邹惠煌,何品晶,吕 凡,等.基于人工智能的危险废物(医疗废物)智能识别:多源数据驱动的研究进展与未来方向 [J]. 中国环境科学, 2025,45(12):6717-6725.
Zou H H, He P J, Lyu F, et al. Artificial intelligence-enabled identification of hazardous waste (medical waste): Advances and future directions based on multi-source data [J]. China Environmental Science, 2025,45(12):6717-6725.

基于人工智能的危险废物(医疗废物)智能识别:多源数据驱动的研究进展与未来方向

邹惠煌[1],何品晶[1,2],吕 凡[1,2],彭 伟[1,2],章 骅[1,2*] (1.同济大学环境科学与工程学院固体废物处理与资源化研究所,上海 200092；2.上海污染控制与生态安全研究院,上海 200092)

摘要：系统综述了数据驱动下的危险废物(医疗废物)智能识别技术, 涵盖基于人工智能和光谱数据建模的一般准则, 解析了数据采集、标签不平衡、模型泛化与可解释性等关键挑战.提出了未来研究的方向, 包括人工智能辅助光谱建模、迁移学习、多模态融合方法、以及基于机器学习的光谱-结构-性质关系建模等.旨在为危险废物(医疗废物)的智能识别与管理提供系统性参考, 推动其在处理处置、资源化利用和智能监测中的实用化进程.

关键词：危险废物；医疗废物；智能识别；光谱；数据驱动
中图分类号：X705 **文献标识码**：A **文章编号**：1000-6923(2025)12-6717-09

Artificial intelligence-enabled identification of hazardous waste (medical waste): Advances and future directions based on multi-source data. ZOU Hui-huang[1], HE Pin-jing[1,2], LYU Fan[1,2], PENG Wei[1,2], ZHANG Hua[1,2*] (1.Institute of Waste Treatment and Reclamation, College of Environmental Science and Engineering, Tongji University, Shanghai 200092, China；2.Shanghai Institute of Pollution Control and Ecological Security, Shanghai 200092, China). *China Environmental Science*, 2025,45(12)：6717~6725

Abstract：Data-driven intelligent identification technologies for hazardous waste (medical waste) were systematically reviewed. General principles for modeling based on artificial intelligence and spectroscopy were summarized. Key challenges, including data acquisition, class imbalance, model generalization, and interpretability, were analyzed. Future research directions were proposed, including AI-assisted spectroscopic modeling, transfer learning, multimodal data fusion, and machine-learning-based modeling of relationships among spectra, structures, and properties. A systematic reference for the intelligent identification and management of hazardous (medical) waste was provided, and guidance to accelerate practical deployment in treatment and disposal, resource recovery, and intelligent monitoring was offered.

Key words：hazardous waste；medical waste；intelligent identification；spectroscopy；data-driven

危险废物是指列入国家危险废物名录或者根据国家规定的危险废物鉴别标准和鉴别方法鉴定的具有危险特性的固体废物,其产生量和利用处置量逐年增加.据《2023 年中国生态环境统计年报》,2023 年全国工业危险废物产量为 10546.5 万 t,医疗废物处置量为 158.9 万 t[1].危险废物的主要处理处置方式有再生利用、焚烧、水泥窑协同处置和稳定化后填埋等[2],其中医疗废物的主要处理方式为焚烧处理.掌握危险废物(医疗废物)的物料特性,能为其贮存、利用、处理处置技术选择和优化及二次污染控制提供有力保障[3].例如,废矿物油、废酸等危险废物的资源化利用,需依据其组成性质合理选择提纯、精馏等方式回收有价成分[4];电子废物回收时,应依据不同组件的成分和性质,将其拆卸、分类和分离[5];医疗废物在生活垃圾焚烧设施应急协同处置时,需按照两者成分、热值等适当配伍,以控制烟气污染[6];危险废物焚烧炉需根据焚烧物料的相态和热化学特性调整焚烧参数,以控制二噁英产生和结焦[7];危险废物的形态、浸出毒性和迁移性等决定了其适合的最终处置方式[8].

传统的危险废物(医疗废物)性质检测需要复杂的取样、制样、预处理和测试过程[9],不仅消耗大量化学药剂,且由于其危险特性,不便于人力直接接触采样和测试,难以实现快速甚至实时检测,并且需控制好潜在危险成分的释放.近年来,光谱与成像技术的发展为危险废物的无损识别提供了新路径.以傅里叶变换红外光谱(FTIR)、拉曼光谱、激光诱导击

收稿日期：2025-04-25
基金项目：上海市科技计划项目(23DZ2200100)
* 责任作者, 教授, zhanghua_tj@tongji.edu.cn

穿光谱(LIBS)及高光谱成像(HSI)为代表的技术,可通过探测样品对特定波段光的吸收、反射或散射行为,揭示样品的分子结构、元素组成与官能团特征,具有非接触、无标记、高通量的优势[10].与机器学习、深度学习算法等人工智能建模技术相结合,可对光谱中包含的大量冗余与非线性特征进行高效挖掘,实现危险废物成分的快速分类、性质预测与可视化解释[11].例如,支持向量机在高维小样本场景中表现优异[12];以随机森林为代表的集成学习方法则在抗干扰性和特征选择方面更具优势[13];卷积神经网络则擅长提取光谱局部模式,适用于复杂指纹谱段建模[14];光谱与人工智能的融合技术在各类固体废物成分识别[15]、污染物检测[16]等任务中,显示出良好的普适性和稳定性.

尽管已有大量研究验证了“人工智能+光谱技术”在废物识别中的可行性,但在危险废物(医疗废物)领域仍处于初步阶段,面临如数据采集受限、任务多样性高、模型部署落地难等问题.为进一步推动该方向发展,本文系统梳理了当前固体废物识别中常用的光谱与成像技术,聚焦其在危险废物(医疗废物)识别中的适用性、面临的核心挑战以及融合建模的新兴路径,重点提出人工智能与多源异构数据融合、迁移学习、多模态建模、QSAR/QSPR 毒性预测等研究方向,旨在为未来危险废物的智能分类与绿色资源化提供理论基础与技术参考.

