别并定位脑组织中的淀粉样斑块，为无标记病理学研究提供了全新方法[225]。

皮肤癌研究与诊断面临的主要问题是组织复杂性[226]。皮肤组织是由角质层、表皮、真皮与皮下组织构成的多层结构，每一层的组分与理化特性均不相同，增加了拉曼光谱信号的复杂度。Piredda 等人对 HaCaT 与 SCC-13 细胞开展亚细胞级拉曼成像，重点聚焦核酸与色氨酸的信号[3]。共采集 50 个样本，每个样本包含 10000 个光谱点。光谱特征分析结果显示，癌细胞细胞核区域的核酸信号强度显著高于正常细胞，色氨酸的拉曼峰形也存在可区分的差异。基于这些分子指纹，癌细胞识别的特异度达 99%，表皮与真皮层的区分精度达 92%。此外，Hedegaard 等人开发的定量多页分析方法，为处理复杂的生物医学拉曼成像数据集提供了稳健的框架[60]。

6.2 工业检测与质量控制

拉曼光谱在工业检测与质量控制中的应用，涵盖薄膜材料分析、矿物复合混合物检测、爆炸物检测与气体成分分析等诸多领域，每个领域都面临着光谱复杂、低浓度检测等特定挑战[16, 68, 84, 208, 227, 228].

北京卓立汉光仪器有限公司 电话: 010 56370168 邮箱: info@zolix.com.cn
www.zolix.com.cn 北京市通州区金桥产业基地联东U谷中试区68B
最终解释权归北京卓立汉光仪器有限公司所有

薄膜材料检测是拉曼光谱在电子、光学、半导体等领域广泛应用的重要方向，其优势在于可检测薄膜的厚度、组成、晶格结构与应力[21]。但在实际应用中，薄膜材料检测面临基底干扰、薄膜厚度适配等一系列挑战[20]：薄膜通常沉积在基底材料上，由于基底的拉曼散射信号较强，可能会严重掩盖薄膜的拉曼信号，增加薄膜组成与结构精准分析的难度。Schipporeit 与 Mergel 对沉积在 Si /硅酸盐基底上的 TiO_2 薄膜开展拉曼成像，利用 MCR-ALS 成功分离出锐钛矿相与金红石相的独立光谱组分，并对其空间分布进行了定量分析[20]。Kunc 等人通过差分光谱法，从 SiC 基底的干扰中提取出单层石墨烯的纯拉曼光谱，将信噪比提升了 5 倍以上[21].

矿物复合混合物分析是指利用拉曼光谱识别并量化矿石样品中的多种矿物组分[18, 19]。不同矿物化合物的拉曼光谱有时会出现相似的特征峰，可通过构建完善的矿物标准光谱库，与待测样品光谱进行比对匹配，辅助不同矿物组分的精准识别与定量。Smith 等人对模拟火星矿物样品进行成像，MCR-ALS 技术成功分离出赤铁矿与有机碳的空间分布图，空间分辨率达 2 μm[18]，改进后的 MCR-ALS 模型将解混误差降至 5%以下，大幅提升了矿物定量的精度。

爆炸物检测是安防领域的核心技术，尤其适用于机场安检、边境安防、反恐等场景[229]。拉曼光谱凭借可直接、快速分析样品的特性，被广泛应用于爆炸物检测[230]，但实际应用中面临复杂背景干扰、低浓度 / 痕量检测等一系列挑战。Almeida 等人在纸币表面检测到了 0.5% 的黑索金（RDX），ICA 方法精准提取出了爆炸物的光谱[230]；此外，该团队还在 ATM 爆炸现场的残骸中识别出了梯恩梯（TNT）残留物，其空间分布图与刑事侦查收集的证据高度吻合[229]。

气体成分分析在环境监测、工业过程控制、安全检测等领域具有重要应用[85, 86]。Cai 等人对 6 种油田气体进行在线监测[208]，训练集包含 50 万条光谱，覆盖 0~100% 的浓度梯度，所开发的 CNN-LSTM-AM 混合模型可在 1 秒内完成分析，浓度预测误差小于 1.5%。Han 等人利用数据驱动模型分析天然气，对甲烷/乙烷的定量精度达±0.05 mol%[86]。

