·综　　述·

激光诱导击穿光谱结合神经网络模型在生物医学领域的应用研究进展

马越　杨光　陈建军*

（新疆医科大学医学工程技术学院，乌鲁木齐 830000）

【摘要】 激光诱导击穿光谱技术（laser-induced breakdown spectroscopy, LIBS）因其快速、原位、微损及多元素同步分析的优势，在生物医学检测领域受到广泛关注。然而，其固有的光谱噪声、基质效应等问题制约了分析精度。近年来，神经网络模型强大的非线性拟合与特征提取能力为克服这些瓶颈提供了有效的解决方案。本文系统综述了LIBS技术与神经网络模型相结合在生物医学领域的应用研究进展，重点探讨了该联合策略在在肿瘤诊断与分类、癌症分期与治疗监测、细菌与病原体识别以及中药分析与溯源等方面的关键研究成果。研究表明，通过结合人工神经网络、卷积神经网络、脉冲神经网络等模型，能够从复杂的LIBS光谱中提取深层特征，显著提升分类与定量分析的准确性与鲁棒性。LIBS与神经网络的融合形成了“快速检测+智能解析”的协同效应，展现出巨大的临床应用潜力，为未来开发智能化、高精度的即时诊断系统奠定了坚实的技术基础。

【关键词】 激光诱导击穿光谱；神经网络；生物医学检测；元素分析

【中图分类号】 TN249　　【文献标志码】 A　　【DOI】 10.11876/mimt202602017

Research progress on the application of laser-induced breakdown spectroscopy combined with neural network model in the biomedical field

*Ma Yue, Yang Guang, Chen Jianjun**

(School of Medical Engineering and Technology, Xinjiang Medical University, Urumqi 830000, China)

【Abstract】 Laser induced breakdown spectroscopy (LIBS) has attracted extensive attention in the field of biomedical detection due to its advantages of rapid, in situ, micro-damage and multi-element synchronous analysis. However, its inherent spectral noise, matrix effect and other problems restrict the analysis accuracy. In recent years, the powerful nonlinear fitting and feature extraction capabilities of neural network models provide effective solutions to overcome these bottlenecks. This paper systematically reviews the research progress of LIBS technology combined with neural network model in biomedical field, focusing on the key research achievements of this combined strategy in tumor diagnosis and classification, cancer staging and treatment monitoring, bacterial and pathogen identification, as well as traditional Chinese medicine analysis and traceability. Studies have shown that by combining artificial neural network, convolutional neural network, spiking neural network and other models, it can extract deep features from complex LIBS spectra, significantly improve the accuracy and robustness of classification and quantitative analysis. It is concluded that the integration of LIBS and neural network forms a synergistic effect of “rapid detection+intelligent analysis”, which shows great clinical application potential and lays a solid technical foundation for the development of intelligent, high-precision point-of-care diagnosis system in the future.

基金项目：国家自然科学基金项目（31760269）；新疆维吾尔自治区“天山青年”优秀人才项目（2018Q021）

第一作者：马越，男，硕士研究生，研究方向：生物信息处理

通信作者：陈建军，男，博士研究生，教授，研究方向：生物信息处理

【Key words】 Laser–induced breakdown spectroscopy; Neural network; Biomedical testing; Elemental analysis

生物医学研究的核心目标之一是实现疾病的早期精准诊断[1]、药物的高效研发[2]及生物样本的快速分析[3]，但目前技术体系在这一过程中仍面临诸多瓶颈。例如，肿瘤早期诊断依赖微量生物标志物的精准捕获，药物研发要求对成分含量进行实时监测和保证中药产地溯源的准确性，这些都对检测技术的多元素同步分析能力提出了更高要求，也为兼具快速检测及低损伤特性的激光诱导击穿光谱技术（laser–induced breakdown spectroscopy, LIBS）的应用提供了广阔空间[4]。

LIBS是一种分析光谱技术，它通过分析样品内部或表面产生的等离子体发射出的光谱，来对样品中的元素进行定量和定性分析[5]。该技术无需复杂的样品前处理流程，从激光激发到光谱分析的整个过程可在数秒内完成，为快速检测奠定了基础[6]。与传统生物医学检测技术相比，LIBS技术具备能够原位和远距离检测、无需或只需少量样品准备和可进行多元素分析的优点[7]，尤其适用于生物医学领域多样化的样本类型[8]。LIBS技术凭借其原位分析、快速响应、微创、可远距离检测等优势[9]，已被广泛应用在食品安全[10–11]、环境监测[12–13]、药材[14–15]、公安侦查[16]等多个学科领域。

LIBS技术虽具备快速检测优势，但在生物医学领域的应用中仍面临光谱信号噪声高[17]、基质效应干扰[18]、等离子体自吸收效应[19]等瓶颈。而神经网络模型的引入恰好弥补了这些不足：通过神经网络的特征提取能力，可从噪声干扰严重的LIBS光谱中筛选出与生物指标强相关的特征波长；利用模型的非线性拟合能力[20]，可校正基质效应带来的分析误差，提升痕量元素检测的灵敏度与准确性。二者的结合实现了“快速检测技术+精准数据分析”的协同效应，显著拓展了LIBS技术在生物医学领域的应用边界[21]。近年来，随着机器学习尤其是神经网络方法的发展，LIBS技术在生物医学领域的应用研究不断深入。已有研究表明，将LIBS与神经网络模型相结合，可有效提升复杂生物样本中光谱信息的识别与判别能力，在细菌鉴定、肿瘤识别及药物分析等方面展现出良好的应用潜力，并为LIBS在精准医疗和快速诊断中的应用奠定了基础[22]。尽管如此，当前相关研究仍面临样本规模有限、模型泛化能力不足及临床转化程度不高等问题。基于此，本文系统综述了LIBS技术与神经网络模型在生物医学领域的融合应用，重点探讨其在肿瘤鉴别、癌症分期、细菌与病原体识别及药物分析等方向的研究进展，以期为该技术的进一步开发与应用提供参考。