1 固体废物物料特性的智能识别方法进展

为了解决传统测试流程复杂、耗时较长、不能同步测试多种物料属性等问题,基于机器视觉结合机器学习、深度学习等大模型手段的智能识别技术崭露头角,为固体废物组分分类和性质表征提供了新的手段.但目前该技术主要应用于可回收物[17]、微塑料[18]、生活垃圾组分[19]等的分类识别和性质回归预测,对于危险废物或医疗废物的应用研究仍较为缺乏.

1.1 基于计算机视觉的固体废物识别研究进展

图像识别主要利用 CCD 相机获取图像,根据固体废物形状、色差、纹理特征和位置等对固体废物进行分类[20-21].目前,基于机器视觉的医疗废物分类,主要停留在实验室阶段,尽管收集了不同种类医疗废物的数据集,大多基于干净且统一的背景进行采集.如 Zhou 等[22]提出了一种基于深度学习的方法,用于实验室中医疗废物图像的自动检测和分类,该模型可有效分类手套、输液瓶、针头等 8 种医疗废物组分,该方法可以防止一般废物混入医疗废物中,以减少医疗废物的产生及相关的处理处置成本.Verma 等[23]创建了一个具有 11 种不同类型的医疗废物数据集,将不同的医疗废物分为三种类型,危险废物(注射器、针头、输液袋、医用瓶、血袋),传染性废物(使用/未使用的纱布、绷带、手套和口罩),以及一般废物如纸杯、包装袋和瓶子,识别成功率可达 95%.少数研究者开始基于特定场景建模,以完成不同种类危险废物的分类收集计划.Nowakowski 等[24]设计了一种手机拍照识图系统,该系统利用基于区域的卷积神经网络来检测图像中废物设备的类型和尺寸,用于从照片中识别和分类废弃电子电器设备,准确率可达 90%.

尽管在干净、单一背景的数据集上,废物识别模型已取得较高准确率,但这些结果往往难以直接迁移至真实应用场景.因此,从实际或模拟应用场景出发开展模型构建具有必要性与现实意义图像数据获取简单,短时间内可以大批量处理.但是,当危险废物为未知种类,以及遮挡(容器内)等因素导致其缺乏鲜明轮廓特征时,识别准确率会受到极大影响[25].

1.2 基于光谱学的固废成分识别方法与典型应用

光谱技术利用光谱检测器获取物料吸收/反射/散射等光谱特征,将其耦合关联物料组分或官能团,实现组分和性质的快速识别[14, 26].常用的光谱仪器有傅里叶变换红外光谱仪(FTIR)[13]、拉曼光谱仪[27]、激光诱导击穿光谱仪(LIBS)[26],及近年来发展的太赫兹光谱仪(THz)[28].

FTIR 通过检测分子振动和旋转跃迁形成的红外谱带,根据谱带的位置和强度定性和定量分析固体废物中的官能团/化学键[18].研究者利用衰减全反射(ATR)-FTIR 耦合机器学习大模型,建立了塑料、织物、纸张、皮革等有机固废组分分类以及含水率、有机元素含量和热值特性预测方法,准确率可达 0.93~0.96[13,29].然而在光谱测试过程中,ATR-FTIR 晶体需嵌入金刚石探针和样品盘之间,测试尺度小,需要频繁的手动操作,且不适用于预测液态、高透光性和刚性物料,难以应用于连续在线检测.

拉曼光谱仪利用激光器产生单色高能量光束

与样品相互作用发生拉曼散射,通过收集散射光谱数据定性分析样品组成,能识别分子成分,已应用于材料表征、塑料回收、医学和食品科学[30-31].但是当材料表面因为风化、存在染料和有色添加剂而产生强烈的荧光信号时,会遮盖特征峰从而影响识别效果[27,31],并且当物体表面被污染时,也很难用拉曼光谱识别[32].表面增强拉曼光谱(SERS)是为改善传统拉曼信号弱、受荧光干扰强等问题改进的一项技术.SERS 通过在金属纳米结构表面激发局域表面等离子体共振,可将拉曼信号强度提升 6~14 个数量级,从而显著提高对微量成分的识别灵敏度,尤其适用于痕量组分的检测[16].袁和财[33]结合 SERS 技术和卷积神经网络成功识别了尿液中的毒品残留.此外,结合深度学习网络还成功识别了 300 种代表性危险化学品,预测精度可以达到 100%.

LIBS 利用高功率脉冲烧蚀样品,在样品表面产生微等离子体[25],通过不同元素在特定波长发出的辐射,根据等离子体谱峰位置和强度进行定性和定量分析,可以实现痕量金属成分检测[34].LIBS 被用于分析消费电子产品中的玩具和热塑性塑料,以鉴定不同种类的添加剂或有毒元素[35].然而,LIBS 光谱不包含有关分子结构的信息,可能难以区分具有相似化学式的物质[36].

THz 利用介于 100GHz 至 10THz 范围内电磁波与物质相互作用,探测分子和晶格的振动识别废物成分[28].但其分辨率相对较低、对水分极为敏感,识别复杂多元的固体废物时挑战大[37].光谱技术的局限在于扫描的是表面或浅层物料化学信息,无法获知物体内部结构和组分空间分布,虽能获得成分梯度,但不能实现废物整体定量分析.且单次检测仅能获取少量样品信息,得到的是平均光谱,因此对取样和制样要求高,当样品不均匀/有层次差异时,预测误差大.另外,危险废物不同于一般的固体废物,如具有感染性的医疗废物和具有挥发性的废溶剂往往密封储存,以防止健康和环境风险,不宜拆封检测物料性质.而及时掌握危险废物性质和容器内物料的组分分布,对于危险废物梯级回收利用、配伍处理处置等至关重要.因此,发展能获知废物结构和组成三维空间分布信息的智能识别方法是当前危险废物资源化利用和污染控制领域的前沿.

