郑志敏,杨金忠,迭庆杞,等.指纹图谱技术研究现状及其在固废领域的应用 [J]. 中国环境科学, 2025,45(8):4410-4422.
Zheng Z M,Yang J Z, Die Q Q, et al. Research status of fingerprinting and its application in the field of solid waste [J]. China Environmental Science, 2025,45(8):4410-4422.

指纹图谱技术研究现状及其在固废领域的应用

郑志敏,杨金忠*,迭庆杞,王 菲,黄瑞潇,杨玉飞,黄启飞 (中国环境科学研究院,环境基准标准与风险管控全国重点实验室,固体废物污染控制技术研究所,北京 100012)

摘要：为了解指纹图谱技术研究现状并明确其在固废领域的应用现状与前景,依托 Web of Science(WOS)核心数据库对 2010~2024 年相关文献进行检索和分析.发文量分析得知指纹图谱技术依然保持着较高的研究热度,学科聚类分析得知其应用广泛并且近几年在环境领域研究热度也较高;关键词聚类发现研究热点集中在 4 个方面:Recognition(识别)、ChemoInformatics(化学信息学)、Deep Learning(深度学习)以及 Model(模型).对固废领域文献进行关键词共现,得知其关于使用指纹图谱技术进行固废管理的研究较少,主要集中在后处理阶段.进行文献调研,对指纹图谱的数据获取技术、特征提取技术、特征呈现形式进行总结,提出固废领域应用新兴技术的可能性以及未来发展展望.

关键词：指纹；图谱；固体废物；雷达图；配分曲线；CiteSpace
中图分类号：X705,X132 **文献标识码**：A **文章编号**：1000-6923(2025)08-4410-13

Research status of fingerprinting and its application in the field of solid waste. ZHENG Zhi-min,YANG Jin-zhong*, DIE Qing-qi, WANG Fei, HUANG Rui-xiao, YANG Yu-fei, HUANG Qi-fei (State Key Laboratory of Environmental Criteria and Risk Assessment, Research Institute of Solid Waste Management, Chinese Research Academy of Environmental Sciences, Beijing 100012, China). *China Environmental Science*, 2025,45(8)：4410~4422

Abstract：In order to understand the current research status of fingerprinting technology and clarify its application and prospects in the field of solid waste, the Web of Science (WOS) core database: Science Citation Index Expanded (SCI-Expanded) was relied upon to retrieve and analyze relevant literature from 2010 to 2024. It was found that the number of publications indicates that fingerprinting technology still maintains a high level of research interest. The subject clustering analysis shows that its application is extensive and its research interest in the environmental field has also been high in recent years. Keyword clustering reveals that the research hotspots are concentrated in four aspects: Recognition, ChemoInformatics, Deep learning, and Model. Keyword co-occurrence analysis of literature in the field of solid waste shows that there are few studies on the use of fingerprinting technology for solid waste management, mainly focusing on the post-processing stage. Through literature research, the data acquisition technology, feature extraction technology, and feature presentation forms of fingerprinting were summarized, and the possibility of applying emerging technologies in the field of solid waste and future development prospects were proposed.

Key words：fingerprinting；spectrogram；solid waste；radar chart；distribution curve；CiteSpace

近年来,国内外固废/危废的非法倾倒与转移案件频发,增加了潜在环境污染风险[1].我国固废种类多、产量大、特性复杂,若属性或种类不明的固废非法倾倒或不当处置,会对周边土壤、水体等环境介质造成较大污染,威胁人类健康.由于适应我国国情的固废风险防控理论研究基础薄弱,亟需借助新兴技术手段(如指纹图谱技术),在固废属性识别和种类精准溯源等方面开展研究,为有效防控固废风险奠定理论基础.

指纹图谱技术是利用已知样本的特征指标及其描述(指纹)开展识别或鉴别未知样本活动的技术手段.指纹图谱技术最早源于犯罪学和法医学,依据每人指纹微小结构差异,用于鉴定不同个体特征的技术.随着检测技术发展,指纹图谱技术逐步应用于生命体和非生命体识别领域.指纹图谱技术是通过现代分析手段获取样本的颜色、气味、粒度、结构、色谱、光谱、元素或物相组成等数据,将数据经统计学、模式识别等多种方法降维、特征提取处理,形成能够代表该类样本特征的可视化图谱,如雷达图、配分曲线等.指纹图谱一般具有整体性、特征性和稳定

收稿日期：2025-01-20
基金项目：化工冶金行业存量危废精准溯源与风险管控技术(共性关键技术类)(2024YFC3906401)
* 责任作者, 副研究员, yang.jinzhong@craes.org.cn.

性的特点,反应了样品的代表性特征、有别于其他类别的专属特征以及不同条件下相对稳定性的特征.通过比对样本图谱与已知的标准指纹图谱间的异同,从而能够对样本质量、综合性能等进行整体描述、鉴别和评价[2].因此,指纹图谱技术在中药种类识别与产地溯源、食品品质分析与质量控制、矿物种类鉴别与溯源分析等多个领域都有广泛的应用[3-6].

当前,固废领域指纹图谱的相关研究较少.美国环保署提出了危废指纹的概念[7],在处置单位接收入场的危废时,通过现场检测或定性分析方法快速识别危废的简单指标(即指纹指标:颜色、形态、pH值、水反应性、氰化物/硫化物等),与已知危废比对,以便快速判别入场危废是否为所要求的目标危废,但是主要聚焦于简单指标组合的层面,难以适应我国固废种类繁多、成分复杂的现状;此外,其仅应用于固废接收过程的场景,尚难达到固废种类识别和精准溯源的程度.我国固废指纹图谱的研究工作尚处于起步阶段,例如,中国环境科学研究院提出了基于统计熵的固废指纹特征构建方法[8],量化固废指标作为其指纹特征的可行性;中南大学构建了重金属危废物相特征信息数据库[9],系统归纳出重金属危废中的共性物相.总之,固废指纹图谱是用于构建固废的特征指标及其描述的组合,实际应用过程中可根据图谱特征与差异, 指导选择特定的处理处置技术[10]、追踪不明固废来源, 有利于防控环境风险、澄清非法倾倒案件中的权责关系[11].针对现有固废指纹图谱研究不足、固废风险精细化防控需求突出的矛盾, 本文通过对国内外发表论文进行文献计量与文献调研, 总结了其他领域指纹图谱技术的开发和应用现状, 梳理固废领域指纹图谱技术应用及发展, 对开发适应我国固废领域的指纹图谱技术、提出针对性的利用处置措施、精细化防控固废风险具有重要意义.

1　数据与方法

1.1　数据来源

本研究数据来源于 Web of science(WOS)核心数据库:Science Citation Index Expanded (SCI-Expanded).数据来源根据研究内容分两部分:

1.1.1　指纹图谱技术现状研究　WOS 数据库检索策略为 “TS=(fingerprint OR fingerprinting)”,文献类型选择“Article”,文献时间取 2010~2024 年,检索日期为 2025 年 1 月 2 日,共计 52649 篇文献,其中 WOS 类别为 Environmental Sciences 的文章为 2794 篇, WOS 内置功能导出发文量数据进行分析;将 52649 篇文献进行“高被引论文”精炼,共计 265 篇文献.

1.1.2　固废领域应用情况研究　WOS 数据库检索策略为:“TS=((fingerprint OR fingerprinting) AND solid waste)”,文献类型设置为“Article”,研究方向为“Environmental Sciences Ecology”, 文献时间取 2010~2024 年,检索时间为 2025 年 1 月 2 日,共计 81 篇文献.

1.2　研究方法

采用 Chen 等[12]开发的 CiteSpace 软件(6.4.R1)对上述检索得到的文献进行可视化分析.使用 MATLAB2023a 对发文量进行绘图统计分析;指纹图谱数据获取技术手段、特征提取方法、特征呈现形式通过进行文献调研总结.

2　结果与分析

2.1　文献计量研究结果

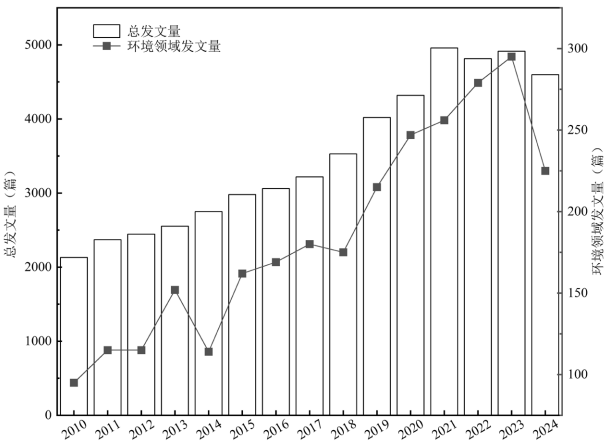


图 1　指纹图谱技术总发文量及其在环境领域发文量分析

Fig.1　Analysis of the total publications of fingerprinting and its publication volume in the environmental field

2.1.1　发文量分析　根据文献计量学理论,文献数量的年代分布统计能够在一定程度上反映该领域研究水平以及发展的程度[13].据检索结果,近 15a 的指纹图谱文献数量年度分布情况如图 1 所示.从 2010 年始,指纹图谱技术已经备受关注,一直到 2021 年,年发文量一直呈增长趋势.目前发文量最高的年份为 2021 年,为 4959 篇.环境领域发文总体呈现增

长态势,发文量最高的年份为 2023 年,共计 295 篇.这说明指纹图谱技术依然保持者较高的研究热度,在环境领域的应用热度也较高.