1 神经网络模型与LIBS技术融合的基础与优势

神经网络模型是一种模拟人脑神经元结构与信息传递机制的机器学习算法，通过输入层、隐藏层及输出层的层级网络架构，实现对复杂数据的特征提取、模式识别与非线性映射，其核心优势在于突破传统统计分析对数据线性假设的限制，能够从高维、嘈杂、非线性的数据中挖掘出潜在的特征关联，即通过反向传播、梯度下降等优化算法持续调整网络权重与偏置参数，逐步提升模型对数据规律的拟合能力。在生物医学数据处理场景中，该特性使神经网络模型尤其适用于光谱数据、图像数据、生物标志物检测数据等复杂信息的解析，为突破传统分析技术的瓶颈提供了新路径。

神经网络模型与LIBS技术的融合逻辑，恰好有针对性地弥补了LIBS在生物医学领域应用中的核心短板：针对LIBS光谱噪声高的问题，神经网络模型的特征筛选与拟合能力可从杂乱信号中精准提取与生物指标强相关的有效信息，降低噪声对分析结果的干扰；面对基质效应带来的分析误差，模型通过学习不同基质样本的光谱响应规律，建立非线性校正模型，提升痕量元素检测的灵敏度与定量准确性；对于等离子体自吸收效应导致的谱线畸变，部分深度学习模型可通过数据增强与迁移学习策略，增强模型对谱线畸变的鲁棒性。这种“技术互补–协同优化”的模式，为LIBS技术在生物医学领域的精准应用奠定了算法基础。

2 LIBS技术结合神经网络模型的应用现状

2.1 肿瘤诊断与分类

肿瘤诊断与分类是精准治疗和预后评估的重要基础，尤其在术中快速鉴别、良恶性判断及多病灶筛查中具有重要意义。传统肿瘤诊断方法如组织病理学、免疫组化等虽然准确性较高，但通常依赖复杂的样本处理流程和病理医师经验，检测周期较长，难以满足快速、原位分析的需求。相比之下，LIBS技术具有检测速度快、样本前处理简便和可实现多元素同步分析等特点，与神经网络模型结合后，有望进一步提升复杂光谱数据的识别能力，为肿瘤快速诊断提供新的技术路径。

近年来，LIBS结合神经网络在肿瘤诊断与分类中的研究不断拓展，研究对象已涵盖黑色素瘤、脑肿瘤、肝癌、肺癌及多种肿瘤细胞系等，模型类型也由传统人工神经网络（artificial neural network, ANN）逐步发展至脉冲神经网络（spiking neural network, SNN）、一维卷积神经网络（1–dimensional convolutional neural network, 1D–CNN）和一维残差网络（1–dimensional residual network, 1D–ResNet）等深度学习方法。相关研究表明，肿瘤组织中P、K、Na、Mg、Ca、Cu等元素的谱线强度常与正常组织存在明显差异，可作为分类识别的重要依据[23–27]。例如，Khan等[23]利用LIBS结合ANN实现了黑色素瘤与正常组织的高精度鉴别；Teng等[24]将LIBS分子碎片光谱与SNN结合用于脑肿瘤分类，在保证较高准确率的同时降低了过拟合风险；Chen等[25]采用1D–CNN对多种肿瘤细胞系进行识别，在无需复杂特征工程的条件下取得了较高的平均准确率（图1）；Sarpe等[26]和Lin等[27]则分别在肝癌组织和肺部良恶性肿瘤判别中验证了ANN和1D–ResNet模型的有效性，显示出深度学习方法在复杂光谱特征挖掘中的优势。值得注意的是，在部分研究中，随机森林（random forest, RF）、K近邻算法（K–nearest neighbors, KNN）和支持向量机（support vector machine, SVM）等方法也被用于对比分析，进一步表明神经网络模型在复杂光谱分类任务中具有较好的适用性。

总体来看，LIBS结合神经网络已在肿瘤诊断与分类中表现出较好的应用前景：一方面，该方法能够从高维、复杂的光谱信号中提取出与肿瘤相关的关键特征，实现较高精度的自动分类；另一方面，相较于传统病理学方法，其具有检测速度快、微损、原位和自动化程度高等优势，在术中辅助判断和快速筛查方面具有潜在应用价值。

但现有研究仍存在一些不足。首先，多数研究样本量相对有限，且多为单中心、特定条件下的实验室研究，模型的泛化能力和稳定性仍有待进一步验证。其次，不同样本制备方式、仪器参数和实验条件可能导致光谱差异，限制了结果的可比性和方法的标准化应用。此外，深度学习模型虽然提升了分类性能，但其可解释性仍相对不足，临床实际应用与转化仍面临挑战。未来应加强多中心、大样本研究，建立标准化的光谱采集与分析流程，并结合可解释人工智能和多模态数据融合策略，以进一步提升LIBS结合神经网络在肿瘤诊断与分类中的准确性、稳定性和临床适用性。

