

基于图像识别与拉曼光谱联合技术的药品核对系统构建^Δ

王敏¹, 刘海涛¹, 彭竹竹², 刘韶^{1#} (1. 中南大学湘雅医院药学部, 长沙 410005; 2. 中南大学湘雅医院护理部, 长沙 410005)

中图分类号 R95 文献标志码 A 文章编号 1001-0408(2026)10-1341-05

DOI 10.6039/j.issn.1001-0408.2026.10.18



摘要 **目的** 针对住院药房单剂量调剂中药品检测机对“同形异谱”药品存在识别盲区的问题, 构建基于图像识别初筛与拉曼光谱确证的药品双重核对系统。**方法** 建立涵盖296种口服药品的图像和拉曼光谱数据库, 基于余弦相似度算法(判定阈值0.95)进行光谱匹配; 构建“图像特征初筛-拉曼光谱确证”双重核对系统, 采用前后自身对照研究, 在5个临床病区开展应用效果评价。**结果** 构建的双重核对系统对库内药品的平均识别准确率为99.2%, 对“同形异谱”代表性品种可实现100%准确鉴别。试验组(图像识别+拉曼光谱确证核对)单包药品平均核对耗时较对照组(图像识别+人工肉眼实物比对)缩短31.5%~43.3% ($P<0.001$); 护士对试验组操作便捷性、识别效率、核对置信度及心理压力缓解维度的满意度均显著优于对照组 ($P<0.01$)。**结论** “图像特征初筛-拉曼光谱确证”双重核对系统可有效突破传统机器视觉的技术瓶颈, 在保障用药安全的同时能显著提升工作效率和工作人员满意度。

关键词 拉曼光谱; 图像识别; 单剂量分包; 自动化调剂; 药品核对

Construction on medication verification system based on the integration of image recognition and Raman spectroscopy

WANG Min¹, LIU Haitao¹, PENG Zhuzhu², LIU Shao¹ (1. Dept. of Pharmacy, Xiangya Hospital, Central South University, Changsha 410005, China; 2. Dept. of Nursing, Xiangya Hospital, Central South University, Changsha 410005, China)

ABSTRACT **OBJECTIVE** To construct a dual-verification system integrating image pre-screening and Raman spectroscopy for inpatient pharmacy unit-dose dispensing in response to the issue of recognition blind spots for drugs of “same appearance but different spectrum” by drug inspection machines. **METHODS** An image feature and Raman spectroscopy database, covering 296 oral medications, were established. Spectral matching was performed using a cosine similarity algorithm (decision threshold 0.95). A dual-verification system of “image pre-screening and Raman spectroscopy confirmation” was designed, and a self-controlled before-and-after study was conducted across 5 clinical wards. **RESULTS** The system achieved a mean recognition accuracy of 99.2% for all medications in the database, with 100% accurate identification of representative “same-appearance but different-spectrum” drugs. The average verification time per-unit in the experimental group (image recognition+Raman spectroscopy confirmation and verification) was reduced by 31.5%-43.3%, compared with the control group (image recognition+manual visual comparison with actual objects) ($P<0.001$). Nurses' satisfaction scores in the dimensions of operational convenience, identification efficiency, verification confidence, and psychological stress relief in the experimental group were all significantly superior to those of the control group ($P<0.01$). **CONCLUSIONS** The dual-verification system of “image pre-screening and Raman spectroscopy confirmation” effectively overcomes the technical limitations of conventional machine vision. It enhances work efficiency and staff satisfaction while ensuring medication safety.

KEYWORDS Raman spectroscopy; image recognition; unit-dose dispensing; automated dispensing; drug verification

^Δ基金项目 湖南省自然科学基金项目(No.2023JJ60520)

*第一作者 副主任药师, 硕士。研究方向: 药物警戒、安全合理用药。E-mail: wangmin2013100@163.com

#通信作者 主任药师, 博士。研究方向: 药事管理、智能安全合理用药评价、新药开发。电话: 0731-84327455。E-mail: liushao999@csu.edu.cn

近年来, 在国家政策持续推动“智慧药房”建设及“互联网+药学服务”发展的背景下, 医院药品调剂工作的自动化建设已成为药学部门发展的核心方向^[1]。随着自动摆药机技术的不断迭代, 住院药房口服药品已基本