2.1.2 指纹图谱技术主要研究领域 高被引论文导入 CiteSpace,进行指纹图谱技术研究领域分析,如图 2 所示.指纹图谱技术主要应用于 Multidisciplinary sciences(多学科交叉科学),其中包含化学、材料学、物理学等,与其它学科交叉融合使用指纹图谱技术;根据共现结果高亮节点年轮可知,目前指纹图谱技术研究热度较高的领域有 Computer Science(计算机科学),Chemistry, Multidisciplinary(多学科化学),Environmental sciences(环境科学).

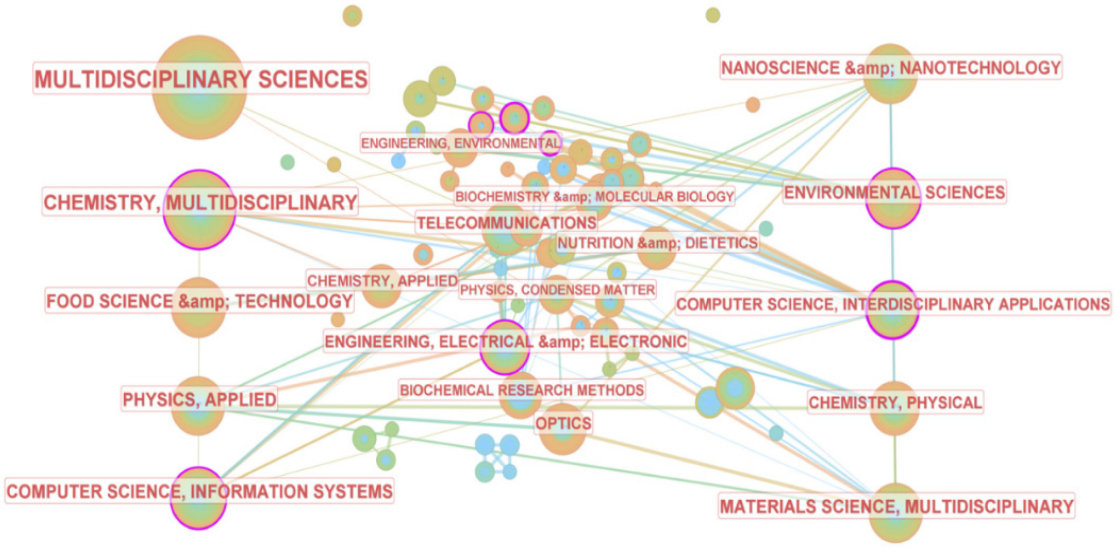


图 2 指纹图谱研究领域共现

Fig.2 Research fields co-occurrence of fingerprinting

指纹图谱在各个领域应用研究侧重点不同.Multidisciplinary sciences 的核心特征为方法论的整合,指纹图谱技术通过融合化学光谱分析、材料表征技术等,构建跨学科数据库,如在中药质量控制中,白钢等[14-15]将化学、光谱学指纹图谱与药效学数据结合,通过多变量统计验证成分-疗效关联性,体现化学与生物学的交叉;Computer Science 侧重于算法驱动模型优化,基于高维数据特征与模式识别等,提升图谱的解析效率,如在中药图谱评价的相似度评价系统中,通过计算机软件结合数学方法优化特征识别模型,用于精准评价中药材质量[16];Chemistry Multidisciplinary 则侧重于成分标准化与溯源,通过化学指纹图谱建立物质成分与来源的定量关联,在食品科学中,将元素或者化合物的含量作为食品标准样品的化学指纹图谱[11],进行质量评价、产地溯源;Environmental sciences 的核心特征在于污染源解析与风险预警,利用指纹图谱技术识别污染的特征标志物,结合空间分析定位污染源[17-18].

鉴于指纹图谱技术在其它领域应用的实践,固废领域也有应用指纹图谱进行分类及溯源判别的潜力.例如,开发固废指纹特征识别方法,形成不同类别固废指纹特征,支撑建立固废种类、指纹特征、固废所处情景和风险值间的关联网络,有利于固废风险精细化管控.

2.1.3 指纹图谱技术主要研究主题 关键词的聚类分析可以一定程度上反映指纹图谱技术研究主题分布情况.将关键词进行共现聚类,根据聚类类别关键词数量过滤得到 4 个主要聚类,如图 3 所示.

#0Recognition(识别)聚类中研究主题包括 carbon(碳)、graphene(石墨烯)、identify/recognition(识别),反映指纹图谱技术的识别应用.Lazar 等[5]研究了石墨型、吡咯型、吡啶型和化学吸附氮在氮掺杂石墨烯中的光谱特征,提供了清晰的光谱指纹,用于识别氮掺杂石墨烯中不同化学形态的氮.

#1ChemoInformatics(化学信息学)聚类中,研究主题包括 prediction(预测)、chemistry(化学)、similarity search(相似性搜索)、data fusion(数据融

合)、machine learning(机器学习),反映指纹图谱技术应用中,获取样品物质化学信息数据后进行数据降维融合,结合机器学习等方法应用指纹图谱进行样品评价和预测.Cereto-Massagué 等[19]详细介绍了分子指纹图谱的药物预测等应用,依据 similarity search 降维与筛查便于指纹数据的管理,由此提取分子指纹特征,结合机器学习进行药物预测与发现.

#2Deep Learning(深度学习)聚类中,包含了 fingerprints(指纹图谱)、classification(分类)、feature extraction(特征提取)等主题,反映了指纹图谱技术中,利用深度学习进行指纹图谱的构建、指纹特征提取、利用构建图谱与深度学习模型进行分类等工作.Kearnes 等[20]利用深度学习构建分子图卷积,从分子图结构中提取原子和键性质等特征,补充了分子指纹着重强调分子结构的特定方面的信息缺失,使得模型能够更好地利用分子图结构的信息,用来代替传统机器学习应用中的指纹描述符.

#4Model(模型)聚类中,包含有 database(数据库)、assay interference(干扰测定)等主题,反映模型研究指向指纹图谱数据库的构建以及建立的指纹图谱模型稳定性的描述.杨金忠等[21]利用固废特征数据库,建立了单个固废特征的匹配函数,以及如铝浮渣等多个固废特征的交叉熵模型,开发了采用相似性模型进行未知固废的溯源方法.

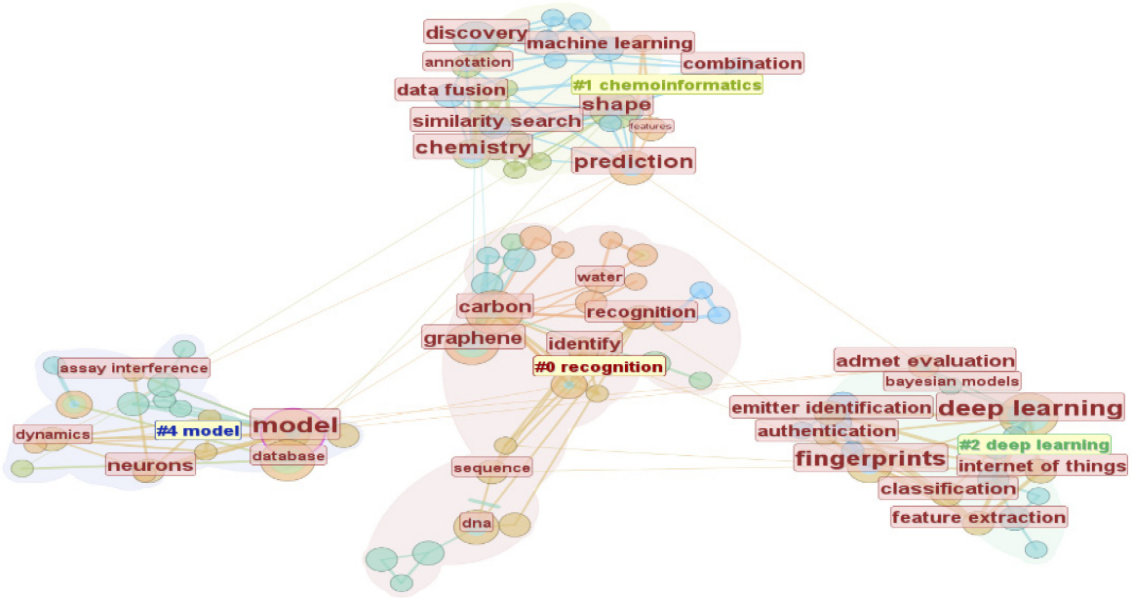


图 3　指纹图谱高被引论文关键词聚类

Fig.3　Keyword clustering of highly cited fingerprinting papers

2.1.4　固废领域应用情况分析　由关键词共现结果及出现频次可知,现有的指纹图谱技术在固废领域中的应用主要在 dibenzo p dioxins(二苯并二噁英)、municipal solid waste(城市固废)、identification(识别)、fly ash(飞灰)、combustion(燃烧)、behavior(行为),如图 4 所示.