1.3　高光谱成像(HSI)技术在固体废物识别的应用与挑战

HSI 技术集成了光谱和成像的优势,可在几秒内获取二维空间内样品的多波段光谱信息分布[38].常用 HSI 系统覆盖的光谱范围包括 400~1000nm(可见光-近红外)、900~1700nm(近红外)、1000~2500nm(短波红外)和 2500~5000nm(中红外),涵盖了多种关键官能团的特征吸收区域.HSI 克服了传统技术在波段数、波段范围、空间分辨率等方面的局限,能够实地、实时地获取样品信息,已广泛应用于地质勘探[39]、医学诊断[40]、食品安全[41]、农业科学[42]等领域.

HSI 技术由于样品制备简单、检测时间短且可以同步测试多个目标样品等优势,近年来在固体废物领域发展迅速.被研发用于电子废物[43]、工业废物[44]、建筑垃圾[45]和塑料[46]分选回收,以及微塑料等污染物识别[47].在危险废物识别场景中,Amariei 等[48]基于工业高光谱相机结合机器学习方法,识别了渔网和绳索中的铅污染成分.韩英越[49]则采用多光谱相机和监督分类算法,成功实现了土壤中重金属污染的识别与空间预测.尽管已有初步应用,危险废物组成和性质定量预测方面的研究与应用仍较为缺乏.高光谱技术具有指纹图谱的功能,波段中包含能解析危险废物组成的 C−H、=C−H、≡C−H、O−H、C−O、N−H 等官能团的光谱信息[46],基于不同组分对红外光的吸收/反射波段差异,对于危险废物和医疗废物物料理化性质的定量表征具有一定的可行性.

1.4　X 射线成像在危险废物识别中的研究进展

X 射线技术利用高能电磁波穿透物质并与物质内部的原子相互作用,产生特征性的 X 射线吸收、散射或荧光信号,由此获取物质的内部信息,被广泛应用于材料分析、环境监测和安全检测等领域.根据技术原理和应用侧重,常见的 X 射线相关技术主要包括两类:一类是基于 X 射线激发元素产生特征能量荧光信号的 X 射线荧光光谱技术(XRF),可实现多元素的定性与定量分析;另一类是基于透射衰减的 X 射线成像技术(如 X 射线透射成像−XRT 和计算机断层扫描−XCT),用于揭示物体内部结构与密度分布信息,适合密闭和复杂结构废物的识别.

其中,XRF 技术可实现快速、无损的成分分析,该方法在重金属污染检测和危险废物成分识别中

表现出良好的灵敏度和适用性.例如,滕婧[50]将 XRF 和机器学习结合,建立了电镀污泥等复杂固废的溯源和重金属成分定量模型.杨婉琪[51]利用能量色散 XRF 和可变性卷积网络,实现了土壤重金属污染分布的可视化识别.进一步地,针对野外非法倾倒的炉渣、飞灰等多类固废,黄瑞潇等人[52]通过融合 XRF 与 X 射线衍射光谱指纹特征技术,结合随机森林算法,有效提升了未知固废的快速识别准确率.

X 射线成像技术结合探测器和计算机图像处理技术生成物体内部影像[53],常用于行李安全检查、医疗检查、材料缺陷检测等.X 射线成像得到的二维投影灰度图像需利用复杂的计算机算法分析 X 射线透射强度,通过图像处理和重建,生成高质量的二维或三维可视化物体影像.该方法可以识别出电池、金属物体、非金属物体、液体等[53-54].

X 射线成像技术具有非侵入性、高穿透性和实时性观测材料内部结构的特点.有研究采用 XCT 技术,利用重建算法获得三维数据,分析煤和生物质混合烧结过程灰渣内部孔隙结构变化[55]、生活垃圾降解过程孔隙变化[56],探测底泥内部的微塑料[57].但这些研究只利用了二进制灰度图像数据以识别两类物质(如:灰-孔隙,垃圾-孔隙,底泥-塑料).也有研究者利用 X 射线成像获得二维投影图,通过物体形状识别包装中的电池、灯泡、矿泉水瓶、玻璃瓶、易拉罐等物体[53].X 射线像图的灰度值数据代表了相应位置 X 射线被物质吸收的不同程度,通过关联该位置物质的密度特性,以及区域内物体形貌结构特性,从而识别内部多种类别的物质.但目前,不同类别危险废物的 X 射线成像光谱特征尚不清晰,适合的分类策略尚有待探索.

1.5 光谱技术在危险废物中的潜在适用性

危险废物种类繁多,物理化学特性复杂,其识别过程中所关注的目标存在显著差异,主要包括:成分定性、定量分析,结构解析或空间分布分析.因此,选择合适的智能识别技术不仅需考虑废物的组成和物理形态,还需结合具体的识别任务、样品状态、所需精度与实时性等因素.基于各类光谱与成像技术的科学原理与优势,本文进一步分析了其在不同类型危险废物中的潜在适用性.

1.5.1 含重金属的危险废物 此类废物,如含铅、镉、汞、铬等重金属的矿渣和有色金属冶炼废渣等,通常需要对其元素组成进行快速定性与定量分析.XRF 和 LIBS 技术能够实现高效、多元素的现场分析,适用于固体及半固态样品.LIBS 技术也可直接对液体样品进行元素分析,是监测液态样品重金属污染的有效手段,然而液态样品对激光脉冲参数要求较高,现场操作具有一定难度.X 射线成像技术凭借其强穿透性和非侵入性,可辅助检测含重金属废物的物理结构和内部异质性,实现空间分布的辅助分析.然而,X 射线成像在识别密度相近材料时仍存在挑战,需结合先进算法提升识别准确性.