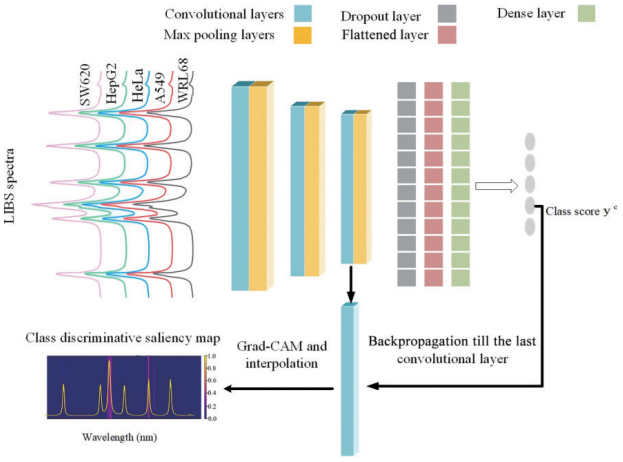


图1 用于肿瘤细胞识别的1D–CNN模型架构[25]

注：1D–CNN为一维卷积神经网络。

2.2 癌症的分期与治疗监测

癌症的精准分期与治疗监测是制定个体化治疗方案、评估疗效及判断预后的重要依据。传统癌症分期主要依赖影像学检查、组织病理学及血清标志物检测等手段，虽然能够提供较为全面的诊断信息，但仍存在辐射暴露、侵入性较强、检测周期较长及成本较高等局限，尤其在术中实时评估和动态疗效监测方面存在一定不足。相比之下，LIBS结合神经网络能够快速获取样本中元素组成及其变化特征，并借助智能算法挖掘与疾病进展相关的深层

信息，为癌症分期与治疗监测提供了一种新的技术思路。

近年来，LIBS结合神经网络在癌症分期研究中的应用逐步拓展，已从单一癌种诊断发展到疾病分期及多模态信息融合分析。相关研究表明，元素含量变化及分子标志物特征可为癌症分期提供重要依据，而神经网络模型则有助于提高复杂光谱数据的识别精度和分类性能[28–29]。例如，Chen等[28]将LIBS分别与ANN、KNN和SVM结合，用于多发性骨髓瘤的诊断与分期，结果显示ANN模型在诊断准确率、分期准确率、敏感性和特异性等方面均优于传统算法，为多发性骨髓瘤病情评估提供了有效手段。Lin等[29]进一步将LIBS与拉曼光谱融合，构建肺癌精准分期的双模态诊断系统，并结合贝叶斯决策级数据融合与1D–CNN模型进行分析，显著提升了肺癌分期的准确率和特异性。此外，ROC曲线分析进一步显示，1D–CNN模型的曲线整体更接近左上角，且AUC高于SVM和极端梯度提升算法（eXtreme gradient boosting, XGBoost），提示其在不同判别阈值下具有更优的整体分类性能（图2）。

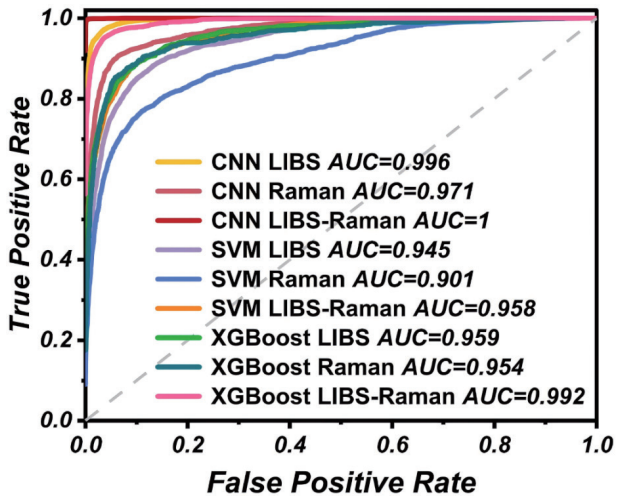


图2 用于肺癌精准分期的1D–CNN、SVM和XGBoost模型的ROC曲线[29]

注：1D–CNN为一维卷积神经网络；SVM为支持向量机；XGBoost为极端梯度提升算法。

总体来看，LIBS结合神经网络在癌症分期与治疗监测方面已展现出良好的应用前景：一方面，该方法能够利用Ca、Mg等元素含量变化以及分子标志物特征，对癌症不同阶段进行较高精度的区分；另一方面，与传统影像学和病理学方法相比，其具有检测速度快、微损、成本相对较低和适用于自动化分析等优势，在术中实时分期、疗效评估和动态监测等方面具有潜在应用价值。另外，LIBS与其他光谱技术的数据融合，为提升癌症分期精度和增强信息互补性提供了新的研究方向。

但现有研究仍存在一定局限。首先，当前相关研究数量相对较少，涉及癌种仍较为有限，尚不足以全面反映该技术在不同癌症分期中的适用性。其次，多数研究仍以实验室条件下的小样本验证为主，缺乏多中心、大样本和纵向随访研究，模型在真实临床场景中的泛化能力与稳定性仍需进一步评估。此外，多模态数据融合虽然能够提高模型性能，但也增加了数据处理复杂度和模型部署难度。未来应进一步扩大样本规模，推进跨中心验证，构建标准化的数据采集与分析流程，并加强LIBS与拉曼光谱、临床指标及影像学信息的融合研究，以提高模型的鲁棒性、可解释性及临床转化潜力。

2.3 细菌与病原体的识别

细菌与病原体的快速、准确识别是感染性疾病诊断、院内感染防控、食品安全检测及公共卫生应急处置中的关键环节。传统病原体鉴定方法如培养法、聚合酶链式反应（polymerase chain reaction, PCR）和质谱分析等虽然准确性较高，但普遍存在检测周期较长、样本前处理复杂、对实验条件和操作人员要求较高等问题，尤其在突发公共卫生事件和现场快速筛查场景中存在一定局限。相比之下，LIBS技术具有快速、原位和多元素同步检测等优势，结合神经网络模型后，可进一步提升对复杂病原体光谱特征的识别能力，为病原体快速筛查提供了新的技术手段。