结合文献计量与文献调研,指纹图谱在固废领域的研究围绕着焚烧、填埋场景,针对固废焚烧场景研究集中在二噁英的产生[22-25]、污染物的迁移转化行为[26-29]方面;固废填埋场景的渗滤液中污染物赋存特征[30-34]、污染物识别和迁移示踪[30-34]等.J. Van Caneghem 等[23]将不同固废按照一定比例混合投入流化床燃烧器中,对输入固废和输出的飞灰、烟气等进行采样分析,确定了出入物料的 17 种多氯二苯并对二噁英/呋喃(PCDD/Fs)的含量,获得不同阶段的 PCDD/F 指纹特征,通过指纹的比较,实现 PCDD/Fs 释放的溯源探究.Qiu 等[30]采用超高效液相色谱-混合四极杆轨道阱质谱(UPLC Orbitrap MS/ MS),获取了 22 个垃圾填埋场渗滤液样品中溶解性有机物(DOM)的分子信息,独特的 DOM 信息可作为指示填埋场固废的年龄及成分的指纹特征,可进一步应用于环境监测场景,用于追踪填埋场渗漏途径.这表明固废指纹图谱一般是针对处置场景特征,通过测定污染物的类型与含量,结合数据分析手段,形成符合

特定场景需求的图谱.

为了支撑固废利用处置的场景以及风险防控需求,固废指纹技术研究目前重点聚焦于梳理我国典型固废特征阶段.固废种类繁多、特性复杂、差异较大,科学合理的分类和提取指纹特征至关重要.已有研究通过解析我国典型工业固废产生过程,发现相似工艺产生的固废具有共性,建立了典型工业行业的共性产生源分类体系[40],即:(1)可依据含水率、物理形态、表观形貌等简易指标,将典型行业固废分为七个共性产生源类别固废:固相热处理渣、湿法浸出渣、反应残液、精馏蒸馏残渣、收尘灰、蒸发结晶废盐、废水处理污泥等;(2)进一步依据物相组成、元素或污染物含量、污染物浸出浓度等精细化指标,将每类共性产生源固废细分出具体固废种类;(3)用于划分不同类别的指标组合,即每种固废的指纹,并据此建立了典型工业固废分级分类体系及其指纹特征数据集.此外,林璋等[9]在数据科学和化学交叉视域下系统深入地分析重金属危废的物相组成特征,归纳出重金属危废中的共性物相,并构建了有色冶炼行业重金属危废种类与重金属元素、物相的映射图谱.上述研究推动了固废领域指纹图谱技术开发与应用.

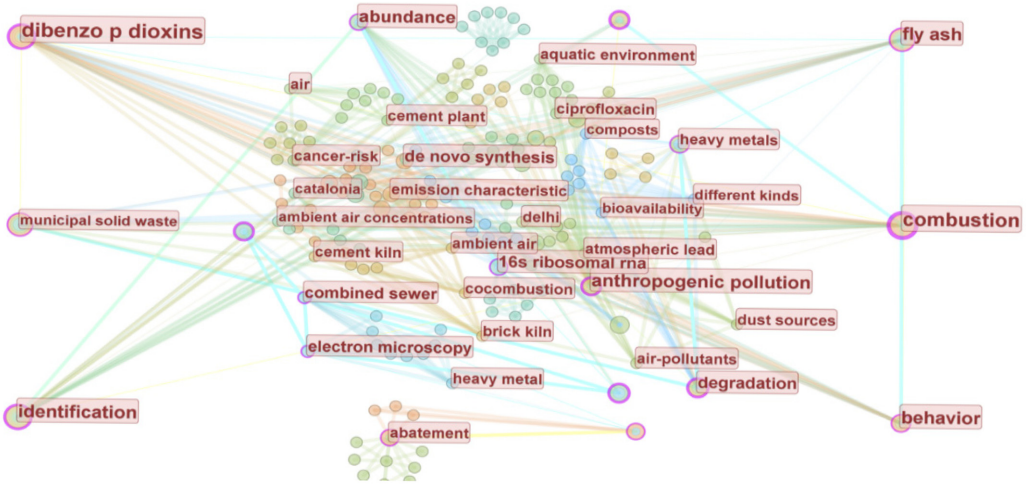


图 4 固废领域指纹图谱技术关键词共现

Fig.4 Co-occurrence of keywords of fingerprinting in the field of solid waste

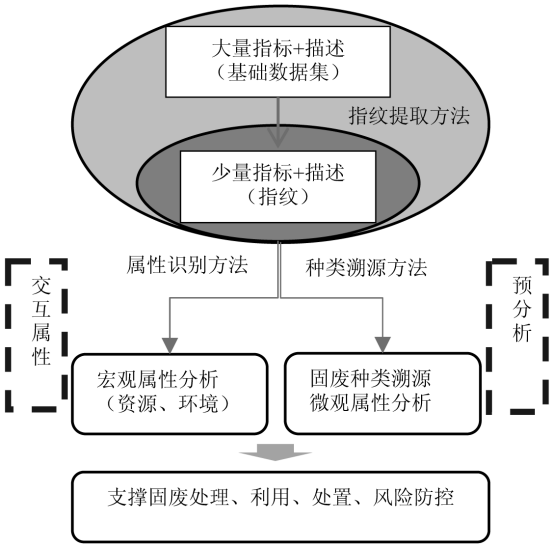


图 5 固废指纹图谱技术开发与应用示意

Fig.5 Diagram of solid waste fingerprinting development and application

综上,固废领域指纹图谱技术开发与应用主要涉及以下两方面,一方面是指纹图谱构建:(1)基础数据获取,形成大量指标及其描述的数据集;(2)依据数据特征,开发针对性的降维等指纹特征提取方法,形成少量指标及其描述的组合,即指纹;(3)开发指纹的适当可视化形式,即指纹图谱.另一方面是指纹图谱技术的应用:(1)基于固废指纹特征,开发固废属性识别方法,建立当前技术经济条件下固废的资源、环境交互属性[41];(2)梳理固废在多场景下的变化特征,建立动态的固废指纹图谱,开发固废种类溯源与识别技术[7],构建基于动态指纹图谱的固废种类溯源与风险预测网络.固废指纹图谱技术开发与应用示意流程如图 5 所示.

根据文献调研及分析结果,以及指纹图谱技术在固废领域的应用研究,构建指纹图谱是首要步骤.指纹图谱的构建主要分为指纹图谱基础数据获取、

指纹特征提取方法、图谱可视化方式三个部分.为更好地阐述指纹图谱技术开发的流程与原理,明确在固废领域应用的可能性,以下将对此三个部分进行简要概述.

2.2　指纹图谱数据获取及其技术手段

2.2.1　光谱技术　光谱技术种类多、信息全面且有良好的应用基础,在构建指纹图谱中应用广泛,药学、食品科学、矿物学、地质学、环境领域都有应用.表 1 为常见的几种应用在指纹特征数据获取中的光谱技术.