1.5.2 含有机物的危险废物 对于有机溶剂、染料、涂料、农药废液、化学试剂及有机树脂废物等有机类危险废物,HSI 与 FTIR 技术能够捕获其有机分子的特征官能团光谱信息,支持非破坏性的成分分析,并且 HSI 还支持像素级的空间分布监测.HSI 在近红外至中红外波段对溶液中有机物的分子振动具备良好响应,具有快速、非接触识别的应用潜力.拉曼光谱及 SERS 对复杂有机物及含有色添加剂的识别灵敏,适用于污染物成分鉴别和质量控制,及溶液中有机成分的结构解析,且 SERS 有效缓解了传统拉曼光谱受荧光干扰的问题.需要注意的是,获取的数据维度较高、信息密集,处理复杂有机废物样本时对数据预处理与智能算法的依赖较大.

1.5.3 感染性及密闭包装危险废物 医疗废物中的注射器、药瓶及病理样本等,通常密闭包装以防交叉感染.X 射线成像技术凭借其出色的穿透能力,可实现对密封容器内部结构的非接触无损成像,有助于识别内部物料的种类、状态及分布,保障检测安全.尤其在焚烧处置前,X 射线图像可用于识别其中是否含有锐器、金属异物或液态危险物质,从而为焚烧工艺提供预警,降低设备损伤风险并提高处置安全性.在危险废物拆解处理中,XRT 已被用于识别废弃电子电器设备内嵌电池等隐蔽性强的危险部件[58],辅助实现自动化、精细化的拆解操作.结合机器学习的多模态数据融合方法,有望进一步提升对密闭危险物料的识别准确性和智能化水平.

1.6 基于人工智能和光谱数据建模分类的一般准则

以 FTIR 技术为代表的光谱数据通常以不同波长/波数下的光谱强度序列形式表现,每个样本对应一维向量,反映了物质在不同波段上的光吸收、反射或散射特征.高光谱成像则进一步扩展为三维数据

结构,包含空间二维坐标与光谱维度,揭示样品的化学和物理信息.然而,这些数据具有高维、冗余、多变及噪声敏感等特点,给传统统计分析带来挑战.人工智能技术,尤其是机器学习和深度学习方法,因其强大的非线性建模能力和自动提取特征功能,能够有效捕捉光谱数据中的复杂关联,提升分类与预测精度.

通过训练,模型能从大量样本中学习到物质成分与光谱特征之间的隐含规律,实现对危险废物(医疗废物)成分和性质的自动识别和评估.此外,利用SHAP(SHapley Additive exPlanations)等模型解释方法有助于揭示各波段对决策的贡献,增强模型的透明度和科学可信度.

利用光谱数据建模开展废物识别的一般流程如图 1 所示.光谱数据分析通常始于对原始数据的初步理解,操作人员需根据采集仪器及数据特性选择合适的预处理方法.常用预处理包括 Savitzky-Golay 滤波平滑、一阶导数、标准正态变换和多元散射校正等,有助于消除噪声、增强特征,从而提升模型的学习效果[59].

预处理完成后,数据通常按 7:3 至 9:1 的比例划分为训练集与测试集,为保证模型泛化性能,建议引入独立外部测试集.考虑到多数模型的“黑箱”属性,提升可解释性也同样重要[60].偏最小二乘法(PLS)和树基模型(如随机森林等)可调用内部参数输出特征重要性,也可借助 SHAP 等模型解释方法,辅助评估各特征对模型预测的贡献[61].

对于小样本化学计量学任务,推荐从 PLS 或支持向量机等经典模型开始,经典的模型也会有不错的表现;在数据规模扩大或任务复杂度提升时,可采用随机森林、梯度提升树等更强的非线性模型.此外,引入集成学习策略不仅有助于提升建模精度,还能增强模型的泛化能力与特征选择的鲁棒性[62].值得注意的是,当模型结构优化充分后,数据预处理对模型性能提升可能作用有限.但在如 LIBS 或 FTIR 光谱等高噪声数据场景下,合理的光谱数据预处理往往是建模成功的关键.例如,赵紫嫣[63]针对混合组分的拉曼光谱重叠问题,提出了一种高效的预处理策略,并结合深度学习方法,实现了复杂混合物的准确定量分析,最终建立的回归模型在各组分预测中相关系数均高于 0.94,展现出良好的建模性能.

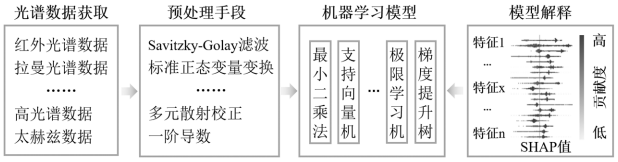


图 1　光谱数据建模流程

Fig.1　Workflow of spectral data modeling

2　危险废物(医疗废物)智能识别面临的瓶颈与挑战

尽管近年来基于人工智能的危险废物识别及性质定性方面已经取得了一定进展,但在实际应用中仍面临诸多挑战.从以下几个方面梳理了当前存在的主要问题.

2.1　数据获取与样本均衡性问题

医疗废物、废酸、废碱液、废有机试剂等危险废物,在数据获取和标签标注时面临显著困难[64].对于涉及有毒、有害、感染性或高致病性的废弃物,数据采集具有一定的安全风险,往往需在受控环境下进行,不易获取.这对数据采集设备、采集人员、实验环境提出了更高的采样要求和防护标准,限制了大规模样本的获取与应用.其次,危险废物本身种类繁多、形态各异,不同类别间的分布严重不均,导致模型训练阶段容易产生类别不平衡问题,影响模型的学习效果与泛化能力.小样本、高维度,尤其是医疗废物的真实数据受限,而数据标签依赖专业人员,成本高.此外,缺乏公开高质量的标注数据集,使得相关研究往往依赖自建数据或小样本实验,难以统一评估指标,阻碍技术标准化和比较研究的开展.