近年来，LIBS结合神经网络在细菌与病原体识别中的研究逐步由单一菌种鉴别扩展至多病原体分类，模型方法也涵盖了反向传播神经网络（back–propagation neural network, BPNN）、ANN、SVM和KNN等。相关研究表明，全光谱信息较单一特征谱线能够更全面地反映病原体的元素组成差异，从而有助于提高模型识别性能[30–31]。例如，Sun等[30]将LIBS分别与BPNN、SVM和KNN相结合，构建了

针对金黄色葡萄球菌、志贺氏菌等5种食源性病原菌的分类模型，结果显示BPNN在全光谱输入条件下取得了较高准确率，即使在主成分分析降维后仍保持较好的分类效果。Arabi等[31]则进一步将纳米增强策略引入LIBS检测，通过在细菌样本表面喷洒银纳米颗粒提高信号强度和信噪比，并结合ANN实现对铜绿假单胞菌与奇异变形杆菌的有效区分。结果表明，纳米增强LIBS较传统LIBS能够检测到更多痕量元素信号，并提高分类准确率，其ANN模型误差直方图见图3。

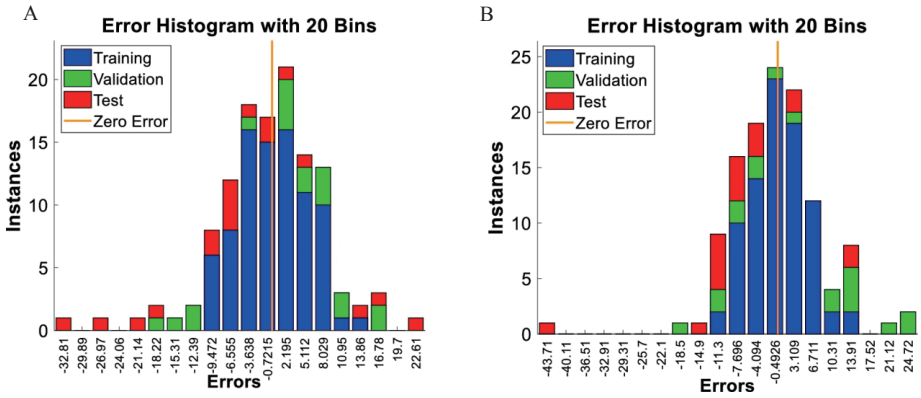


图3 用于食源性病原菌分类的ANN模型误差直方图[31] A为基于LIBS数据；B为基于纳米增强LIBS数据

注：ANN为人工神经网络；LIBS为激光诱导击穿光谱技术。

总体来看，LIBS结合神经网络在细菌与病原体识别方面已显示出良好的应用潜力：一方面，该方法能够利用病原体间元素组成和光谱特征的差异，实现快速、无标记和多元素同步检测；另一方面，神经网络模型能够从高维、复杂的光谱数据中提取有效特征，提高分类准确率和自动化分析能力。在纳米增强等策略辅助下，LIBS信号质量进一步改善，为痕量元素检出和病原体精细识别提供了支持。相较于传统培养法、PCR和质谱方法，LIBS结合神经网络在检测速度和现场应用潜力方面具有明显优势，在公共卫生事件应对、院内感染监测及食品安全快速筛查等场景中具有较高的应用价值。

但现有研究仍存在一些不足。首先，目前相关研究样本类型相对有限，多集中于标准菌株或理想实验条件下的单一病原体分类，对于复杂临床样本、混合菌群样本及真实环境样本的适用性仍需进一步验证。其次，不同培养条件、样本状态及实验参数可能对LIBS光谱特征产生影响，从而影响模型的稳定性和泛化能力。此外，现有研究多聚焦于分类性能的提升，对模型可解释性、跨平台一致性及标准化检测流程的讨论仍显不足。未来应进一步扩大样本规模，开展真实场景下的多中心验证，建立标准化的病原体光谱数据库，并结合纳米增强、多模态检测和可解释人工智能方法，进一步提升LIBS结合神经网络在细菌与病原体快速识别中的准确性、鲁棒性和实际应用能力。

2.4 中药分析与溯源

中药分析与溯源是保障中药材质量安全、开展产地鉴别、实现真伪辨识及重金属残留监测的重要基础。中药样本成分复杂，且易受产地环境、加工方式和辅料差异等多种因素影响，因此对检测技术的灵敏度、准确性和现场适用性提出了更高要求。传统分析方法如原子吸收光谱法（atomic absorption spectroscopy, AAS）、电感耦合等离子体–质谱法（inductively coupled plasma–mass spectrometry, ICP–MS）等虽然灵敏度高、准确性好，但通常存在设备昂贵、样品前处理复杂、检测周期较长、难以实现现场快速筛查与溯源等不足。相比之下，LIBS具有快速、原位、微损和多元素同步分析等优势，结合神经网络模型后，有望进一步提高复杂中药样本的识别与定量分析能力。

近年来，LIBS结合神经网络在中药分析与溯源中的应用不断拓展，研究内容已由单一元素定量逐渐发展到中药材产地识别、来源鉴定和相关制剂分析。相关研究表明，神经网络模型能够较好地处理复杂基质带来的非线性干扰，提高定量和分类