表 1　指纹图谱数据获取常用光谱技术

Table 1　Common spectroscopic techniques for fingerprinting data acquisition

光谱技术	基本特点	不同领域应用情况	参考文献
X 射线衍射法(XRD)	对晶体结构物质进行物相的定性、定量分析,方便快捷、对样品无污染	中药、食品评价/鉴别/溯源 矿物鉴定 固废鉴别溯源	[36−38]
X 射线荧光光谱(XRF)	进行 F−U 多元素的定性、定量分析,制样简单、分析速度快	中药、食品评价/鉴别/溯源 矿物鉴定 固废鉴别溯源	[45−47]
激光诱导击穿光谱(LIBS)	目前技术发展为全元素的定性分析,样品处理少、实时分析、速度快	中药、食品评价/鉴别/溯源 地质调查/矿物鉴定 固废识别分析	[48−50]
红外光谱(IR)	含氢基团光谱信息,分析物理性质及蛋白质等化学成分,速度快、无损	中药、食品评价/鉴别/溯源	[51−52]
三维荧光光谱(EEM)	不同荧光结构的荧光信息,信息丰度大、检测速度快、对样品无污染、检测样品形态受限小	水体 DOM 识别溯源 固体表面有机污染物分析 食品质量评价	[53−55]

在固废领域中,现有研究应用 XRD、XRF 较多,LIBS 则应用较少.黄瑞潇等[45]收集利用 XRF 检测数据,提取黄河流域典型固废的指纹特征进行识别验证,最终对未知固废的识别结果准确率达到 85.3%;徐思琪等[44]利用 XRD 对铝冶炼过程中产生的固废进行了物相组成检测,系统分析了铝冶炼企业固废指纹特征,提出β-氧化铝可作为识别铝灰工艺来源的指纹特征;Mohammed 等[56]利用 LIBS 进行微塑料的原位识别, 提出 C/H 比可作为识别塑料的重要指纹特征.LIBS 是新兴的光谱检测手段,但由于其基体效应,即不同类型的样品由于其物理化学特性的不同,会导致分析时目标元素的观测光谱强度响应不一致,破坏分析时 LIBS 光谱强度与元素浓度之间的线性映射关系[57],从而难以做到元素定量分析;近年来国内有研究致力于消除 LIBS 基体效应,并且取得了良好的效果[58];关于使用 LIBS 进行固废中元素的定量分析研究也逐步兴起[59].后续可利用 LIBS 快速、可便携等特点,实现固废样品原位检测.现如今环境领域关于 EEM 的研究集中在水体 DOM,关于固体表面三维荧光(SPF−EEM)的研究较少.EEM 对于有机污染物的响应灵敏,利用其测定固废的特征有机污染物具有一定的可行性.将新兴技术引入固废领域,对于固废的识别、分类、溯源研究具有重大意义.

2.2.2　色谱技术　色谱技术具有高效分离和定性、定量分析的能力,进行有机化合物的检测和分离.常用获取指纹图谱数据的色谱法有高效液相色谱(HPLC)、气相色谱(GC)等,其中 GC 一般与质谱联用(GC−MS),用以检测样品挥发性或半挥发有机物.色谱技术主要运用食品、药材的鉴别与溯源研究[51−53],在矿物学等需要无机物分析的领域中应用较少.

在固废领域中,其主要用于样品特征污染物检测,且大部分的测定都是运用 GC−MS.如牛姗姗[63]利用 GC−MS 测定了固废中 64 种半挥发性有机物、梁柳玲等[64]利用 GC−MS 测定废酸油渣中的 16 种多环芳烃;李唯实等[65]利用 GC−MS 对热处理后的农药废盐进行残留物的检测,进行农药废盐热处理适用性研究,得出废盐热处理与化工产品的 VOCs 排放特征相似的结论.由于其检测精度以及固废本身性质的限制,目前关于利用色谱技术获取固废指纹特征数据的研究欠缺,未来可使用高精度、高效的色谱法,如 UPLC Orbitrap MS/ MS 等,进行固废特征

污染物的测定.

2.2.3 其它主流方法 电感耦合等离子体质谱(ICP-MS)是一种将电感耦合等离子体(ICP)作为离子源,与质谱(MS)结合的无机多元素分析技术,能够提供样品中元素的定性和定量信息,具有高灵敏度、宽动态线性范围、多元素同时分析能力以及分析速度快的优点,在材料学[66]、食品[67]、中药[68]的指纹图谱构建中都有应用.在固废领域,Li 等[40]收集六家冶炼厂的 30 个固废样本,并使用 ICP-MS 检测样本重金属浓度,结合其它检测结果提出基于共性产生源的固废分类方法,为固废指纹图谱建设提供基础;徐思琪等[44]利用 ICP-MS 进行铝灰的浸出毒性检测,进行了铝灰的环境风险分析;关于利用 ICP-MS 构建固废指纹图谱的研究较少,但是基于固废性质以及 ICP-MS 的高灵敏度、多元素检测的特性,根据不同固废的元素特征,可以利用其构建特征元素如稀土元素、重金属元素的配分曲线,形成固废指纹图谱.

电子鼻技术是随着近些年模式识别技术的发展而兴起的计算机辅助传感器阵列的技术[69,70],基于电子鼻的气味指纹图谱[71],在环境监测[72],医疗领域[73]等都有应用.气味指纹图谱的建立是基于传感器阵列对不同气体响应电位值的差异,将电位值进行转化,可以将电位值比值曲线以及雷达图作为指纹图谱的呈现形式.在环境领域中,郭薇等[74]利用电子鼻构建某处污水处理厂的气味指纹图谱,结合 GC-MS 得出污水厂的气味指纹与其挥发性芳香烃的组成、含量水平呈现自然对数关系.电子鼻的检测物质是挥发性的化合物,对于有机物含量较高、有特殊气味的固废如农药废盐等,可以考虑使用其构建固废气味指纹图谱.

傅里叶变换离子回旋共振质谱(FT-ICR MS)是一种基于离子在磁场中回旋共振现象的质谱技术,具有超高分辨率和精准分子鉴定能力,检测物质覆盖全面,广泛应用于痕量复杂混合物中物质组成结构表征与非靶向全面筛查[75,76],其检测高精细度与宽动态范围对于复杂有机物的指纹分析具有重要意义.在环境领域中,He 等[77]使用 FT-ICR MS 对 67 个 DOM 样品的分子组成进行了表征,发现人类活动对不同生态系统 DOM 的分子组成和分子参数造成显著差异,如富营养化湖泊中 DOM 的 S 和 N 杂原子含量较高等,并提出使用 FT-ICR MS 开发全面 DOM 分子指纹数据库的设想.在固废领域中,垃圾渗滤液中 DOM 分子组成复杂、差异巨大,若利用 FT-ICR MS 对渗滤液中有机物进行筛查和表征,并且构建垃圾渗滤液 DOM 分子指纹图谱,对于高效垃圾处理技术的研发以及污染溯源具有推进作用[78];FT-ICR MS 的非靶向筛查能够对固废中新污染物如全氟化合物、PCDD/Fs 等进行高效识别与解析,对固废环境行为与风险预测、指纹图谱完善具有重大意义.

2.3 指纹特征提取方法

通过不同技术手段采集数据后,需要对采集的数据进行处理,经过降维、去噪、特征提取去掉冗杂信息之后,可以初步构建指纹图谱.数据降维的方法主要包括化学模式识别及统计学方法.

2.3.1 化学模式识别 化学模式识别的核心在于通过算法处理多变量数据,以揭示样本之间的关系或区分不同类别的样本,用于数据降维、分类、聚类和特征提取[79].可分为无监督模式识别和有监督模式识别.其中,无监督模式识别一般用于探索性分析及数据初步降维、提取,在指纹图谱构建中一般需要二者结合,进行进一步的指纹特征识别与提取.

无监督模式识别是在未知样本类别的基础上,依据数据本身相似性进行分类、聚类,解释数据结构,主要包括主成分分析(PCA)、聚类分析(CA)等.PCA 原理是利用正交变换把一系列可能线性相关的变量转换为一组线性不相关的新变量即主成分,提取数据的主要特征分量,用于高维数据降维以排除重叠信息和噪声的干扰[80].CA 用于识别具有相似特征的样本,识别和删除外围观察值,减少数据维数并验证数据集中是否存在样本;CA 对数据的噪声特别敏感,因此,数据在进行 CA 前需要经过 PCA 以减少误差[81].

有监督模式识别法是在已知样本类别的基础上,通过训练、建立模型,对未知类别的样本进行分类或预测并且给出分类依据,根据不同数据特征、不同模型精度选择模型[82],一般分为分类分析与回归分析两类,分类分析主要针对离散数据,分析预测数据所属的类别.在固废领域中,关于固废特性的数据呈现的基本都是离散状态,且指纹图谱技术的应用主要是针对样本分类,故采用分类分析较多.常用方法如表 2 所示.

表 2　常用监督模式识别方法

Table 2　Common supervised pattern recognition methods

提取技术	特点	参考文献
偏最小二乘判别分析(PLS-DA)	适用于多重共线性问题,进行高维数据降维并且拟合模型,结合变量投影重要性分析,确定特征因子,能进行判定、预测、分析;对异常值敏感	[67,80]
K 邻近(KNN)	基于样本间距离进行分类,K 值的选取对模型的分类性能影响很大	[83]
随机森林(RF)	适用于高维、大样本数据的训练与拟合,无需无监督模式识别降噪,普遍用于药材、食品的溯源研究;对于简单线性问题可能会过拟合	[84]
支持向量机(SVM)	适用于小样本、高维度、非线性数据的训练与拟合,对于此类样本预测准确率高,对大样本数据拟合效果不佳	[85]

2.3.2　基于统计学的提取方法　由于固废数据复杂多样、数据可用性不足,有学者开发了基于统计学原理的固废指纹特征提取方法,杨玉飞等[86]提出了一种基于秩的固废指纹特征提取方法,通过计算指纹因子在特定行业的秩来筛选有效因子,并构建测试组以评估其对固废分类的贡献,最终确定最佳的指纹因子组合;杨金忠等[8]采用统计熵来表征固废数值型指标的不确定性或信息量,统计熵越大,表示该指标的不确定性越高,进一步筛选出更适合作为区分不同固废的特征.通过计算统计熵的相对率,并与预设判定值比较,可以判断一个指标是否适合作为固废的指纹指标;黄瑞潇等[45]运用 Kruskal-Wallis 检验排除冗杂信息,利用 Fisher 判别方法比较样本 Wilks'Lamba 值,提取黄河流域典型固废的指纹特征,对不明来源固废种类识别提供方法支撑.