2.2　模型泛化与实际部署的挑战

尽管已有基于机器学习与深度学习的模型在实验室条件下取得了较高的准确率,但其在实际复杂环境中的泛化性能仍存在显著差距.危险废物和医疗废物的图像识别系统常面临复杂多变的环境背景,如照明变化、遮挡、背景杂乱、污渍污染、视角变化等[65],这些因素均可能对模型的识别能力产生严重干扰,导致部署后性能下降.然而,现有研究多集中于理想或标准化采集条件下的模型构建与性能验证,忽视了实际部署场景中环境因素对图像特征提取与分类准确率的影响[14].同时,实验环境中常采用标准化预处理流程和均衡样本集,而真实应用场景往往缺乏这类先验条件.此外,识别系统的部署还涉及嵌入式系统、边缘计算资源、实时性要求等

技术约束,当前许多研究未能充分考虑这些落地条件,限制了其工程规模应用的潜力.

2.3 模型可解释性

尽管机器学习模型在诸多任务中取得了显著性能提升,但其“黑箱”特性始终是学术界关注的核心问题之一.模型的可解释性不仅是衡量其有效性和可信度的重要标准[66],更是判断其是否真正学习到了具有物理或化学意义的关键光谱特征波段的核心依据[67].然而,目前多数研究更侧重于模型精度或预测结果的呈现,而较少深入探讨模型内部的决策机制和透明化解释,严重制约了模型在医疗废物等高风险场景中的应用.因此,即使模型在测试集上表现优异,也无法确保其学习到的模式具有实际可迁移性或科学合理性.例如,在高光谱图像中,某一波段可能对应某种危险特性,但黑箱模型可能仅依赖于某些不可知的非因果模式进行分类,从而导致潜在的误判风险[68].未来的研究亟需结合可解释性技术进行深入分析与验证.

2.4 数据处理的高算力需求

高光谱、拉曼光谱与 X 射线透射等技术在危险废物识别中展现出重要潜力,然而其高维度和高信息密度的特性对模型训练与推理的算力资源提出了较高要求.多模态数据融合进一步加剧了模型结构的复杂性和计算负担,限制了其在边缘设备或嵌入式平台中的高效部署.此外,现有针对高维光谱数据的降维、特征提取与噪声抑制方法仍有待改进,以增强系统的鲁棒性与运行效率.

3 面向挑战的危险废物(医疗废物)识别研究新路径

3.1 基于人工智能与光谱/质谱数据融合的研究

由于危险废物(医疗废物)在相态、种类和化学组成上的高度复杂性,基于光谱技术的危险废物(医疗废物)智能识别目前仍处于初步探索阶段.现有研究多聚焦于单一类别或理想条件下的识别任务[69],不同类型与相态的危险废物(医疗废物)在各类光谱波段中的响应特征尚不清楚,缺乏高质量、大样本的数据库用于定性和定量样本研究.通过结合多源光谱技术与化学计量学方法,构建可用于定性识别(如医疗废物分类)与定量测定(如危险废物成分浓度估算)的模型,是未来的研究趋势.借助机器学习与特征工程,有望从高维光谱数据中挖掘出反映危险组分微观结构与宏观特性的重要特征,提升对复杂混合废物中关键成分的识别能力.

然而,模型的过拟合问题、泛化能力不足及可解释性缺失仍是影响其可靠性与实用性的重要挑战[70].同时,不同光谱成像技术在实际复杂背景下(如干扰信号、样品异质性)表现出的鲁棒性和适应性尚需深入研究.此外,构建开放共享的危险废物光谱数据库将对整个领域的发展起到基础性支撑作用.该数据库不仅可用于模型训练与对比评估,还可为实际应用场景中的识别系统提供可溯源的参考样本,有助于推动危险废物资源化过程中的实时监测与智能监管.未来研究应从实验室条件逐步迈向复杂现实环境下的实用系统开发,为危险废物的全过程智能管理提供有力技术支撑.

3.2 迁移学习在危险废物(医疗废物)识别中的应用

由于危险废物(医疗废物)图像样本稀缺、标注困难,现有数据集规模有限,且存在标签不均衡问题,导致模型难以充分学习各类废物的形态特征,模型易出现过拟合与泛化能力弱等问题.迁移学习作为有效的小样本学习策略[71],能够借助在大规模通用或相关领域数据集(如 ImageNet、医学图像库等)上预训练的模型[72],将通用视觉特征迁移至危险废物识别任务中,通过微调显著提升模型性能.再结合数据增强与正则化等技术,可进一步缓解标签不平衡对模型训练的影响[73].

然而,目前在跨领域(如实验室图像向实际应用图像)与跨任务(如分类向检测、分割)迁移方面的研究仍较为有限[65].未来可进一步探索领域自适应、对抗性迁移网络等先进策略,以提升模型在多样化场景中的适应性与稳定性.此外,建立统一的迁移学习基准体系与开放共享的数据平台,将为危险废物智能识别提供坚实的数据与方法支撑.

3.3 多模态融合方法的研究

不同光谱有其适合的应用场景,HSI 可以获取材料的分子信息和空间信息,并且适用于复杂的在线工业环境,但该技术的穿透深度仅毫米至厘米级,这限制了对危险废物内部结构和成分的探测,仅表面定量结果不足以计算出危险废物整体的理化性质信息[74].LIBS 技术对复杂的基体的元素检测有着独到的优势,通过等离子体层层烧蚀,可以获取不同深度的内部信息,但也存在深度限制[75].X 射线成像

可以获取物体内部成像,是绝佳的穿透技术,但其无法获取物体的化学信息.