任务的准确性[32–35]。例如，Sun等[32]采用LIBS结合BP–ANN及偏最小二乘法（partial least squares, PLS），实现了当归与黄芩中Cu含量的快速定量分析，结果显示BP–ANN在预测误差方面优于PLS及传统标准曲线法、内标法。Zhang等[33]进一步将LIBS与1D–ResNet结合，用于柴胡产地识别，结果表明深度学习模型在复杂光谱特征提取方面具有较好效果，相关1D–ResNet架构见图4。Yao等[34]则结合t分布随机邻域嵌入（t–distributed stochastic neighbor embedding, t–SNE）与BPNN，实现了不同生产商感冒药的精准溯源，显示出LIBS在相关制剂来源识别中的应用潜力。Ren等[35]进一步提出LIBS与拉曼光谱的数据融合策略，并结合1D–CNN实现黄芪地理来源快速鉴定，结果表明多模态信息融合与特征筛选策略可在提高分类准确率的同时提升计算效率。

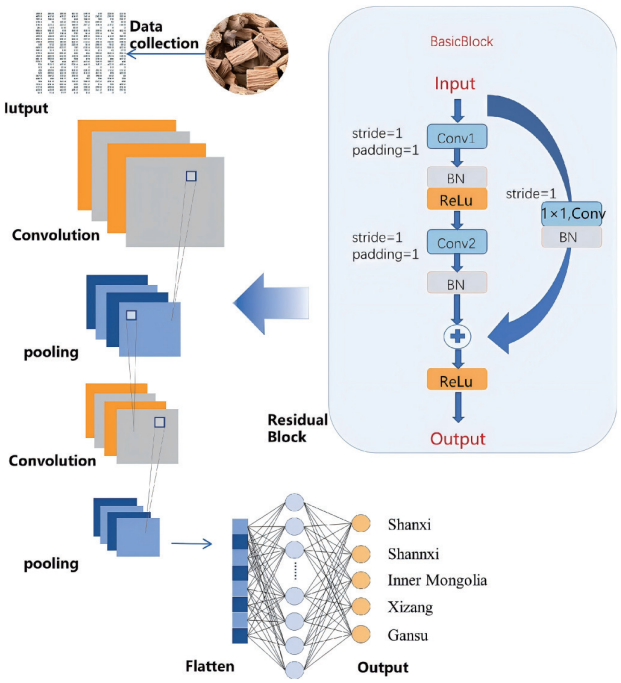


图4 用于柴胡产地识别的1D–ResNet架构[33]

总体来看，LIBS结合神经网络在中药分析与溯源中已展现出较强的应用潜力：一方面，该方法能够实现从单一元素定量到多元素协同识别与地理溯源的拓展，反映出研究对象和分析任务的不断丰富；另一方面，模型也由传统浅层网络逐步发展到1D–ResNet、1D–CNN等深度学习架构，并通过特征选择、降维处理和多模态数据融合进一步提升了分析性能。相较于传统分析技术，LIBS结合神经网络在检测效率、样本前处理简便性和现场应用潜力等方面具有明显优势，尤其适用于中药材产地鉴别、真伪辨识、重金属残留筛查及相关制剂来源分析等场景。

但现有研究仍存在一些不足。首先，中药样本成分复杂，受产地、品种、加工工艺及辅料差异等多因素共同影响，容易导致光谱特征波动，增加模型构建和结果解释难度。其次，目前多数研究仍以实验室条件下的小样本验证为主，独立测试集和跨批次、跨区域验证仍较有限，模型的泛化能力和稳定性尚需进一步提高。此外，不同研究在样本前处理、光谱采集参数和特征筛选方法上差异较大，也限制了方法的标准化和结果的可比性。未来应加强大样本、多中心研究，建立标准化的中药光谱数据库，推动LIBS与拉曼等多模态技术的融合应用，并结合可解释人工智能方法，以进一步提高模型的准确性、鲁棒性和实际应用价值。

本文对LIBS结合神经网络模型在生物医学领域应用的常用算法如ANN、BPNN、SNN、1D–CNN、1D–ResNet以及SVM、KNN、RF、XGBoost等进行了归类整理，并从主要应用场景、优势、局限性等方面进行了横向比较，见表1。

3 总结与展望

LIBS与神经网络模型的融合，为生物医学样本的快速检测与智能分析提供了新的技术路径。近年来，随着光谱检测技术、机器学习算法及数据处理方法的不断发展，LIBS结合ANN、BPNN、1D–CNN和1D–ResNet等模型，已在肿瘤诊断与分类、癌症分期与治疗监测、细菌与病原体识别以及中药分析与溯源等方面取得了较为丰富的研究进展。现有研究表明，LIBS具有检测速度快、样本前处理简便、可实现原位分析和多元素同步检测等优势，能够为生物医学样本提供快速的元素信息；神经网络模型则能够从高维、复杂、非线性的光谱数据中提取有效特征，提高复杂样本的分类识别与定量分析能力。LIBS与神经网络模型结合后，在一定程度上弥补了LIBS信号噪声高、基质效应强和数据解释困难等不足，推动了其由传统元素分析工具向智能诊