7.其他光谱与衍射技术中的光谱解混

尽管本综述此前主要聚焦高光谱与拉曼光谱，但光谱解混挑战广泛存在于各类光谱与衍射技术中。信号重叠、多组分混合物、样品组成复杂等问题，均需要先进的分辨方法解决。为拓宽综述范围，使其成为光谱解混领域的综合参考资料，表 4 对高光谱与拉曼光谱之外的多种主流技术，进行了跨技术总结，概述了各类技术的常见混合问题、经典方法、机器学习方法、代表性应用与核心参考文献。纳入这些技术，凸显了解混问题的普遍性，以及化学计量学与计算解决方案的可迁移性。

表 4. 不同光谱与衍射技术中光谱解混的核心要素

技术	常见混合问题	经典方法	机器学习方法	代表性应用	参考文献

北京卓立汉光仪器有限公司 电话: 010 56370168 邮箱: info@zolix.com.cn
www.zolix.com.cn 北京市通州区金桥产业基地联东U谷中试区68B
最终解释权归北京卓立汉光仪器有限公司所有

傅里叶变换红外光谱（FTIR）	复杂有机/ 生物样品中振动谱带重叠	MCR、化学计量学因子分析	用于解混的监督 / 无监督学习（如用于谱峰分辨的神经网络）	制药、环境样品、生物组织中的多组分混合物分析	231, 232
X 射线光电子能谱（XPS）	不同化学态的谱峰重叠	背景扣除与峰拟合（如 Tougaard 法）	用于光谱解混与材料性能预测的深度学习	材料表面分析、催化、薄膜研究	233, 234
X 射线衍射（XRD）	多相分析中的衍射峰重叠	用于物相定量分析的 Rietveld 精修	用于物相识别与峰解混的机器学习	多晶样品的矿物学、材料科学、晶体学研究	235, 236
质谱（MS）	同位素或碎片峰重叠	同位素模式分辨的解混算法	用于代谢组学与蛋白质组学的聚类与模式识别	蛋白质组学、代谢组学、环境法医学的高通量分析	237, 238
X 射线荧光光谱（XRF）	多组分样品中元素信号重叠与基体效应	基本参数法与经验校正	未明确详述；光谱拟合中机器学习具有应用潜力	地质学、考古学、环境监测中的元素分析	239, 240
核磁共振波谱（NMR）	复杂混合物（尤其是代谢组学）中的信号重叠	多维 NMR 与光谱拟合	用于自动化归属与解混的机器学习	生物体液中的代谢物识别、药物研发	241, 242
紫外 - 可见吸收光谱（UV-vis）	混合物中宽而重叠的吸收带	因子分析与多元校正	用于定量解混的神经网络	化学、生物化学、环境传感中的定量分析	243

北京卓立汉光仪器有限公司
www.zolix.com.cn
电话: 010 56370168 邮箱: info@zolix.com.cn
北京市通州区金桥产业基地联东U谷中试区68B
最终解释权归北京卓立汉光仪器有限公司所有

8.挑战与未来展望

光谱解混是混合像素分析的核心过程，可实现光谱特征与丰度的提取[244]。随着机器学习技术的飞速发展，其在光谱解混中的应用已日趋成熟，但在算法层面（模型泛化、高维数据处理、算法优化）与科研生态层面（数据集共享、模型可复现性），仍面临着重大挑战。

在基于机器学习的光谱解混中，模型的泛化能力与鲁棒性，是决定算法实际应用价值的核心因素[48]。但光谱数据的复杂性与真实场景的多样性，给这两个方面带来了巨大挑战，同时也推动了相关技术的创新与发展。不同传感器、不同地理区域的光谱数据分布差异显著，导致单一模型难以泛化到新场景，可通过对比学习、掩码自编码器等技术，从未标记数据中提取鲁棒特征，降低对标记数据集的依赖[245-247]。 实际采集的光谱数据，往往会受到传感器噪声、大气散射、遮挡等因素的影响，导致光谱曲线发生畸变。可通过设计噪声感知函数、加入自适应正则化项，缓解异常值对模型训练的影响。此外，光谱特征会随时间或环境变化发生动态改变，静态模型难以实现持续适配[248, 249]。，可通过元学习框架，让模型在少量样本的情况下，快速适配新的噪声模式或动态环境。