多模态融合技术,包括不同光谱仪的组合和集成,不同的多模态数据融合手段,可以全方面获取物料的特征信息[76].通过结合先进的多模态数据融合方法[77],可进一步获取不同尺度的空谱信息,并提高定性和定量分析结果的准确性和稳定性.对于封闭状态的医疗废物识别,需结合具有透射成像功能的机器视觉识别,开发能无损探测危险废物三维理化信息的智能识别技术,但这方面的研究非常欠缺.

3.4　基于机器学习的 QSAR/QSPR 模型构建与毒性预测

目前,危险废物的毒理特性评估多依赖于动物实验测试,实验周期长且成本高,难以穷尽所有以厘清不同组分的生态毒性.并且当危险废物成分复杂或为未知来源时,难以快速评估其真实毒性影响.因此,构建基于机器学习的毒性定量结构−活性关系(QSAR)与定量结构−性质关系(QSPR)模型[78-79],预测未知危险废物中关键组分的毒性、腐蚀性、持久性等理化性质,成为提升评估效率与准确性的有力手段.

随着化学信息学与图神经网络(GNN)技术的发展,GNN 已逐步应用于分子结构建模,通过捕捉分子中原子和键之间的图结构关系,学习其与毒性、反应活性之间的复杂映射关系[80].GNN 模型可实现对结构未知或部分已知废物组分的毒性快速预测,在化学结构层面上提升模型的可解释性与泛化能力[81].

此外,构建自动化的危害等级标注系统,结合已有毒性数据库与法规标准,可对预测结果进行智能归类,辅助实现废物危害等级的初步判定.该系统不仅可提高危险废物风险评估的自动化水平,也有望为废物分类、资源化处理及监管提供高效决策支持.

4　结论

本文系统梳理了近年来基于人工智能的数据驱动方法在固体废物识别领域中的研究进展,涵盖图像识别、光谱分析、高光谱成像及 X 射线技术等识别技术.目前,关于危险废物(医疗废物)方面的智能识别研究仍较为缺乏,需要大力推动人工智能结合多模态技术在危险废物(医疗废物)智能识别方面的研究.样本数据获取、模型泛化能力、计算资源需求与可解释性等方面是人工智能深度嵌入危险废物(医疗废物)识别领域需要面临的挑战.

面向未来,人工智能与光谱/质谱等多源数据的深度融合、迁移学习的跨场景适应性、多模态学习与 QSAR/QSPR 等建模方法的引入,将为危险废物(医疗废物)的智能识别提供更加可靠、精准与可扩展的解决路径.将人工智能深度嵌入废物管理实践,不仅加速了危废识别与处置流程的智能化转型,也为实现环境治理现代化和公共健康风险防控提供了创新路径.

参考文献:

[1] 中华人民共和国生态环境部.2023 年中国生态环境统计年报 [R]. 北京:中华人民共和国生态环境部, 2024.
Ministry of Ecology and Environment of the People's Republic of China. 2023 statistical report on ecological environment in China [R]. Beijing: MEE, 2024.

[2] Huber F, Blasenbauer D, Mallow O, et al. Thermal co−treatment of combustible hazardous waste and waste incineration fly ash in a rotary kiln [J]. Waste Management, 2016,58:181−190.

[3] Vrancken C, Longhurst P J, Wagland S T. Critical review of real−time methods for solid waste characterisation: Informing material recovery and fuel production [J]. Waste Management, 2017,61:40−57.

[4] Jia Y X, Chen X, Wang M, et al. A win−win strategy for the reclamation of waste acid and conversion of organic acid by a modified electrodialysis [J]. Separation and Purification Technology, 2016,171:11−16.

[5] Sterkens W, Diaz Romero D, Goedemé T, et al. Detection and recognition of batteries on X−Ray images of waste electrical and electronic equipment using deep learning [J]. Resources, Conservation and Recycling, 2021,168:105246.

[6] Lan D Y, Zhang H, Wu T W, et al. Repercussions of clinical waste co−incineration in municipal solid waste incinerator during COVID−19pandemic [J]. Journal of Hazardous Materials, 2022,423:127144.

[7] Neuwahl F C G, Gómez Benavides J, Holbrook S, et al. Best Available Techniques (BAT) reference document for waste incineration: industrial emissions directive 2010/75/EU (Integrated Pollution Prevention and Control) [R]. EUR 29971EN, 2019.

[8] Long Y Y, Hu Y, Wang H Y, et al. Effective disposal of hazardous waste from non−ferrous waste recycling through thermal treatment [J]. Journal of Cleaner Production, 2024,434:140004.

[9] Teng J, Shi Y, Liu Z H, et al. Rapid identification of hazardous heavy metal−containing waste by combining EDXRF with machine learning: Taking zinc smelting waste as an example [J]. Resources, Conservation and Recycling, 2023,198:107155.

[10] Yang J, Xu Y P, Chen P, et al. Combining spectroscopy and machine learning for rapid identification of plastic waste: Recent developments and future prospects [J]. Journal of Cleaner Production, 2023,431: 139771.

[11] Mishra P, Passos D, Marini F, et al. Deep learning for near−infrared spectral data modelling: Hypes and benefits [J]. TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2022,157:116804.

[12] Ren T, Li Y, Wang X, et al. Portable pyrolysis−point discharge optical spectrometer for in situ plastic polymer identification by coupling with machine learning [J]. Environmental Science & Technology, 2024,58 (5):2554−2563.