表1 LIBS结合神经网络模型在生物医学领域应用的常用算法比较

算法类别	代表算法	主要应用方向	优势	局限性	文献
浅层神经网络	ANN	肿瘤诊断、癌症分期、病原体识别	结构简单，非线性拟合能力较强，适合中小样本	深层特征提取能力有限，泛化能力受样本规模影响较大	Khan等[23]、Sarpe等[26]、Chen等[28]、Arabi等[31]
	BPNN/BP–ANN	病原体分类、药物定量、药物溯源	适合处理复杂基质干扰，可兼顾分类与定量分析	易受参数设置影响，稳定性有限	Sun等[30]、Sun等[32]、Yao等[34]
深度学习模型	SNN	脑肿瘤分类	对特征化输入表征能力较好，可减少过拟合	应用较少，普适性仍需验证	Teng等[24]
	1D–CNN	肿瘤识别、癌症分期、药材来源鉴定	可自动提取深层特征，减少人工特征工程	对数据量要求较高，可解释性不足	Chen等[25]、Lin等[29]、Ren等[35]
	1D–ResNet	肺肿瘤判别、中药产地识别	残差结构有助于提升复杂光谱分类性能	模型复杂，跨场景泛化仍有待验证	Lin等[27]、Zhang等[33]
传统机器学习	SVM	肿瘤分类、病原体识别、药物分析	中小样本分类性能稳定	依赖人工特征工程	Teng等[24]、Chen等[28]、Sun等[30]、Zhang等[33]
	KNN	肿瘤分类、病原体识别	方法简单，适合作为基线模型	对噪声敏感，泛化能力有限	Teng等[24]、Sarpe等[26]、Chen等[28]、Sun等[30]
集成学习	RF/XGBoost	特征筛选、肿瘤判别、中药产地识别	鲁棒性较好，可评估特征重要性	端到端学习能力不足	Sarpe等[26]、Lin等[27]、Lin等[29]、Zhang等[33]
线性模型	LR	中药产地识别	模型简单，可解释性较强	难以刻画复杂非线性关系	Zhang等[33]
特征处理与融合	PCA、t–SNE、ANOVA、贝叶斯融合	降维、特征筛选、多模态融合	可减少冗余、提高分析效率	依赖参数设置与特征选择策略	Lin等[29]、Sun等[30]、Yao等[34]、Ren等[35]

注：LIBS为激光诱导击穿光谱技术；ANN为人工神经网络；BPNN为反向传播神经网络；BP–ANN为反向传播人工神经网络；SNN为脉冲神经网络；1D–CNN为一维卷积神经网络；1D–ResNet为一维残差网络；SVM为支持向量机；KNN为K近邻算法；RF为随机森林；XGBoost为极端梯度提升算法；LR为逻辑回归；PCA为主成分分析；t–SNE为t分布随机邻域嵌入；ANOVA为方差

断辅助技术的转变。尤其是在传统检测方法存在耗时长、操作复杂、依赖经验或难以满足现场快速检测需求的情况下，LIBS结合神经网络在提高检测效率、增强自动化分析能力和拓展应用场景方面显示出明显优势。从目前研究趋势来看，该技术已由早期的单一元素检测逐步发展为面向疾病识别、病程评估、病原体筛查及药物溯源等多任务的综合分析体系，显示出较好的应用前景。

尽管如此，LIBS结合神经网络在生物医学领域的进一步应用仍面临若干关键问题。首先，检测灵敏度和定量能力仍有待提升。与电感耦合等离子体质谱等高灵敏度分析方法相比，LIBS在痕量元素和低丰度生物标志物检测方面仍存在一定不足，特别是在复杂生物基质中，背景噪声、基质效应及自吸收效应会对弱信号识别产生明显干扰。其次，生物样本本身具有较强的异质性，不同组织、细胞、菌株及药材样本在成分、含水量和物理状态等方面差异显著，易导致光谱波动并降低模型稳定性。再次，目前多数研究仍停留在小样本、单中心和实验室条件下的验证阶段，模型虽然在特定数据集上取得了较高准确率，但其跨设备、跨批次、跨中心的泛化能力尚缺乏系统评估。与此同时，当前尚未建立统一的生物医学LIBS光谱数据库、标准化样本处理流程及规范化的模型评价体系，这使不同研究之间的结果难以直接比较，也限制了研究成果的积累与推广。除此之外，深度学习模型虽然在分类性能上具有优势，但其可解释性仍较弱，关键谱线、特征变量与生物学意义之间的关系尚未得到充分揭示，这在医学应用场景中可能影响模型的可信度和接受度。最后，从临床转化和实际应用角度来看，LIBS系统在设备便携化、操作简便性、自动化程度及法规准入等方面仍有待进一步完善，距离常规临床应用和大规模推广仍存在一定距离。

针对上述问题，未来LIBS结合神经网络在生物医学领域的发展可从以下几个方面进一步推进。第一，应从检测源头提高数据质量，通过优化激光

能量、延迟时间、采集参数和光谱分辨率等条件，结合纳米增强、等离子体调控及样本前处理优化等策略，提高弱信号检出能力和定量分析水平。第二，在算法层面，应根据生物医学数据小样本、高噪声和强异质性的特点，发展更加适配的建模方法，如迁移学习、少样本学习、自监督学习和数据增强等，以提高模型在有限样本条件下的鲁棒性和泛化能力。同时，应加强可解释人工智能方法在LIBS数据分析中的应用，通过特征归因、注意力机制和关键谱线识别等手段，提高模型决策过程的可解释性。第三，在数据与标准化层面，有必要建立跨机构、多中心、大样本的共享光谱数据库，并逐步完善样本采集与制备、光谱获取、数据预处理和模型评价的标准化流程，以增强不同研究之间的可比性，并为后续临床验证提供基础。第四，多模态信息融合将是未来的重要发展方向。LIBS主要反映样本的元素组成信息，而拉曼、荧光、红外等技术可提供分子结构及官能团特征，若进一步结合影像学指标、病理信息和临床生化指标，有望构建具有更高准确性和稳定性的综合诊断模型。第五，在应用转化层面，应推动LIBS检测系统向便携化、微型化和智能化发展，并结合边缘计算、嵌入式分析平台和自动判读软件，提升其在床旁检测、现场筛查和基层应用中的可操作性。总体而言，LIBS与神经网络模型的融合为生物医学检测提供了新的研究范式，其未来发展不仅依赖于硬件性能和算法能力的提升，也有赖于标准体系建立、多学科协同和真实场景验证的持续推进。随着相关研究的不断深入，该技术有望在精准医疗、感染防控、药物监管和公共卫生监测等领域发挥更大作用，并逐步实现由实验室研究向实际应用的转化。

[参 考 文 献]

[1] 李响, 邢金良. 肿瘤标志物的新认识：从传统诊断到精准医疗[J]. 现代肿瘤医学, 2025, 33(12): 2035–2041.