高维复杂光谱数据的处理能力，直接影响解混的精度与效率[250]。光谱数据通常包含数百个波段，真实场景中地物的混合模式复杂，对算法提出了更高要求。高光谱数据的高维特性会导致特征空间急剧膨胀，使传统算法面临计算效率低、内存占用过大的问题，可通过注意力机制动态选择关键波段，降低冗余度与噪声干扰[251-253]。像素内的端元间可能发生复杂的相互作用，导致混合光谱与线性叠加假设产生显著偏差，可通过融合局部像素级特征与全局场景上下文信息，提升对微观混合效应的捕捉能力[254]。高光谱数据与多光谱、激光雷达（LiDAR）、热红外数据的时空分辨率、光谱范围差异显著，如何有效融合多源信息提升解混精度，仍是一项挑战，可设计多分支网络，融合高光谱、LiDAR高程数据与多光谱时间序列数据，通过交叉注意力机制实现特征互补[255-257]。

算法优化与改进，是提升解混精度、效率与实用性的核心驱动力。但随着模型复杂度的提升与应用场景的多元化，算法设计面临计算效率、参数敏感性、可解释性等诸多挑战。深度学习模型需要处理高维光谱数据与复杂的空间关联，导致训练与推理时间大幅增加，往往无法满足实时性需求。针对这一问题，可通过知识蒸馏将复杂模型的知识迁移至轻量化网络，或通过模型剪枝、量化等技术降低计算开销[258, 259]。模型性能高度依赖超参数，人工调参不仅耗时，还易陷入局部最优，可通过强化学习或进化算法实现高效网络结构的自动化设计，大幅降低人工试错成本[260]。此外，深度学习模型固有的非线性映射带来了可解释性挑战，导致解混结果的可信度下降，在军事应用、灾害应急响应等关键领域尤为突出。为提升可解释性，可引入注意力机制可视化模型识别的关键波段与区域，或通过LIME、SHAP 等工具对丰度估计结果进行解释[261]。

除方法学创新外，机器学习驱动的光谱解混未来研究，还必须解决实际应用挑战，推动技术的广泛落地与行业协作。数据集共享的核心挑战，在于标准化、可公开获取的高光谱与拉曼数据集稀缺，

北京卓立汉光仪器有限公司 电话: 010 56370168 邮箱: info@zolix.com.cn
www.zolix.com.cn 北京市通州区金桥产业基地联东U谷中试区68B
最终解释权归北京卓立汉光仪器有限公司所有

严重阻碍了基准测试工作与跨研究对比。可借鉴 Kaggle、Zenodo 等平台的经验，构建带有端元与丰度标注的开源数据库，为遥感、生物医学分析等各类应用提供可复现的实验基础[262, 263]。模型可复现性是另一项核心挑战。深度学习架构的“黑箱”特性，及其对超参数的高度敏感性，进一步加剧了这一问题。如果没有标准化的训练工作流、代码与计算环境报告，研究结果的复现将极为困难，可能会损害光谱解混技术在环境监测、临床诊断等高风险应用中的可信度。为解决这一问题，研究人员应践行开源理念，包括在 GitHub 等平台共享代码，利用 Docker 等容器化工具保证环境一致性，并在论文中加入可复现性清单[157]。 将这些实际考量与自动化机器学习等新兴趋势相结合，不仅能提升研究透明度，还能通过构建协作生态，加速技术创新。

机器学习在光谱解混领域展现出巨大潜力，但在提升模型泛化能力、处理高维数据、优化算法、构建完善的科研生态等方面，仍面临诸多挑战。未来，随着数据增强、深度学习、多源数据融合、自动化机器学习等技术的发展，光谱解混技术的精度与效率将得到进一步提升。

作者简介

胡波，西安电子科技大学生命科学技术学院教授、博士生导师，西安智能精准诊疗国际科技合作基地负责人。主要研究方向为基于人工智能、微流控芯片和光学检测的单细胞与单分子智能检测技术开发。在 Advanced Science、ACS Sensors、Biosensors and Bioelectronics 等期刊发表论文多篇。