实现单剂量发放。口服单剂量分包系统(unit dose dispensing system, UDDS)通过与医院信息系统(hospital information system, HIS)深度集成,将医嘱信息映射为对应的药品调配指令并自动分包,显著提高了调剂效率与准确性^[2-3]。然而,自动化流程的引入在减轻传统人工操作疲劳的同时,也为调剂环节的质量控制带来了新的挑战。确保分包药品与医嘱指令的“绝对一致”是保障住院患者用药安全的核心任务,但研究显示,单剂量分包环节仍面临药师加药差错、设备串包及物理性破损(如碎药)等潜在风险——尽管多数分包设备具备基础的自检功能,但有报道称机器自检仅能拦截约8.3%的错误^[4],且无法识别如品种混淆、粒数异常等关键逻辑错误^[5]。这给口服单剂量分包药品的准确发放带来隐患,已成为智慧药房建设中的技术瓶颈之一。

为解决这一问题,基于机器视觉的药品检测机(medicine detection machine, MDM)已被广泛应用于药品核对。MDM依赖药品的颜色、形状和尺寸等外部几何特征进行比对。然而,随着医疗机构药品种类的增加,一些不同品种的药品在外观上高度相似(即“同形异谱”现象),使得MDM在处理这些药品时的误报率往往超过95%^[4,6]。此外,图像识别技术无法对药品的内在化学成分进行定性分析,也难以在高风险药品的精准核对环节提供可靠的安全保障。

拉曼光谱分析技术能通过探测药物分子中化学键的振动特征,穿透透明药袋进行非接触、无损的定性鉴定。与传统的图像识别方法相比,拉曼光谱基于药品的内在分子特征,能够有效解决“同形异谱”药品的识别难题^[7]。为解决MDM“同形异谱”药品误报率过高的问题,我院引入拉曼光谱分析技术,通过构建住院药房296种口服药品的图像和拉曼光谱数据库,建立“图像特征初筛-拉曼光谱确证”的双重核对系统,并评估其在拦截药品配方差错、提高核对效率和医护人员核对置信度等方面的临床应用效果,以期为提高口服单剂量分包药品发放准确率、保障患者用药安全提供科学依据。

1 资料与方法

1.1 主要仪器与系统

本研究所涉及的仪器与系统包括Xana-U4001-Plus型全自动单剂量分包机(日本Panasonic公司)、i-Raman Plus BWS475-785S-HT型便携式拉曼光谱仪(美国B&W Tek公司)、HIS及配套的数字化摆药核对管理软件。

1.2 研究对象

选取我院心内科、神经内科等5个每日口服药单剂量分包医嘱总量>100包的临床病区作为研究对象。在

符合业务量标准的病区中,优选医护团队协作意愿强、依从性好的病区,确保临床护士能严格执行核对操作,保障研究数据的质量。

1.3 药品图像和拉曼光谱数据库的构建及应用

1.3.1 图像数据采集

在遮蔽外界光线干扰的受控光照环境下,放置标准比例尺,选取我院住院药房单剂量分包使用的全部296种口服制剂(含裸片、胶囊),使用相机逐一采集药品多角度的高分辨率图像,提取形状、颜色、尺寸、刻痕等关键属性信息,并与摆药机系统内的医嘱编码进行关联映射^[8]。

1.3.2 拉曼光谱采集与预处理

(1)光谱仪参数:将拉曼光谱仪的激光激发功率设定为20%~50%(根据药品热敏感度动态调整),光谱范围为 $175\sim 3\,200\text{ cm}^{-1}$,分辨率为 4.5 cm^{-1} 。

(2)采样方法:为克服药品组分不均的影响,本研究采取“多点采样法”,即单粒药品随机选取3个物理位置点,每个点重复扫描3次,取9次测量的算术平均值作为指纹图谱。

(3)预处理方法:针对药袋材质(聚乙烯/聚对苯二甲酸乙二醇酯复合膜)及药品包衣产生的荧光背景干扰,采用自适应迭代重加权惩罚最小二乘法(airPLS)进行自动基线扣除,并采用Savitzky-Golay(S-G)平滑滤波降低随机噪声,提取纯净的指纹特征峰。将预处理后所得的完整特征谱图录入数据库作为后续参照标准。