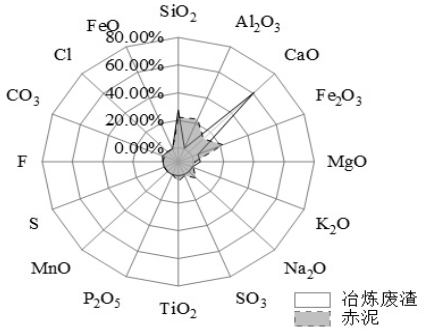
2.4　指纹特征呈现形式

在数据获取、降维等特征提取工作之后,需要依据指纹特征数据类别差异,通过一定的可视化形式直观呈现.常见的呈现形式如表 3、图 6 所示.在固废领域,黄瑞潇等[45]利用雷达图表征不同种类固废的物相、元素含量,构成特定固废的指纹图谱,如图 6(a);李唯实等[65]将农药废盐中挥发性有机物种类及浓度以柱状图形式呈现,如图 6(b);李烃等[87]将 XRD 去噪后的平均图谱作为标准铁矿样品的指纹图谱,进行铁矿固废属性研究,如图 6(c);利用元素配分曲线作为指纹特征图谱的研究主要集中在食品、矿物学等领域中,如李辉等[88]收集不同河流沉积物中稀土元素含量,归一化后绘制稀土元素配分曲线,用于黄海沉积物物源判别,如图 6(d).此思路可以运用到固废领域中,进行未知固废的分类及溯源.

表 3　常见指纹特征呈现形式

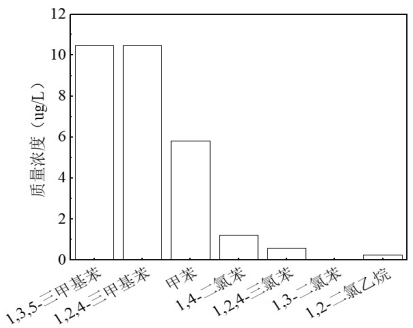
Table 3　Common forms of fingerprinting feature presentation

呈现形式	特征信息	应用情况	参考文献
雷达图	雷达图螺旋中心的位置、脊线的分布	固废中物相的种类与含量;中药粉末不同的物理性质特征及定义参数大小;电子鼻气味指纹图谱	[45,71,80]
柱状图	样品中物质种类和相对含量	固废中特征污染物种类及含量;中药样品不同化学成分含量柱状堆积图	[65,89]
光谱/色谱分析图谱	光谱/色谱图特征峰位置、相对强度	XRD、XRF、NIR 等去噪归一、平均后的分析图谱	[42,46,52]
元素配分曲线	元素的相对含量、曲线分段倾角作为指纹特征	利用样品矿物/稀土/重金属等元素种类及含量归一化处理,绘制折线图,用于中药/食品鉴别、污染物溯源	[88,90-91]



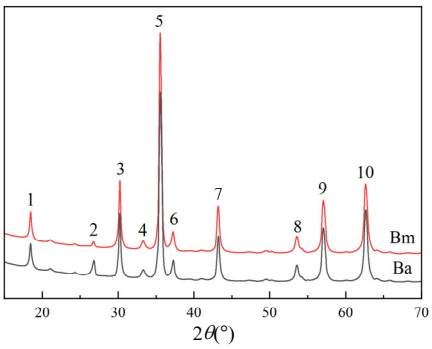
(a)冶炼废渣/赤泥化合物及相对含量雷达图

数据来源于黄瑞潇等[45]



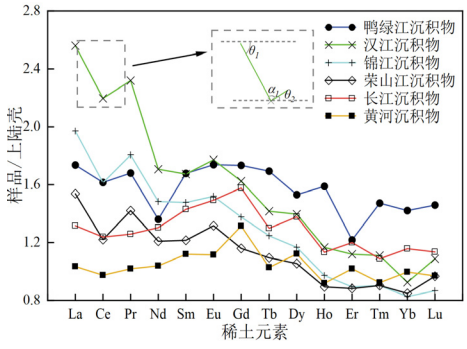
(b)废盐热解过程不同挥发有机物含量柱状图

数据来源于李唯实等[65]



(c)铁矿样 XRD 平均数(Bm)/中位数(Ba)图谱

数据来源于李烃等[87]



(d)不同河流沉积物中稀土元素配分曲线

数据来源于李辉等[88]

图 6 四种典型指纹特征呈现形式

Fig.6 Four typical forms of fingerprinting feature presentation

3 结论与展望

3.1 指纹图谱技术在近 5 年研究热度较高,在中药、食品、矿物等多学科领域已形成了部分研究成果,为样本质量评价与种类溯源提供了重要依据;指纹图谱技术能够明确固废的指纹特征,有利于针对已知固废筛选利用处置技术、针对未知固废开展种类溯源与鉴定,在固废处理处置与风险防控领域具有良好应用前景.

3.2 固废领域应围绕基础数据获取、指纹特征识别与提取、图谱构建等方面开发指纹图谱技术.其中数据获取技术,LIBS 因其快速、全元素分析的特点,在固废领域有很大的应用潜力;根据固废本身的性质如气味,电子鼻技术可以补充和精细固废的气味特征,提高固废指纹图谱的完整性; FT-ICR MS 的高分辨率与高检测精度对于固废领域复杂痕量有机物的检测与指纹图谱构建等具有重大应用意义.固废指纹特征提取方法主要围绕着统计学方法展开,未来应可以借助人工智能算法进行数据特征提取.图谱构建过程中,应开发元素配分曲线、雷达图、色谱/光谱图等可视化工具,同时开发其他可视化网络平台.

3.3 未来应围绕固废指纹特征技术开发与应用,引入多学科检测工具更加快速、精准的获取数据,完善多维基础数据, 除元素组成等基本特征外, 还应增加如污染物浸出指纹特征等多维数据, 形成固废领域大数据基础; 其次, 结合固废领域专家知识, 借鉴或开发算法,提升固废指纹特征识别效率与准确率; 再次,结合固废利用处置的实际场景,构建动态指纹图谱,形成固废指纹图谱—利用处置技术—风险评估综合网络平台,实现输入少量指标、环境参数,即可明确固废种类、属性、风险的目的,有效支撑我国固废利用处置与风险防控技术体系.

参考文献:

[1] Du L, Xu H, Zuo J. Status quo of illegal dumping research: way forward [J]. Journal of Environmental Management, 2021,290:112601.

[2] Ma D, Gulani V, Seiberlich N, et al. Magnetic resonance fingerprinting [J]. Nature, 2013,495(7440):187-192.

[3] Wu S, Zhang X, Zhou G, et al. Physical fingerprint transformation of herbal medicines powders using near-infrared spectroscopy [J]. Advanced Powder Technology, 2023,34(12):104244.

[4] Wang F, Gao Y, Wang H, et al. Analysis of volatile compounds and flavor fingerprint in Jingyuan lamb of different ages using gas chromatography–ion mobility spectrometry (GC–IMS) [J]. Meat Science, 2021,175:108449.

[5] Lazar P, Mach R, Otyepka M. Spectroscopic fingerprints of graphitic, pyrrolic, pyridinic, and chemisorbed nitrogen in N-doped graphene [J]. Journal of Physical Chemistry C, 2019,123(16):10695-10702.

[6] Van Caneghem J, Vandecasteele C. Characterisation of polycyclic aromatic hydrocarbons in flue gas and residues of a full scale fluidized bed combustor combusting non-hazardous industrial waste [J]. Waste Management, 2014,34(11):2407-2413.

[7] US Ecology Nevada. Waste analysis plan [R]. Nevada: US Ecology Nevada, 2022.

[8] 杨金忠,杨玉飞,王 菲,等.一种基于统计熵的固废指纹特征提取方法:中国, CN116089825A [P]. 2023-05-09.
Yang J Z, Yang Y F, Wang F, et al. A solid waste fingerprint feature extraction method based on statistical entropy: China, CN116089825A [P]. 2023-05-09.