免责说明

北京卓立汉光仪器有限公司公众号所发布内容（含图片）来源于原作者提供或原文授权转载。文章版权、数据及所述观点归原作者原出处所有，北京卓立汉光仪器有限公司发布及转载目的在于传递更多信息及用于网络分享。

如果您认为本文存在侵权之处，请与我们联系，会第一时间及时处理。我们力求数据严谨准确，如有任何疑问，敬请读者不吝赐教。我们也热忱欢迎您投稿并发表您的观点和见解。

参考文献

224. Yi, L.; Ye, Q.; Wang, C.; Hu, Q.; Zhang, S.; Shen, X.; Liang, M.; Li, G.; Dmitriy, K.; Guo, Y.; Yu, Q.; Hu, B., Segment-Weighting Similarity-Based Fragment-Learning Model for Single-Cell Raman Spectral Analysis. *Analytical Chemistry* **2025,**

97, 11734-11744.

225. Fonseca, E. A.; Lafetá, L.; Cunha, R.; Miranda, H.; Campos, J.; Medeiros, H. G.; Romano-Silva, M. A.; Silva, R. A.; Barbosa, A. S.; Vieira, R. P.; Malard, L. M.; Jorio, A., A fingerprint of amyloid plaques in a bitransgenic animal model of Alzheimer's disease obtained by statistical unmixing analysis of hyperspectral Raman data. *The Analyst* **2019,** *144*, 7049-7056.

226. Wu, M.; Gao, B.; Wei, X., Recent advances in Raman spectroscopy for skin diagnosis. *Journal of Innovative Optical Health Sciences* **2023,** *16*, 2330003.

227. Clément, Y.; Gaubert, A.; Bonhommé, A.; Marote, P.; Mungroo, A.; Paillard, M.; Lantéri, P.; Morell, C., Raman spectroscopy combined with advanced chemometric methods: A new approach for detergent deformulation. *Talanta* **2019,** *195*, 441-446.

228. Maggioni, G. M.; Kocevska, S.; Grover, M. A.; Rousseau, R. W., Analysis of Multicomponent Ionic Mixtures Using Blind Source Separation: A Processing Case Study. *Industrial & Engineering Chemistry Research* **2019,** *58*, 22640-22651.

229. Almeida, M. R.; Logrado, L. P. L.; Zacca, J. J.; Correa, D. N.; Poppi, R. J., Raman hyperspectral imaging in conjunction with independent component analysis as a forensic tool for explosive analysis: The case of an ATM explosion. *Talanta* **2017,** *174*, 628-632.

230. Almeida, M. R.; Correa, D. N.; Zacca, J. J.; Logrado, L. P. L.; Poppi, R. J., Detection of explosives on the surface of banknotes by Raman hyperspectral imaging and independent component analysis. *Analytica Chimica Acta* **2015,** *860*, 15-22.

231. Bergner, N.; Romeike, B. F.; Reichart, R.; Kalff, R.; Krafft, C.; Popp, J., Tumor margin identification and prediction of the primary tumor from brain metastases using FTIR imaging and support vector machines. *Analyst* **2013,** *138*, 3983-90.

232. Lattermann, A.; Matthaus, C.; Bergner, N.; Beleites, C.; Romeike, B. F.; Krafft, C.; Brehm, B. R.; Popp, J., Characterization of atherosclerotic plaque depositions by Raman and FTIR imaging. *J Biophotonics* **2013,** *6*, 110-21.

233. Ramstedt, M.; Leone, L.; Persson, P.; Shchukarev, A., Cell wall composition of Bacillus subtilis changes as a function of pH and Zn(2)(+) exposure: insights from cryo-XPS measurements. *Langmuir* **2014,** *30*, 4367-74.

234. Artyushkova, K.; Fulghum, J. E., Multivariate image analysis methods applied to XPS imaging data sets. *Surface and Interface Analysis* **2002,** *33*, 185-195.

235. McAleer, R. J.; Bish, D. L.; Kunk, M. J.; Valley, P. M.; Walsh, G. J.; Wintsch, R. P., Unmixing multiple metamorphic muscovite age populations with powder X-ray diffraction and 40Ar/39Ar analysis. *American Journal of Science* **2021,** *321*, 332-364.