[2] 郭金龙, 许鑫, 刘丽丽, 等. 药物研发中的大语言模型研究与应用进展[J]. 中国新药杂志, 2025, 34(13): 1384–1390.

[3] 丁靖, 陈英, 翟媛媛, 等. 氯氮平治疗药物监测生物样本类型与分析方法的研究进展[J]. 中国医院药学杂志, 2025, 45(22): 2646–2654.

[4] 熊凯, 邹祥波, 陈创庭, 等. 激光诱导击穿光谱结合机器学习的煤质多指标同步快速检测[J]. 热力发电, 2025, 54(4): 129–139.

[5] Li X, Yang S, Fan R, et al. Discrimination of soft tissues using laser–induced breakdown spectroscopy in combination with k nearest neighbors (kNN) and support vector machine (SVM) classifiers[J]. Optics and Laser Technology, 2018, 102: 233–239.

[6] 孙浩然, 赵春园, 林晓梅, 等. 基于激光诱导击穿光谱结合深度学习的肺部肿瘤诊断方法研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2025, 45(10): 2730–2736.

[7] de Carvalho G G A, Guerra M B B, Adame A, et al. Recent advances in LIBS and XRF for the analysis of plants[J]. Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 2018, 33: 919–944.

[8] 马越, 邓美慧, 陈建军. 激光诱导击穿光谱结合主成分分析在生物医学领域的应用研究[J]. 现代仪器与医疗, 2025, 31(3): 89–96.

[9] 张大成, 冯中琦, 魏宽, 等. 远程激光诱导击穿光谱技术与应用（特邀）[J]. 光子学报, 2021, 50(10): 145–157.

[10] 陈添兵, 姚明印, 刘木华, 等. 脐橙含铅量的激光诱导击穿光谱检测实验研究[J]. 激光与光电子学进展, 2012, 49: 101406.

[11] 曾凡倜, 李春宇, 赵雪珺. LIBS结合机器学习在蜂蜜真伪评估与品质鉴定中的研究进展[J/OL]. 食品与发酵工业, 2025[2025–11–08]. https://doi.org/10.13995/j.cnki.11–1802/ts.044157.

[12] Kantemiris G, Xenogiannopoulou E, Vollas A, et al. Classification of soil contamination by heavy metals (Cr, Ni, Pb, Zn) in wildfire–affected areas using laser–induced breakdown spectroscopy and machine learning[J]. Environmental Science and Pollution Research, 2025, 32: 2359–2373.

[13] Fayek N, Tawfik W, KhalafAllah A, et al. Advancing environmental monitoring: unveiling heavy metals contamination with calibration–free picosecond laser–induced breakdown spectroscopy (CF–PS–LIBS)[J/OL]. Journal of Optics, 2025[2025–11–08]. https://doi.org/10.1007/s12596–025–02524–x.

[14] 孙成玉, 焦龙, 闫娜莹, 等. 激光诱导击穿光谱结合人工神经网络鉴别不同产地的丹参药材[J]. 光谱学与光谱分析, 2023, 43(10): 3098–3104.

[15] Huang T, Bi W, Song Y, et al. DMC–LIBSAS: a laser–induced breakdown spectroscopy analysis system with double–multi convolutional neural network for accurate traceability of Chinese medicinal materials[J]. Sensors, 2025, 25(7): 2104.

[16] 周君霞, 李春宇, 赵雪珺. LIBS结合轻量1D–CNN模型对金属锤的分类研究[J/OL]. 激光与光电子学进展, 2025[2025–11–09]. https://link.cnki.net/urlid/31.1690.TN.20251027.1943.074.

[17] 刘佳琪, 柯伟, 袁欢, 等. 不同气压下银纳米粒子增强激光诱导等离子体信号[J]. 电机与控制学报, 2024, 28(4): 1–10.

[18] 孔维恒, 曾令伟, 饶宇, 等. 基于预分类策略的激光诱导击穿光谱技术用于岩石样品定量分析[J]. 岩矿测试, 2023, 42(4): 760–770.

[19] 彭颖婕, 陈建军. 激光诱导击穿光谱技术在光谱数据的增强和定量分析上的基础研究[J]. 现代仪器与医疗, 2024, 30(1): 50–57.