[9] 林 乐,刘学明,梁彦杰,等.数据科学与化学交叉视域下的重金属危废物相分析 [J]. 化学进展, 2021,33(12):2163-2172.
Lin L, Liu X M, Liang Y J, et al. Phase analysis of heavy metal hazardous waste from the perspective of data science and chemistry [J]. Progress in Chemistry, 2021,33(12):2163-2172.

[10] Qiao J, Zhang H, Steier P, et al. An unknown source of reactor radionuclides in the baltic sea revealed by multi-isotope fingerprints [J]. Nature Communications, 2021,12(1):823.

[11] Thapa K, Vermeulen W J, Deutz P, et al. Transboundary movement of waste review: from binary towards a contextual framing [J]. Waste Management & Research: The Journal for a Sustainable Circular Economy, 2023,41(1):52-67.

[12] Chen C. CiteSpace II: detecting and visualizing emerging trends and transient patterns in scientific literature [J]. Journal of The American Society for Information Science and Technology, 2006,57(3):359-377.

[13] Fu L, Mao S, Chen F, et al. Graphene-based electrochemical sensors for antibiotic detection in water, food and soil: a scientometric analysis in CiteSpace (2011~2021) [J]. Chemosphere, 2022,297:134127.

[14] 白　钢,田　璐,丛龙飞,等.基于质量标志物(Q-Marker)"量效转换"的药材质量快速整合评价研究 [J]. 中草药, 2021,52(9):2527-2533.
Bai G, Tian L, Cong L F, et al. Rapid integrated quality evaluation of medicinal materials based on "dose-effect conversion" of quality marker (Q-Marker) [J]. Chinese Traditional and Herbal Drugs, 2021, 52(9):2527-2533.

[15] 白　钢,刘昌孝,张铁军,等.基于质量综合评价指数的药材品质快速评价 [J]. 中草药, 2021,52(2):313-320.
Bai, G., Liu, C. X., Zhang, T. J., et al. Rapid evaluation of medicinal material quality based on comprehensive quality evaluation index [J]. Chinese Traditional and Herbal Drugs, 2021,52(2):313-320.

[16] Zhang J, Yu X, Yang R, et al. Quality evaluation of lonicerae japonicae flos from different origins based on high‐performance liquid chromatography (HPLC) fingerprinting and multicomponent quantitative analysis combined with chemical pattern recognition [J]. Phytochemical Analysis, 2024,35(4):647-663.

[17] 赵　曦,陆克定,熊波文,等.华南四座固体废物综合处理产业园周边土壤重金属研究 [J]. 中国环境科学, 2021,41(3):1282-1292.
Zhao X, Lu K D, Xiong B W, et al. Soil heavy metals around four solid waste comprehensive treatment industrial parks in South China [J]. China Environmental Science, 2021,41(3):1282-1292.

[18] Ma W, Tai L, Qiao Z, et al. Contamination source apportionment and health risk assessment of heavy metals in soil around municipal solid waste incinerator: a case study in north China [J]. Science of the Total Environment, 2018,631-632:348-357.

[19] Cereto-Massagué A, Ojeda M J, Valls C, et al. Molecular fingerprint similarity search in virtual screening [J]. Methods, 2015,71:58-63.

[20] Kearnes S, McCloskey K, Berndl M, et al. Molecular graph convolutions: moving beyond fingerprints [J]. Journal of Computer-Aided Molecular Design, 2016,30(8):595-608.

[21] Yang J, Die Q, Tian L, et al. Similarity model by matching and cross entropy-driven methods to support tracing source of unknown waste [J]. Environmental Technology & Innovation, 2023,32:103327.

[22] Chen C C, Sen P K, Wu K. Robust permutation tests for homogeneity of fingerprint patterns of dioxin congener profiles [J]. Environmetrics, 2012,23(4):285-294.

[23] Van Caneghem J, Vermeulen I, Block C, et al. Destruction and formation of PCDD/fs in a fluidised bed combustor co-incinerating automotive shredder residue with refuse derived fuel and wastewater treatment sludge [J]. Journal of Hazardous Materials, 2012,207-208: 152-158.

[24] Ying Y, Ma Y, Wang X, et al. Incineration-source fingerprints and emission spectrums of dioxins with diagnostic application [J]. Environment International, 2024,188:108746.

[25] Lu S, Du Y, Yan J H, et al. Dioxins and their fingerprint in size-classified fly ash fractions from municipal solid waste incinerators in China—mechanical grate and fluidized bed units [J]. Journal of the Air and Waste Management Association, 2012,62(6):717-724.

[26] Fan Y, Ren M, Zhang H, et al. Levels and fingerprints of chlorinated aromatic hydrocarbons in fly ashes from the typical industrial thermal processes: implication for the co-formation mechanism [J]. Chemosphere, 2019,224:298-305.

[27] Li W, Li L, Wen Z, et al. Removal of dioxins from municipal solid waste incineration fly ash by low-temperature thermal treatment: laboratory simulation of degradation and ash discharge stages [J]. Waste Management, 2023,168:45-53.

[28] Sun J, Hu J, Zhu G, et al. PCDD/fs distribution characteristics and health risk assessment in fly ash discharged from MSWIs in China [J]. Ecotoxicology and Environmental Safety, 2017,139:83-88.

[29] Chang Y M, Fan W P, Dai W C, et al. Characteristics of PCDD/F content in fly ash discharged from municipal solid waste incinerators [J]. Journal of Hazardous Materials, 2011,192(2):521-529.

[30] Qiu J J, Lü F, Zhang H, et al. UPLC orbitrap MS/MS-based fingerprints of dissolved organic matter in waste leachate driven by waste age [J]. Journal of Hazardous Materials, 2020,383:121205.

[31] Melita M, Amalfitano S, Preziosi E, et al. Physiological profiling and functional diversity of groundwater microbial communities in a municipal solid waste landfill area [J]. Water, 2019,11(12):2624.

[32] Fang J, Lü F, Zhang H, et al. Odor compounds released from different zones of two adjacent waste treatment facilities: interactive influence and source identification [J]. Journal of the Air and Waste Management Association, 2015,65(12):1446-1455.

[33] Bordean D M, Pirvulescu L, Poiana M A, et al. An innovative approach to assess the ecotoxicological risks of soil exposed to solid waste [J]. Sustainability, 2021,13(11):6141.

[34] Van Der Sloot H A, Kosson D S, Van Zomeren A. Leaching, geochemical modelling and field verification of a municipal solid waste and a predominantly non-degradable waste landfill [J]. Waste Management, 2017,63:74-95.

[35] Coutinho M, Albuquerque M, Silva A P, et al. Long-time monitoring of polychlorinated dibenzo-p-dioxins and dibenzofurans over a decade in the ambient air of porto, Portugal [J]. Chemosphere, 2015,137:207-213.

[36] Gros M, Catalán N, Mas-Pla J, et al. Groundwater antibiotic pollution and its relationship with dissolved organic matter: identification and environmental implications [J]. Environmental Pollution, 2021,289: 117927.

[37] Lega M, Ferrara C, Persechino G, et al. Remote sensing in environmental police investigations: aerial platforms and an innovative application of thermography to detect several illegal activities [J]. Environmental Monitoring and Assessment, 2014,186(12):8291-8301.

[38] Ngo T H, Tsou H H, Chen Y F, et al. Sources identification of PCDD/fs in soil and atmospheric deposition in Taiwan [J]. Chemosphere,

2018,208:374−381.

[39] Thiombane M, Albanese S, Di Bonito M, et al. Source patterns and contamination level of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) in urban and rural areas of southern italian soils [J]. Environmental Geochemistry and Health, 2019,41(2):507−528.

[40] Li X, Yang Y, Die Q, et al. Characteristics of solid waste from common generation source in nonferrous smelting industry reveal a new classification method [J]. Heliyon, 2023,9(10):e20545.

[41] 黄文博,李金惠,曾现来.固体废物无害化精准定量评估及科学启示:以典型工业废物为例 [J]. 科学通报, 2022,67(7):685−696.
Huang W B, Li J H, Zeng X L. Precise quantitative assessment and scientific implications of solid waste harmless treatment: A case study of typical industrial waste [J]. Chinese Science Bulletin, 2022,67(7):685−696.

[42] 李 烃,陈朝方,林国生,等.X 射线粉末衍射技术在矿物鉴别中的应用进展 [J]. 冶金分析, 2023,43(7):11−20.
Li T, Chen C F, Lin G S, et al. Application progress of X−ray powder diffraction in mineral identification [J]. Metallurgical Analysis, 2023,43(7):11−20.

[43] 崔晓慧,陈 龙,刘义梅,等.基于 X 射线衍射指纹图谱鉴别龙骨 [J]. 中成药, 2016,38(3):624−629.
Cui X H, Chen L, Liu Y M, et al. Identification of Os Draconis based on X−ray diffraction fingerprint [J]. Chinese Traditional Patent Medicine, 2016,38(3):624−629.