236. Sahoo, M. M.; Kalimuthu, R.; Pv, A.; Porwal, A.; Mathew, S. K., Modelling Spectral Unmixing of Geological Mixtures: An Experimental Study Using Rock Samples. *Remote Sensing* **2023,** *15*, 3300.

237. Verbeeck, N.; Caprioli, R. M.; Van de Plas, R., Unsupervised machine learning for exploratory data analysis in imaging mass spectrometry. *Mass Spectrom Rev* **2020,** *39*, 245-291.

238. Goossens, P.; Lu, C.; Cao, J.; Gijbels, M. J.; Karel, J. M. H.; Wijnands, E.; Claes, B. S. R.; Fazzi, G. E.; Hendriks, T. F. E.; Wouters, K.; Smirnov, E.; van Zandvoort, M. J. M.; Balluff, B.; Cuypers, E.; Donners, M.; Heeren, R. M. A.; Biessen, E. A. L., Integrating multiplex immunofluorescent and mass spectrometry imaging to map myeloid heterogeneity in its metabolic and cellular context. *Cell Metab* **2022,** *34*, 1214-1225 e6.

239. Wang, Q.; Li, F.; Jiang, X.; Wu, S.; Xu, M., On-stream mineral identification of tailing slurries of tungsten via NIR and XRF data fusion measurement techniques. *Anal Methods* **2020,** *12*, 3296-3307.

240. Martins, A.; Albertson, C.; McGlinchey, C.; Dik, J., Piet Mondrian's Broadway Boogie Woogie: non invasive analysis using macro X-ray fluorescence mapping (MA-XRF) and multivariate curve resolution-alternating least square (MCR-ALS). *Heritage Science* **2016,** *4*, 22.

241. Mishra, R.; Marchand, A.; Jacquemmoz, C.; Dumez, J. N., Ultrafast diffusion-based unmixing of (1)H NMR spectra. *Chem Commun (Camb)* **2021,** *57*, 2384-2387.

242. Toumi, I.; Caldarelli, S.; Torrésani, B., A review of blind source separation in NMR spectroscopy. *Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy* **2014,** *81*, 37-64.

北京卓立汉光仪器有限公司 电话: 010 56370168 邮箱: info@zolix.com.cn
www.zolix.com.cn 北京市通州区金桥产业基地联东U谷中试区68B
最终解释权归北京卓立汉光仪器有限公司所有

243. Chen, X.; Zhao, N.; Zhu, W.; Yin, G.; Jia, R.; Yang, R.; Ma, M., A new method for the rapid identification of external water types in rainwater pipeline networks using UV-Vis absorption spectroscopy. *Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc* **2025,** *324*, 124968.

244. Koyun, O. C.; Keser, R. K.; Şahin, S. O.; Bulut, D.; Yorulmaz, M.; Yücesoy, V.; Töreyin, B. U., RamanFormer: A Transformer-Based Quantification Approach for Raman Mixture Components. *ACS Omega* **2024,** *9*, 23241-23251.

245. Williams, J.; Robles-Kelly, A., Spectral Contrastive Clustering. *Pattern Recognition* **2025,** *166*, 111671.

246. Li, B.; Fang, L.; Chen, N.; Kang, J.; Yue, J., Enhancing Hyperspectral Image Classification: Leveraging Unsupervised Information With Guided Group Contrastive Learning. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* **2024,** *62*, 1-17.

247. Huang, L.; Chen, Y.; He, X., Spectral–Spatial Masked Transformer With Supervised and Contrastive Learning for Hyperspectral Image Classification. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* **2023,** *61*, 1-18.

248. Campos-Delgado, D. U.; Nicolás Mendoza-Chavarría, J.; Gutierrez-Navarro, O.; Quintana-Quintana, L.; Leon, R.; Ortega, S.; Fabelo, H.; López, C.; Lejeune, M.; Callico, G. M., Robust and Unified Semi-Supervised Unmixing of Hyperspectral Imaging for Linear and Multilinear Models. *IEEE Access* **2025,** *13*, 53140-53158.

249. Zhu, L.; Wu, J.; Biao, W.; Liao, Y.; Gu, D., SpectralMAE: Spectral Masked Autoencoder for Hyperspectral Remote Sensing Image Reconstruction. *Sensors* **2023,** *23*, 3728.