[20] 吴文刚. 基于神经网络的船舶计算网络安全评估架构设

（下转第 120 页）

calculation of the right ventricle to left ventricle ratio on CT for the risk stratification of patients with acute pulmonary embolism［J］. Eur Radiol, 2021, 31(8): 6013–6020.
［37］郭润财, 王蕾, 黄振国, 等. 基于从头训练模式深度学习卷积神经网络模型评估急性肺栓塞的价值［J］. 实用医学杂志, 2023, 39(22): 2979–2983.
［38］Zhong Z, Zhang H, Fayad F H, et al. Pulmonary embolism mortality prediction using multimodal learning based on computed tomography angiography and clinical data［EB/OL］. (2024–06–03)［2025–12–13］.https://arxiv.org/abs/2406.01302.
［39］Wang D, Chen R, Wang W, et al. Prediction of short–term adverse clinical outcomes of acute pulmonary embolism using conventional machine learning and deep learning based on CTPA images［J］. Journal of Thrombosis and Thrombolysis, 2025, 58(2): 331–339.
［40］Li L, Peng M, Zou Y, et al. The promise and limitations of artificial intelligence in CTPA–based pulmonary embolism detection［J］. Frontiers in Medicine, 2025, 12: 1514931.
［41］Cianflone F, Maris B, Bertolo R, et al. Development of artificial intelligence–based real–time automatic fusion of multiparametric magnetic resonance imaging and transrectal ultrasonography of the prostate［J］. Urology, 2025, 199: 27–34.
［42］Hou J, Zhang R, Xie Y, et al. Multimodal deep learning for cancer prognosis prediction with clinical information prompts integration［J/OL］. NPJ Digit Med, 2025［2025–12–13］. https://www.nature.com/articles/s41746–025–02257–y.
［43］Langius–Wiffen E, de Jong P A, Mohamed Hoesein F A, et al. Added value of an artificial intelligence algorithm in reducing the number of missed incidental acute pulmonary embolism in routine portal venous phase chest CT［J］. European Radiology, 2024, 34(1): 367–373.
［44］Luciani D, Magrini A, Berzuini C, et al. Finding the needle by modeling the haystack: pulmonary embolism in an emergency patient with cardiorespiratory manifestations［J］. Expert Systems With Applications, 2022, 189: 116066.
［45］邱景, 赵笑尘, 胡徐茜, 等. 大数据医疗时代的人工智能与患者个人隐私保护的技术方案研究［J］. 国外电子测量技术, 2025, 44(7): 294–300.
［46］Dutta J, Puthal D. Advancing eHealth in Society 5.0: a fuzzy logic and blockchain–enhanced framework for integrating IoMT, Edge, and Cloud with AI［J］. IEEE Access, 2024, 12: 195710–195730.

（上接第111页）

计［J］. 船舶工程, 2025, 47(9): 202.
［21］侯泽海, 郭连波, 汪威良, 等. 激光诱导击穿光谱技术在生物医学中的研究进展［J］. 激光与光电子学进展, 2023, 60(24): 42–54.
［22］Marcos–Martinez D, Ayala J A, Izquierdo–Hornillos R C, et al. Identification and discrimination of bacterial strains by laser induced breakdown spectroscopy and neural networks［J］. Talanta, 2011, 84(3): 730–737.
［23］Khan M N, Wang Q, Idrees B S, et al. Discrimination of melanoma using laser–induced breakdown spectroscopy conducted on human tissue samples［J/OL］. Journal of Spectroscopy, 2020［2025–11–09］. https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1155/2020/8826243.
［24］Teng G, Wang Q, Yang H, et al. Pathological identification of brain tumors based on the characteristics of molecular fragments generated by laser ablation combined with a spiking neural network［J］. Biomedical Optics Express, 2020, 11(8): 4276–4289.
［25］Chen Y, Yin P, Peng Z, et al. High–throughput recognition of tumor cells using label–free elemental characteristics based on interpretable deep learning［J］. Analytical Chemistry, 2022, 94(7): 3158–3164.
［26］Sarpe C, Ciobotea E R, Morscher C B, et al. Identification of tumor tissue in thin pathological samples via femtosecond laser–induced breakdown spectroscopy and machine learning［J］. Scientific Reports, 2023, 13: 9250.
［27］Lin J, Li Y, Lin X, et al. Fusion of laser–induced breakdown spectroscopy technology and deep learning: a new method to identify malignant and benign lung tumors with high accuracy［J］. Analytical and Bioanalytical Chemistry, 2024, 416: 993–1000.
［28］Chen X, Zhang Y, Li X, et al. Diagnosis and staging of multiple myeloma using serum–based laser–induced breakdown spectroscopy combined with machine learning methods［J］. Biomedical Optics Express, 2021, 12(6): 3584–3596.
［29］Lin J, Li Y, Lin X, et al. Decision–level data fusion based on laser–induced breakdown and Raman spectroscopy: a study of bimodal spectroscopy for diagnosis of lung cancer at different stages［J］. Talanta, 2024, 275: 126194.
［30］Sun H, Yang C, Chen Y, et al. Construction of classification models for pathogenic bacteria based on LIBS combined with different machine learning algorithms［J］. Applied Optics, 2022, 61(21): 6177–6185.
［31］Arabi D, Hamdy O, Mohamed S M M, et al. Discriminating two bacteria via laser–induced breakdown spectroscopy and artificial neural network［J］. AMB Express, 2023, 13: 61.
［32］Sun D, Yang F, Su M, et al. Quantitative analysis of Cu in Traditional Chinese medicinal materials using laser - induced breakdown spectroscopy［J］. Microwave and Optical Technology Letters, 2023, 65(5): 1200–1207.
［33］Zhang J, Li X, Yan Y, et al. Recognition of Radix Bupleuri origin using laser–induced breakdown spectroscopy (LIBS) combined with deep learning and machine learning algorithms［J］. Microchemical Journal, 2024, 207: 111946.
［34］Yao L, Li J, Liu Y, et al. Traceability of cold medications with similar ingredients based on laser–induced breakdown spectroscopy［J］. Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 2024, 39(3): 735–742.
［35］Ren L, Wang F, Zhang Y, et al. Rapid identification of Radix Astragali by data fusion of laser–induced breakdown spectroscopy and Raman spectroscopy coupled with deep learning［J］. Talanta, 2025, 282: 127016.