[44] 徐思琪,王雪娇,陈 平,等.我国铝冶炼企业固体废物的指纹特征及毒性 [J]. 环境科学研究, 2021,34(9):2248−2255.
Xu S Q, Wang X J, Chen P, et al. Fingerprint characteristics and toxicity of solid waste from aluminum smelting enterprises in China [J]. Research of Environmental Sciences, 2021,34(9):2248−2255.

[45] 黄瑞潇,杨玉飞,李海涛,等.黄河流域典型固体废物的指纹特征识别 [J]. 环境科学研究, 2024,37(8):1810−1818.
Huang R X, Yang Y F, Li H T, et al. Fingerprint identification of typical solid waste in the Yellow River Basin [J]. Research of Environmental Sciences, 2024,37(8):1810−1818.

[46] 孙 琳.基于 XRF 技术对常用矿物药的鉴别研究 [D]. 成都:成都中医药大学, 2018.
Sun L. Identification of common mineral medicines based on XRF technology [D]. Chengdu: Chengdu University of Traditional Chinese Medicine, 2018.

[47] 李 龙,王世芳,冯 淼,等.X 射线荧光光谱技术在粮食矿质元素检测和产地溯源中的应用 [J]. 农产品加工, 2022,(21):79−82,87.
Li L, Wang S F, Feng M, et al. Application of X−ray fluorescence spectroscopy in detection of mineral elements and geographical origin traceability of grains [J]. Farm Products Processing, 2022,(21):79−82,87.

[48] 钟奇秀,赵天卓,李 欣,等.多元素 LIBS 分析的标准化交叉验证及其优化 [J]. 光谱学与光谱分析, 2020,40(2):622−627.
Zhong Q X, Zhao T Z, Li X, et al. Standardized cross−validation and optimization of multi−element LIBS analysis [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2020,40(2):622−627.

[49] 刘晓娜,史新元,贾帅芸,等.基于 LIBS 技术对 4 种珍宝藏药快速多元素分析 [J]. 中国中药杂志, 2015,40(11):2239−2243.
Liu X N, Shi X Y, Jia S Y, et al. Rapid multi−element analysis of four Tibetan precious herbal medicines based on LIBS technology [J]. China Journal of Chinese Materia Medica, 2015,40(11):2239−2243.

[50] C. Sommer, Schneider L M, Nguyen J, et al. Identifying microplastic litter with laser induced breakdown spectroscopy: a first approach [J]. Marine Pollution Bulletin, 2021,171:112789.

[51] 田 华,侯志杰,陈报阳,等.近红外光谱在鱼类及鱼制品定性定量分析中的应用 [J]. 食品与发酵工业, 2017,43(6):274−278.
Tian H, Hou Z J, Chen B Y, et al. Application of near−infrared spectroscopy in qualitative and quantitative analysis of fish and fish products [J]. Food and Fermentation Industries, 2017,43(6):274−278.

[52] 盛 瑜,李梓橦,刘 玲,等.龟甲药材的红外指纹图谱鉴别研究 [J]. 时珍国医国药, 2017,28(5):1127−1129.
Sheng Y, Li Z T, Liu L, et al. Identification of carapax et plastrum testudinis by infrared fingerprint [J]. Lishizhen Medicine and Materia Medica Research, 2017,28(5):1127−1129.

[53] Liu D P, Nie L, Xi B, et al. A novel−approach for identifying sources of fluvial DOM using fluorescence spectroscopy and machine learning model [J]. npj Clean Water, 2024,7(1):79.

[54] Pan H W, Yu H, Song Y, et al. Application of solid surface fluorescence EEM spectroscopy for tracking organic matter quality of native halophyte and furrow−irrigated soils [J]. Ecological Indicators, 2017,73:88−95.

[55] 孙雍荣,权志熙,丁林志,等.基于三维荧光光谱的原酒品质评价模型建立 [J]. 光谱学与光谱分析, 2024,44(12):3391−3398.
Sun Y R, Quan Z X, Ding L Z, et al. Establishment of a quality evaluation model for raw liquor based on three−dimensional fluorescence spectroscopy [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2024,44(12):3391−3398.

[56] Gondal M A, Siddiqui M N. Identification of different kinds of plastics using laser−induced breakdown spectroscopy for waste management [J]. Journal of Environmental Science and Health, Part A, 2007,42(13):1989−1997.

[57] 杨新艳,李东东,叶文清,等.基于激光诱导击穿光谱的标准加入法研究进展 [J/OL]. 激光技术,1−9[2025−05−14].http://kns.cnki.net/kcms/detail/51.1125.tn.20240830.0959.002.html.
Yang X Y, Li D D, Ye W Q, et al. Research progress of standard addition method based on laser−induced breakdown spectroscopy [J/OL]. Laser Technology, 1−9[2025−05−14].http://kns.cnki.net/kcms/detail/51.1125.tn.20240830.0959.002.html.

[58] 郭连波,张 登,褚燕武,等.一种 LIBS 基体效应校正方法及其应用:CN110987903B [P]. 2021−06−11.
Guo L B, Zhang D, Chu Y W, et al. A correction method and application of LIBS matrix effect: CN110987903B [P]. 2021−06−11.

[59] 杨先茂,喻子彧,马维喆,等.LIBS 测量飞灰含碳量的研究现状及展望 [J]. 量子电子学报, 2024,41(3):421−436.
Yang X M, Yu Z Y, Ma W Z, et al. Research status and prospects of carbon content measurement in fly ash by LIBS [J]. Chinese Journal of Quantum Electronics, 2024,41(3):421−436.

[60] 孙建民,贾亮亮,马 勇,等.不同产地鲍鱼的 HPLC 指纹图谱 [J]. 河北大学学报(自然科学版), 2010,30(6):676−681.
Sun J M, Jia L L, Ma Y, et al. HPLC fingerprint of abalone from different origins [J]. Journal of Hebei University (Natural Science Edition), 2010,30(6):676−681.

[61] 何建雄,魏　刚,黄月纯,等.广藿香 GC-MS 特征指纹图谱数字化信息的应用及其 GC 验证 [J]. 中国中药杂志, 2008,33(3):316-318.
He J X, Wei G, Huang Y C, et al. Application of digital information of GC-MS characteristic fingerprint of *Pogostemon cablin* and its GC verification [J]. China Journal of Chinese Materia Medica, 2008,33(3): 316-318.

[62] 程　媛,忻晓东,彭安堂,等.基于 GC-MS 指纹图谱及多成分含量测定对经典名方乌药汤物质基准质量评价研究 [J]. 中国现代应用药学, 2021,38(23):2978-2984.
Cheng Y, Xin X D, Peng A T, et al. Quality evaluation of classical famous prescription Wuyao Tang based on GC-MS fingerprint and multi-component content determination [J]. Chinese Journal of Modern Applied Pharmacy, 2021,38(23):2978-2984.

[63] 牛姗姗.气相色谱质谱法测定固体废物中 64 种半挥发性有机物[C]//中国环境科学学会 2021 年科学技术年会——环境工程技术创新与应用分会场论文集(二).天津:中国环境科学学会, 2021, 7:175-181.
Niu S S.Determination of 64 semi-volatile organic compounds in solid waste by gas chromatography-mass spectrometry [C]//Proceedings of the 2021Annual Scientific and Technological Conference of the Chinese Society for Environmental Sciences - Environmental Engineering Technology Innovation and Application Sub-forum (II). Tianjin: Chinese Society for Environmental Sciences, 2021,7:175-181.

[64] 梁柳玲,杨肖娜,叶开晓,等.气相色谱-质谱法测定废酸油渣中的 16 种多环芳烃 [J]. 中国环境监测, 2021,37(3):192-200.
Liang L L, Yang X N, Ye K X, et al. Determination of 16polycyclic aromatic hydrocarbons in waste acid oil residues by gas chromatography-mass spectrometry [J]. China Environmental Monitoring, 2021,37(3):192-200.

[65] 李唯实,徐　亚,雷国元,等.典型农药废盐热处理特性及适用性 [J]. 环境科学研究, 2018,31(10):1779-1786.
Li W S, Xu Y, Lei G Y, et al. Heat treatment characteristics and applicability of typical pesticide waste salts [J]. Research of Environmental Sciences, 2018,31(10):1779-1786.

[66] 徐玉全. LA-ICP-MS 应用于 BSO 晶体定量和微区成像分析方法的研究 [D]. 上海:上海应用技术大学, 2023.
Xu Y Q. Research on LA-ICP-MS application in BSO crystal quantification and micro-area imaging analysis methods [D]. Shanghai: Shanghai Institute of Technology, 2023.

[67] 高美美,黄明涛,候阿凤,等.ICP-MS 结合化学计量学测定杉木叶中无机元素的含量及指纹图谱研究 [J]. 中药材, 2024,47(8):2001-2006.
Gao M M, Huang M T, Hou A F, et al. Determination of inorganic elements and fingerprint spectra in cedar leaves by ICP-MS combined with chemometrics [J]. Chinese Herbal Medicines, 2024,47(8):2001-2006.