250. Ashhurst, T. M.; Marsh-Wakefield, F.; Putri, G. H.; Spiteri, A. G.; Shinko, D.; Read, M. N.; Smith, A. L.; King, N. J. C., Integration, exploration, and analysis of high-dimensional single-cell cytometry data using Spectre. *Cytometry Part A* **2021,** *101*, 237-253.

251. Qi, L.; Qin, X.; Gao, F.; Dong, J.; Gao, X., SAWU-Net: Spatial Attention Weighted Unmixing Network for Hyperspectral Images. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters* **2023,** *20*, 1-5.

252. Tao, X.; Koirala, B.; Rasti, B.; Plaza, A.; Scheunders, P., A Spectral-Spatial Attention Network for Hyperspectral Unmixing. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* **2025,** *63*, 1-15.

253. Liu, W.; Chang, C.; Li, J.; Lv, X.; Liu, Y.; Chen, C.; Chen, C., Research on cancer rapid diagnosis technology based on adaptive channel attention mechanism and two-dimensional spectral fusion. *Microchemical Journal* **2025,** *213*, 113840.

254. Xiang, S.; Li, X.; Ding, J.; Chen, S.; Hua, Z., Unidirectional Local-Attention Autoencoder Network for Spectral Variability Unmixing. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* **2024,** *62*, 1-15.

255. Qin, Z.; Peng, Q.; Jin, C.; Xu, J.; Xing, S.; Zhu, P.; Yang, G., Geographically weighted random forest fusing multi-source environmental covariates for spatial prediction of soil heavy metals. *Environmental Pollution* **2025,** *385*, 127135.

256. Qiu, S.; Zhang, P.; Li, S.; Hu, B., Tang dynasty mural restoration algorithms based on generative adversarial networks with multi-source information fusion. *Information Fusion* **2026,** *127*, 103883.

257. Liu, N.; Chen, L.; Liu, C.; Sun, X.; Zhang, S., Non-destructive discrimination of honey origin based on multispectral information fusion technology. *Infrared Physics & Technology* **2024,** *139*, 105327.

258. Feng, K.; Zeng, H.; Zhao, Y.; Kong, S. G.; Bu, Y., Unsupervised Spectral Demosaicing With Lightweight Spectral Attention Networks. *IEEE Transactions on Image Processing* **2024,** *33*, 1655-1669.

259. Jiang, Y.; Sha, H.; Liu, S.; Qin, P. W.; Zhang, Y. B., AutoUnmix: an autoencoder-based spectral unmixing method for multi-color fluorescence microscopy imaging. *Biomedical Optics Express* **2023,** *14*, 4814-4827.

260. Guo, Y.; Wang, Q.; Hu, B.; Qian, X.; Ye, H., Two-Stage Unsupervised Hyperspectral Band Selection Based on Deep Reinforcement Learning. *Remote Sensing* **2025,** *17*, 586.

261. Liu; Karagoz, G.; Meratnia, N., Analyzing the Impact of Data Augmentation on the Explainability of Deep Learning-Based Medical Image Classification. *Machine Learning and Knowledge Extraction* **2024,** *7*, 1.

262. Liu, X.; Jin, M.; Liu, X.; Yang, Z.; Hou, Z.; Ding, X., Quantitative Inversion of Martian Hydrous Minerals Based on LSTM-1DCNN Model. *Remote Sensing* **2024,** *17*, 94.

263. Cerra, D.; Pato, M.; Alonso, K.; Köhler, C.; Schneider, M.; de los Reyes, R.; Carmona, E.; Richter, R.; Kurz, F.;

北京卓立汉光仪器有限公司 电话: 010 56370168 邮箱: info@zolix.com.cn
www.zolix.com.cn 北京市通州区金桥产业基地联东U谷中试区68B

最终解释权归北京卓立汉光仪器有限公司所有

Reinartz, P.; Müller, R., DLR HySU—A Benchmark Dataset for Spectral Unmixing. *Remote Sensing* **2021,** *13*, 2559.

北京卓立汉光仪器有限公司
www.zolix.com.cn
电话: 010 56370168 邮箱: info@zolix.com.cn
北京市通州区金桥产业基地联东U谷中试区68B

最终解释权归北京卓立汉光仪器有限公司所有