1.3.3 拉曼光谱相似度匹配算法的应用

本研究采用基于单位归一化(unit normalization)处理的余弦相似度(cosine similarity)匹配模型,将实时采集的药品拉曼光谱数据与拉曼光谱数据库中的标准谱图转化为高维空间向量,通过计算两向量夹角(θ)的余弦值 $[\cos(\theta)]$ 判定药品种类^[9-10],其具体公式如下:

$$\cos(\theta) = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i \cdot y_i)}{\sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2} \cdot \sqrt{\sum_{i=1}^n y_i^2}}$$

式中, x_i 、 y_i 分别代表实时采集的待测药品和数据库中的标准药品的拉曼光谱中第*i*个拉曼位移(波数)对应的光谱强度值; n 为所有参与计算的拉曼位移点的总数。系统设定自动判定阈值为0.95,相似度分值达标即判定为品种一致。

1.4 拉曼光谱识别效能与稳定性考察

从296种口服药品中,每种品规随机抽取10粒,得到2 960个测试样本。采用双盲实验法,由非建库人员使用拉曼光谱仪对上述样本进行快速检测,再将采集的

测试样本的拉曼光谱与拉曼光谱数据库进行匹配,记录系统输出的余弦相似度值,并与药品实际信息进行校对。识别准确率=系统匹配正确样本数/总验证样本数 $\times 100\%$ 。

同时,为评估环境稳定性,本研究还在不同时间段(8:00—10:00,13:00—15:00,18:00—20:00)重复测量同一批次药品,观察光谱位移与强度波动的偏差范围,确保系统的检测稳定性。

1.5 双重核对流程的设计与实施

“图像特征初筛-拉曼光谱确证”双重核对工作流程如下:(1)系统读取药袋上的二维码信息;(2)启动MDM图像识别模块进行初步匹配;(3)若匹配相似度高则直接通过,若相似度高或为高风险品种(高警示药品和窄治疗窗药品)则触发拉曼光谱模块;(4)进行拉曼光谱采集并与拉曼光谱数据库进行匹配;(5)根据余弦相似度算法(判定阈值0.95)输出最终核对结果。

1.6 实施效果评价

1.6.1 评价方案设计

本研究采用前后自身对照设计,抽取5个病区各5名高年资护士先后执行两种核对模式,以消除人员个体差异对结果的影响。所有核对试验均安排在每日下午接班后的起始时段进行,此时护士精力充沛,工作负荷处于稳定且较低的状态,以规避工作负荷波动及人员疲劳产生的偏倚。对照组采用“图像识别+人工肉眼实物比对”模式,试验组采用“图像识别+拉曼光谱确证核对”模式,两组均持续2周核对测试。

1.6.2 评价指标

(1)核对效率:记录从读取药袋上的二维码至系统确认完成的时间间隔,并计算单包药品平均核对耗时。单包药品平均核对耗时(s)=总耗时/实际核对总包数。

(2)纠错效能:统计两组在运行期间拦截的物理缺陷(碎药)及配方错误(漏发、错发、品种混淆)的袋数,并记录各病区最终用药差错发生率。用药差错发生率=发生用药差错的袋数/同期发药总袋数。

(3)满意度评价:由参与核对的护士填写满意度评价问卷(Likert 5级量表),从系统稳定性、操作便捷性、识别效率、核对置信度、心理压力缓解5个维度进行评价。1分为非常不满意,5分为非常满意。

1.6.3 统计学分析

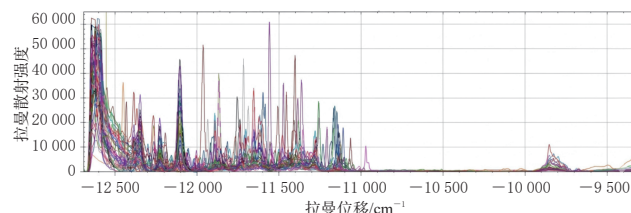
使用SPSS 26.0统计软件进行数据分析。计量资料经Shapiro-Wilk检验,符合正态分布的耗时数据以 $\bar{x} \pm s$ 表示,行配对t检验;非正态分布或定序资料(满意度评