[68] 冉金凤,李俊婕,王小兵,等.电感耦合等离子体质谱(ICP-MS)法测定黄精中 15 种稀土元素及其指纹图谱绘制 [J]. 中国无机分析化学, 2023,13(3):286-292.
Ran J F, Li J J, Wang X B, et al. Determination of 15 rare earth elements in Polygonatum sibiricum and the drawing of its fingerprint spectrum by ICP-MS [J]. Chinese Journal of Inorganic Analytical Chemistry, 2023,13(3):286-292.

[69] Dennler N, Drix D, Warner T P A, et al. High-speed odor sensing using miniaturized electronic nose [J]. Science Advances, 2024,10(45): e1764.

[70] Li Y, Wang Z, Zhao T, et al. Electronic nose for the detection and discrimination of volatile organic compounds: application, challenges, and perspectives [J]. TrAC, Trends in Analytical Chemistry, 2024,180: 117958.

[71] 吴　炜,吴佳瑶,陈佳桦,等.气味指纹图谱技术在纺织品检测中的应用 [J/OL]. 现代纺织技术, 1-10[2025-05-13].http://kns.cnki.net/kcms/detail/33.1249.TS.20241025.0946.006.html.
Wu W, Wu J Y, Chen J H, et al. Application of odor fingerprint technology in textile testing [J/OL]. Modern Textile Technology, 1-10[2025-05-13].
http://kns.cnki.net/kcms/detail/33.1249.TS.20241025.0946.006.html.

[72] 张珊珊,楼紫阳,王　川,等.电子鼻结合机器学习对污泥异味特征的识别研究 [J]. 环境污染与防治, 2023,45(9):1234-1239,1247.
Zhang S S, Lou Z Y, Wang C, et al. Determination of sludge odor characteristics by electronic nose combined with machine learning [J]. Environmental Pollution and Control, 2023,45(9):1234-1239, 1247.

[73] Othman Kombo K, Nur Hidayat S, Puspita M, et al. A machine learning-based electronic nose for detecting neonatal sepsis: analysis of volatile organic compound biomarkers in fecal samples [J]. Clinica Chimica Acta, 2025,565:119974.

[74] 郭　薇,王伯光,唐小东,等.城市污水处理厂挥发性芳香烃的气味指纹及定量评价研究 [J]. 环境科学, 2013,34(5):2038-2043.
Guo W, Wang B G, Tang X D, et al. Odor fingerprint and quantitative evaluation of volatile aromatic hydrocarbons in urban wastewater treatment plants [J]. Environmental Science, 2013,34(5):2038-2043.

[75] Dou Y, Mei M, Kettunen T, et al. Chemical fingerprinting of phenolic compounds in finnish berry wines using fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometry [J]. Food Chemistry, 2022,383: 132303.

[76] Wang Y, Tong Z, Jiang L, et al. Molecular–level insights into the synergistic activation of peracetic acid by ultraviolet and ferrous ions for the degradation of sedimentation sludge water in drinking water treatment plants based on fourier transform-ion cyclotron resonance mass spectrometry [J]. Separation and Purification Technology, 2025, 355:129708.

[77] He C, Yi Y, He D, et al. Molecular composition of dissolved organic matter across diverse ecosystems: preliminary implications for biogeochemical cycling [J]. Journal of Environmental Management, 2023,344:118559.

[78] 何　晨,何　丁,陈春茂,等.傅里叶变换离子回旋共振质谱在溶解性有机质组成分析中的应用 [J]. 中国科学:地球科学, 2022,52(12): 2323-2341.
He C, He D, Chen C M, et al. Application of fourier transform-ion cyclotron resonance mass spectrometry in composition analysis of dissolved organic matter [J]. Science China Earth Sciences, 2022, 52(12):2323-2341.

[79] 孙立丽,王　萌,任晓亮.化学模式识别方法在中药质量控制研究中的应用进展 [J]. 中草药, 2017,48(20):4339-4345.
Sun L L, Wang M, Ren X L. Research progress on chemical pattern

recognition methods in quality control of traditional chinese medicine [J]. Chinese Herbal Medicines, 2017,48(20):4339−4345.

[80] 张晓阳,侯一哲,黎 翩,等.三七总皂苷提取物物理指纹图谱构建及预测方法 [J]. 中国粉体技术, 2024,30(4):115−127.
Zhang X Y, Hou Y Z, Li P, et al. Construction and prediction method of physical fingerprint for panax notoginseng saponin extract [J]. China Powder Science and Technology, 2024,30(4):115−127.

[81] Boccard J, Rutledge D N. A consensus orthogonal partial least squares discriminant analysis (OPLS−DA) strategy for multiblock omics data fusion [J]. Analytica Chimica Acta, 2013,769:30−39.

[82] Zhang Y, Yang X, Cai Z, et al. Online detection of watercore apples by vis/NIR full−transmittance spectroscopy coupled with ANOVA method [J]. Foods, 2021,10(12):2983.

[83] 肖 琪.基于电化学指纹图谱和机器学习的金线莲鉴定方法研究 [D]. 杭州:杭州电子科技大学, 2023.
Xiao Q. Research on anoectochilus roxburghii identification method based on electrochemical fingerprint and machine learning [D]. Hangzhou: Hangzhou Dianzi University, 2023.

[84] 赵汉卿.随机森林算法在中药材产地溯源中的应用研究 [D]. 长沙:中南林业科技大学, 2024.
Zhao H Q. Application of random forest algorithm in geographical origin tracing of Chinese medicinal materials [D]. Changsha: Central South University of Forestry and Technology, 2024.

[85] 张雅淑.基于多指纹图谱技术的红糖产地溯源初探研究 [D]. 南宁:广西大学, 2024.
Zhang Y S. Preliminary study on geographical origin tracing of brown sugar using multi−fingerprint technology [D]. Nanning: Guangxi University, 2024.

[86] 杨玉飞,李雪冰,迭庆杞,等.一种固体废物指纹特征提取方法:中国, CN118194007A [P]. 2024−06−14.
Yang Y F, Li X B, Die Q Q, et al. A method for extracting fingerprint characteristics of solid waste: China, CN118194007A [P]. 2024−06−14.

[87] 李 烃,沈 维,易志伟,等.基于 X 射线衍射指纹图谱技术的进口铁矿固废属性快速鉴别探究 [J]. 冶金分析, 2024,44(10):38−44.
Li T, Shen W, Yi Z W, et al. Rapid identification of imported iron ore solid waste attributes based on X−Ray diffraction fingerprint technology [J]. Metallurgical Analysis, 2024,44(10):38−44.

[88] 李 辉,韩宗珠,闫天浩,等.稀土元素配分曲线的相似性度量算法及其在黄海沉积物物源判别中的应用 [J]. 海洋地质前沿, 2023,39(12):88−97.
Li H, Han Z Z, Yan T H, et al. Similarity measurement algorithm of rare earth element distribution patterns and its application in provenance discrimination of Yellow Sea sediments [J]. Marine Geology Frontiers, 2023,39(12):88−97.

[89] 崔小敏,张 红,任 慧,等.基于 HPLC 指纹图谱和多指标含量测定的白毛银露梅质量评价 [J/OL]. 辽宁中医杂志,1−13[2025−05−14]. http://kns.cnki.net/kcms/detail/21.1128.R.20241216.0921.084.html.
Cui X M, Zhang H, Ren H, et al. Quality evaluation of potentilla glabra based on HPLC fingerprint and multi−Index content determination [J/OL]. Liaoning Journal of Traditional Chinese Medicine, 1−13[2025−05−14].http://kns.cnki.net/kcms/detail/21.1128.R.20241216.0921.084.html.

[90] 刘航瑞,陈玉娟,臧 洋,等.无机元素的指纹图谱分析在透明质酸钠来源鉴别中的应用 [J]. 分析化学, 2023,51(12):1975−1982.
Liu H R, Chen Y J, Zang Y, et al. Application of inorganic element fingerprint analysis in source identification of sodium hyaluronate [J]. Chinese Journal of Analytical Chemistry, 2023,51(12):1975−1982.

[91] 赖晓娜,罗辉泰,张春华,等.基于矿物元素指纹图谱鉴定陈皮产地的方法研究 [J]. 分析测试学报, 2024,43(2):301−308.
Lai X N, Luo H T, Zhang C H, et al. Method for identifying geographical origin of citrus reticulata 'Chachi' based on mineral element fingerprint [J]. Journal of Analytical Testing, 2024,43(2):301−308.

作者简介: 郑志敏(2001−),男,湖南永州人,硕士研究生,研究方向为固废鉴识利用.zhengzhimin23@mails.ucas.ac.cn.