分)以 $[M(Q_1, Q_3)]$ 表示,组间比较行Mann-Whitney U检验。检验水准 $\alpha=0.05$ 。

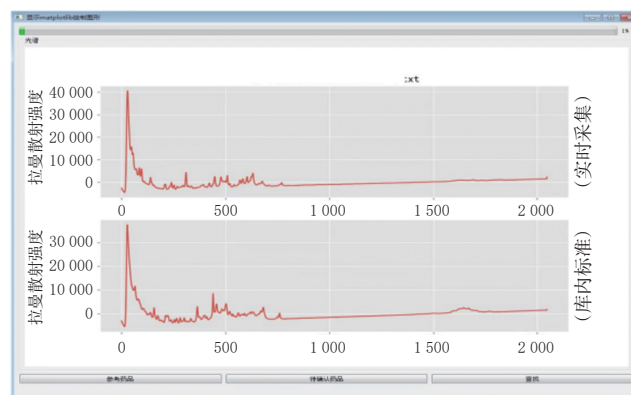
2 结果

2.1 拉曼光谱数据库的识别效能与稳定性

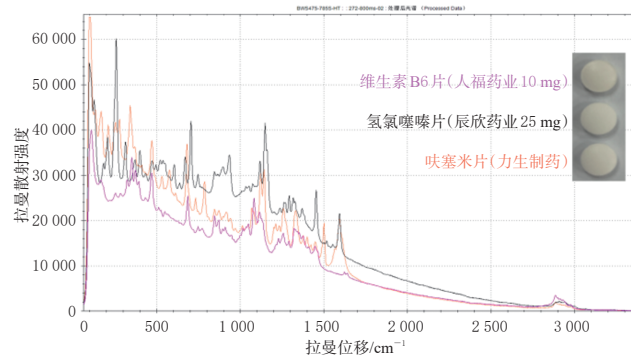
在临床应用前的验证阶段,本研究首先评估了拉曼光谱核对系统对296种常用口服药品的识别能力。结果显示,系统对拉曼光谱数据库内药品的平均识别准确率达到99.2%,展现了极高的谱图匹配稳定性,详见图1。



A. 296种药品拉曼光谱数据库全景图



B. 系统实时采集的拉曼光谱与库内标准光谱的叠加匹配界面



C. “同形异谱”药品实物照片及其特征拉曼谱图

图1 拉曼光谱核对示意图

针对临床常见“同形异谱”药品,拉曼光谱技术展现了决定性的确证优势。以临床常用的白色圆形裸片氢氯噻嗪片、呋塞米片和维生素B6片为例:三者颜色、形状及尺寸上几乎无异(图1C),但由于化学组分不同,三者的拉曼特征峰在波数位置与强度分布上存在显著差异。通过airPLS基线校正及单位归一化处理,系统计算三者各自实测光谱与数据库标准谱图的余弦相似度,匹配分值均大于0.98,实现了100%的准确区分与定性校验。这一结果证实,拉曼光谱能够有效提取药品的指

纹图谱信息,从分子水平弥补了传统图像识别在“同形异谱”场景下的技术短板。

在系统稳定性考察中,本研究随机抽取了5种代表性药品,在不同时段重复检测6次,6次重复检测所得拉曼光谱的一致性均良好,各组光谱的特征峰位移均在 $\pm 2\text{ cm}^{-1}$ 以内,相对峰强度的相对标准偏差(RSD)均小于5.0%。这表明,该系统在临床病区复杂环境下具有良好的检测鲁棒性,能够满足长时间、高负荷的药品核对需求。

2.2 两种核对模式的效率比较

与对照组相比,试验组的单包药品平均核对耗时均明显缩短,耗时减少最多的为43.3%,这主要得益于图像识别联合拉曼光谱核对模式有效减少了护士在遇到疑似相似药时调阅图片、咨询药师或至药房进行实物比对的时间。结果见表1。

表1 两组各病区单包药品平均核对耗时对比($\bar{x} \pm s, s$)

病区	对照组	试验组	耗时减少百分比/%	<i>t</i>	<i>P</i>
病区1	13.64±2.47	9.35±1.82	31.5	19.89	<0.001
病区2	19.81±5.12	11.24±3.56	43.3	24.08	<0.001
病区3	16.19±4.36	10.31±3.19	36.3	22.45	<0.001
病区4	17.35±4.06	10.69±3.38	38.3	20.42	<0.001
病区5	21.52±4.37	12.49±4.33	42.0	18.49	<0.001

a: 核对耗时减少平均百分比=(对照组单包药品核对耗时-试验组单包药品核对耗时)/对照组单包药品核对耗时×100%。

2.3 两种核对模式的差错拦截情况

在为期2周的研究周期内,两组均拦截了由分包机导致的碎药(3例)和漏发(2例)等差错。对于关键的配方错误(品种混淆),试验组在系统提示高风险时,通过拉曼光谱确证功能成功预警并排除了2例潜在的相似药混淆风险,而对照组完全依赖护士经验。最终,两组患者端的实际用药差错率均为0,证实了双重核对系统在保障医疗安全方面具有较高的可靠性。

2.4 护士满意度调查结果

根据满意度评分结果(表2),参与研究的25名护士对新系统的满意度整体较高。经Mann-Whitney *U*检验,试验组在操作便捷性、识别效率、核对置信度及心理压力缓解维度的得分显著优于对照组($P<0.05$),但在系统稳定性方面的差异无统计学意义($P=0.257$),表明拉曼模块作为辅助工具未增加系统负荷。

表2 对照组与试验组核对满意度比较[$M(Q_1, Q_3)$,分]

评价维度	对照组	试验组	<i>U</i>	<i>P</i>
系统稳定性	4(3,4)	4(4,4)	-1.134	0.257
操作便捷性	3(2,4)	4(4,5)	-3.122	0.002
识别效率	3(2,3)	5(4,5)	-3.674	<0.001
核对置信度	2(2,3)	5(4,5)	-4.015	<0.001
心理压力缓解	2(1,3)	4(3,5)	-3.886	<0.001

3 讨论

3.1 双重核对模式对“同形异谱”药品的辨识价值

本研究构建的“图像特征初筛-拉曼光谱确证”双重核对系统,旨在解决智慧药房建设中从HIS医嘱指令到实体药品发放之间的验证盲区。目前,国内多数医疗机构依赖的自动分包机自检功能在识别碎药、加错药等逻辑差错方面存在系统缺陷,检出率较低^[11-13]。本系统的核心优势在于其多维识别模式。传统MDM核对停留在药品的颜色、形状、尺寸等宏观形貌特征上,在面临“同形异谱”药品时误报风险较高。本研究引入拉曼光谱技术,通过探测药物分子的能级振动提取指纹图谱信息^[14-15]。研究结果显示,该系统对拉曼光谱数据库内药品的识别准确率达99.2%,可精准区分例如维生素B6、吠塞米、氢氯噻嗪等外观高度相似的品种。这种形态与分子维度的协同校验,显著提升了单剂量药品的发放准确度。

3.2 双重核对模式对临床工作流程的优化效能

临床应用结果证实,试验组在5个病区的核对效率均显著优于对照组,单包药品平均核对耗时降幅最高达43.3%。这一效能提升得益于“双重核对”的设计逻辑:在初筛阶段,该系统能利用图像识别技术快速处理绝大多数外观特征明显的药品;在确证阶段,仅针对图像识别置信度低或标记为高风险的药品启动拉曼光谱鉴定,有效规避了全量拉曼扫描可能带来的效率损失,实现了精度与速度的平衡。此外,满意度调查显示,护士在“心理压力缓解”维度评分显著提升,表明该系统不仅是一种可靠的技术工具,更是一个减轻医护人员职业疲劳、预防人为差错的重要手段。

3.3 系统技术局限性分析

尽管本研究证明了该方案的可行性,但在复杂临床环境下仍存在一定的局限性:(1)干扰因子控制,部分药品包衣厚度及药袋材质(如某些聚乙烯/聚对苯二甲酸乙二醇酯复合膜)在激光激发下会产生强的荧光背景,干扰拉曼信号。本研究通过airPLS算法进行基线校正使这些干扰得到了一定改善,但对于极弱信号药品的识别仍需优化激光功率与积分时间。(2)多组分重叠挑战,当前识别模型主要针对单粒或分散摆放的药品,当药袋内的多品种药品严重重叠时,其光谱信号的解混分析仍具有挑战性^[16]。

3.4 系统优化方向探讨

为进一步推动该技术的行业普及,建议未来研究应聚焦于标准化数据库构建,目前“一药一模”的建库方式

成本较高,建议相关部门可探索建立区域甚至是国家级的标准药品拉曼指纹共享数据库,实现“云端匹配”;引入深度学习算法,利用神经网络对重叠光谱进行解混识别,提升复杂药袋的自动核对能力;推动拉曼光谱核对模块与 HIS、UDDS 系统的深度集成,实现全流程的无感核对与自动溯源。

4 结语

本研究立足住院药房口服药品单剂量调剂的质量安全需求,将拉曼光谱技术与图像识别技术有机融合,在数据库构建与流程优化两个维度取得了进展。本研究基于构建的拉曼光谱数据库,采用双盲法进行验证,结果显示,系统识别准确率达 99.2%,且在复杂临床环境下具有良好的检测稳定性;该系统从分子能级水平上突破了传统 MDM 在“同形异谱”药品识别上的技术瓶颈,为单剂量分包药品的精准核对奠定了数据基础;构建的“图像特征初筛-拉曼光谱确证”双重核对系统,实现了“医嘱指令-调剂核对-差错反馈”的服务信息闭环。研究证实,单包药品平均核对耗时大幅缩短、核对置信度显著提升。

综上,本系统在有效提升单剂量药品调剂准确性与工作效率的同时,也为医院药学服务的数字化转型与用药安全保障提供了可借鉴的技术方案。

参考文献

[1] 孙嫣,王刚,缪霞,等. 全流程智能化调剂模式在住院药房中的应用[J]. 中国药房,2021,32(14):1780-1784.

[2] 李明明,史琛,杨丽文,等. 针对单剂量口服分包药品的病区“无纸化核对系统”的建立与应用[J]. 中国医院药学杂志,2020,40(13):1471-1473,1483.

[3] 陈涿,林建昌,刘永谦,等. 本院全自动单剂量分包机的应用分析[J]. 国际医药卫生导报,2019,25(22):3817-3820.

[4] 张钰宣,吴斌,史亦丽,等. 自动化药品检测机检测单剂量口服分包药品的准确度分析[J]. 中国医院药学杂志,2018,38(20):2111-2114.

[5] 李明明,游如旭,周洪波,等. 药品集中采购对住院部单

剂量口服药品供应的挑战与对策[J]. 中华医院管理杂志,2021,37(增刊2):107-110.

[6] 林福群,俞继芳,吴凡,等. 利用信息技术改进临床口服用药安全的探讨[J]. 医院管理论坛,2022,39(8):74-76.

[7] SHAH K C, SHAH M B, SOLANKI S J, et al. Recent advancements and applications of Raman spectroscopy in pharmaceutical analysis[J]. J Mol Struct, 2023, 1278: 134914.

[8] 赵文明,宋志玉. 药品裸片外观图片查询系统的开发及应用[J]. 中国合理用药探索,2023,20(2):106-109.

[9] SAMUEL A Z, MUKOJIMA R, HORII S, et al. On selecting a suitable spectral matching method for automated analytical applications of Raman spectroscopy[J]. ACS Omega, 2021, 6(3):2060-2065.

[10] ZHANG S Y, CHEN H, LI R Y, et al. Raman spectroscopy and mapping technique for the identification of expired drugs[J]. Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc, 2020, 224:117407.

[11] 史皓明,王甲,钱珊珊. 住院药房自动药袋核对机应用效果评价[J]. 中国药业,2022,31(19):22-25.

[12] 端王婷,徐启坤,倪佳靓,等. 我院住院药房单剂量分包口服药品过程中的质量控制体系[J]. 临床合理用药, 2024, 17(19):136-139.

[13] 邱婷婷,闫盈盈,张毓宸,等. 口服单剂量配方制药品自动核对模式的建立与优化[J]. 中国药房,2023,34(16):2018-2021.

[14] 张中湖,毕宝华,陆峰,等. 基于拉曼光谱法的药品物料快速识别系统(MASR)的开发研究[J]. 分析仪器,2022(5):1-5.

[15] 孙佳慧,冯源,王珊,等. 冬虫夏草与蛹虫草的表面增强拉曼光谱结合化学计量学鉴定研究[J]. 药物分析杂志, 2022, 42(4):727-733.

[16] ALIX J J P, PLESIA M, LLOYD G R, et al. Rapid identification of human muscle disease with fibre optic Raman spectroscopy[J]. Analyst, 2022, 147(11):2533-2540.

(收稿日期:2025-12-11 修回日期:2026-03-16)

(编辑:刘明伟)