[13] Lan D Y, He P J, Qi Y P, et al. Optimizing the Quality of Machine

Learning for Identifying the Share of Biogenic and Fossil Carbon in Solid Waste [J]. Analytical Chemistry, 2023,95(9):4412−4420.
[14] Wu T W, Zhang H, Peng W, et al. Applications of convolutional neural networks for intelligent waste identification and recycling: A review [J]. Resources, Conservation and Recycling, 2023,190:106813.
[15] Zou H H, He P J, Peng W, et al. Rapid detection of colored and colorless macro− and micro−plastics in complex environment via near−infrared spectroscopy and machine learning [J]. Journal of Environmental Sciences, 2025,147:512−522.
[16] Jayaprakash V, You J B, Kanike C, et al. Determination of trace organic contaminant concentration via machine classification of surface−enhanced raman spectra [J]. Environmental Science & Technology, 2024,58(35):15619−15628.
[17] Mäkelä M, Rissanen M, Sixta H. Machine vision estimates the polyester content in recyclable waste textiles [J]. Resources, Conservation and Recycling, 2020,161:105007.
[18] Michel A P M, Morrison A E, Preston V L, et al. Rapid identification of marine plastic debris via spectroscopic techniques and machine learning classifiers [J]. Environmental Science & Technology, 2020, 54(17):10630−10637.
[19] Zhao Y, Li J. Sensor−Based Technologies in Effective Solid Waste Sorting: Successful Applications, Sensor Combination, and Future Directions [J]. Environmental Science & Technology, 2022,56(24): 17531−17544.
[20] Qiao Y B, Zhang Q, Qi Y, et al. A Waste Classification model in Low−illumination scenes based on ConvNeXt [J]. Resources, Conservation and Recycling, 2023,199:107274.
[21] Lu W S, Chen J J, Xue F. Using computer vision to recognize composition of construction waste mixtures: A semantic segmentation approach [J]. Resources, Conservation and Recycling, 2022,178: 106022.
[22] Zhou H Y, Yu X Y, Alhaskawi A, et al. A deep learning approach for medical waste classification [J]. Scientific Reports, 2022,12(1):2159.
[23] Verma M, Kumar A, Kumar S. Medical Waste Classification using Deep Learning and Convolutional Neural Networks; proceedings of the 2022IEEE Conference on Interdisciplinary Approaches in Technology and Management for Social Innovation (IATMSI), F 21−23Dec. 2022,2022 [C].
[24] Nowakowski P, Pamuła T. Application of deep learning object classifier to improve e−waste collection planning [J]. Waste Management, 2020,109:1−9.
[25] Rawat W, Wang Z. Deep convolutional neural networks for image classification: A comprehensive review [J]. Neural Computation, 2017,29(9):2352−2449.
[26] Adarsh U K, Bhoje Gowd E, Bankapur A, et al. Development of an inter−confirmatory plastic characterization system using spectroscopic techniques for waste management [J]. Waste Management, 2022,150: 339−351.
[27] Kotula A P, Orski S V, Brignac K C, et al. Time−gated Raman spectroscopy of recovered plastics [J]. Marine Pollution Bulletin, 2022,181:113894.
[28] Li Y H, Yao J J, Nie P C, et al. An effective method for the rapid detection of microplastics in soil [J]. Chemosphere, 2021,276:128696.
[29] Qi Y P, He P J, Lan D Y, et al. Rapid determination of moisture content of multi−source solid waste using ATR−FTIR and multiple machine learning methods [J]. Waste Management, 2022,153:20−30.
[30] Neo E R K, Low J S C, Goodship V, et al. Deep learning for chemometric analysis of plastic spectral data from infrared and Raman databases [J]. Resources, Conservation and Recycling, 2023,188: 106718.
[31] Pocheville A, Uria I, España P, et al. Raman spectroscopy integrated with machine learning techniques to improve industrial sorting of Waste Electric and Electronic Equipment (WEEE) plastics [J]. Journal of Environmental Management, 2025,373:123897.
[32] Liu J, Zhang X, Du Z F, et al. Application of confocal laser Raman spectroscopy on marine sediment microplastics [J]. Journal of Oceanology and Limnology, 2020,38(5):1502−1516.
[33] 袁和财.基于拉曼光谱技术和深度学习网络的有害物快速检测分析 [D]. 合肥:安徽大学, 2021.
Yuan H C. Rapid detection and analysis of hazardous substances based on Raman spectroscopy technology and deep learning network [D]. Hefei: Anhui University, 2021.
[34] Costa V C, de Mello M L, Babos D V, et al. Calibration strategies for determination of Pb content in recycled polypropylene from car batteries using laser−induced breakdown spectroscopy (LIBS) [J]. Microchemical Journal, 2020,159:105558.
[35] Costa V C, Aquino F W B, Paranhos C M, et al. Use of laser−induced breakdown spectroscopy for the determination of polycarbonate (PC) and acrylonitrile−butadiene−styrene (ABS) concentrations in PC/ABS plastics from e−waste [J]. Waste Management, 2017,70:212−221.
[36] Neo E R K, Yeo Z, Low J S C, et al. A review on chemometric techniques with infrared, Raman and laser−induced breakdown spectroscopy for sorting plastic waste in the recycling industry [J]. Resources, Conservation and Recycling, 2022,180:106217.
[37] Abina A, Puc U, Zidanšek A. Challenges and opportunities of terahertz technology in construction and demolition waste management [J]. Journal of Environmental Management, 2022,315:115118.
[38] Amigo J M, Babamoradi H, Elcoroaristizabal S. Hyperspectral image analysis. A tutorial [J]. Analytica Chimica Acta, 2015,896:34−51.
[39] Bell T W, Siegel D A. Nutrient availability and senescence spatially structure the dynamics of a foundation species [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2022,119(1):e2105135118.
[40] Yoon J, Joseph J, Waterhouse D J, et al. A clinically translatable hyperspectral endoscopy (HySE) system for imaging the gastrointestinal tract [J]. Nature Communications, 2019,10(1):1902.
[41] He H J, Chen Y, Li G, et al. Hyperspectral imaging combined with chemometrics for rapid detection of talcum powder adulterated in wheat flour [J]. Food Control, 2023,144:109378.
[42] Ge Y F, Song S Z, Yu S, et al. Rice seed classification by hyperspectral imaging system: A real−world dataset and a credible algorithm [J]. Computers and Electronics in Agriculture, 2024,219:108776.
[43] Tan W J, Duan Q Y, Yao L P, et al. A sensor combination based automatic sorting system for waste washing machine parts [J]. Resources, Conservation and Recycling, 2022,181:106270.
[44] Wu T W, He P J, Lan D Y, et al. Application of XGBoost for Fast Identification of Typical Industrial Organic Waste Samples with Near−Infrared Hyperspectral Imaging [J]. ACS ES&T Engineering, 2023,3(6):841−850.
[45] Xiao W, Yang J H, Fang H Y, et al. A robust classification algorithm for separation of construction waste using NIR hyperspectral system [J]. Waste Management, 2019,90:1−9.
[46] Wu X Y, Li J, Yao L P, et al. Auto−sorting commonly recovered plastics from waste household appliances and electronics using near−infrared spectroscopy [J]. Journal of Cleaner Production, 2020, 246:118732.
[47] Ai W J, Chen G L, Yue X J, et al. Application of hyperspectral and deep learning in farmland soil microplastic detection [J]. Journal of Hazardous Materials, 2023,445:130568.
[48] Amariei G, Henriksen M L, Friis J B, et al. In−line identification of Pb−based pigments in fishing nets and ropes based on hyperspectral imaging and machine learning [J]. Marine Pollution Bulletin, 2023, 191:114910.
[49] 韩英越.工业固废谁填场地污染识别迁移及健康风险评估研究 [D]. 杭州:浙江大学, 2022.
Han Y Y. Study on pollution identification, migration and health risk assessment of industrial solid waste landfill sites [D]. Hangzhou:

Zhejiang University, 2022.

[50] 滕　婧.基于XRF与机器学习的电镀污泥成分定量分析及应用研究 [D]. 重庆:重庆大学, 2023.
Teng J. Quantitative analysis and application research of electroplating sludge components based on XRF and machine learning [D]. Chongqing: Chongqing University, 2023.

[51] 杨婉琪.基于XRF的土壤重金属元素智能分析算法研究及应用 [D]. 西安:电子科技大学, 2024.
Yang W Q. Research and application of intelligent analysis algorithm for soil heavy metal elements based on XRF [D]. Xi'an: University of Electronic Science and Technology of China, 2024.

[52] 黄瑞潇,卢永琦,郑志敏,等.典型固体废物的 XRF−XRD 耦合光谱指纹特征识别 [J]. 中国环境科学, 2025,45(10):5585−5595.
Huang R X, Lu Y Q, Zheng Z M, et al. Identification of coupled spectral fingerprint characteristics of typical solid waste by XRF−XRD [J]. China Environmental Science, 2025,45(10):5585−5595.

[53] Li Y K, Zhang X M. Intelligent X−ray waste detection and classification via X−ray characteristic enhancement and deep learning [J]. Journal of Cleaner Production, 2024,435:140573.

[54] Ueda T, Koyanaka S, Oki T. In−line sorting system with battery detection capabilities in e−waste using combination of X−ray transmission scanning and deep learning [J]. Resources, Conservation and Recycling, 2024,201:107345.

[55] Wang Z W, Zhou H, Li Y, et al. Experimental Study of the Pore Structure during Coal and Biomass Ash Sintering Based on X−ray CT Technology [J]. Energy & Fuels, 2021,35(3):2098−2109.

[56] Liu X Y, Zhang L Y, Wu S, et al. Changes in municipal solid waste pore structure during degradation: Analysis of synthetic waste using X−ray computed microtomography [J]. Science of the Total Environment, 2020,708:135089.

[57] Trusler M M, Sturrock C J, Vane C H, et al. X−ray computed tomography: A novel non−invasive approach for the detection of microplastics in sediments? [J]. Marine Pollution Bulletin, 2023, 194:115350.

[58] Sterkens W, Diaz−Romero D, Goedemé T, et al. Detection and recognition of batteries on X−Ray images of waste electrical and electronic equipment using deep learning [J]. Resources, Conservation and Recycling, 2021,168:105246.

[59] Mishra P, Biancolillo A, Roger J M, et al. New data preprocessing trends based on ensemble of multiple preprocessing techniques [J]. TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2020,132:116045.

[60] Liang R, Chen C, Sun T, et al. Interpretable machine learning assisted spectroscopy for fast characterization of biomass and waste [J]. Waste Management, 2023,160:90−100.

[61] He B, Zhu X, Cang Z, et al. Interpretation and Prediction of the CO2Sequestration of Steel Slag by Machine Learning [J]. Environmental Science & Technology, 2023,57(46):17940−17949.

[62] 闫红宇.激光诱导击穿光谱的分类策略及其应用 [D]. 太原:中北大学, 2024.
Yan H Y. Classification strategies of laser−induced breakdown spectroscopy and their applications [D]. Taiyuan: North University of China, 2024.

[63] 赵紫嫣.基于深度学习的混合物拉曼光谱解析技术研究 [D]. 无锡:江南大学, 2024.
Zhao Z Y. Research on Raman spectroscopy analysis technology of mixtures based on deep learning [D]. Wuxi: Jiangnan University, 2024.

[64] Teng J, Shi Y, Liu Z H, et al. Rapid identification of hazardous heavy metal−containing waste by combining EDXRF with machine learning: Taking zinc smelting waste as an example [J]. Resources, Conservation and Recycling, 2023,198:107155.

[65] Shen Y L, Lan D Y, He P J, et al. Nondestructive optical and spectroscopic techniques combined with machine learning for identifying solid waste: A review [J]. TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2025,186:118195.

[66] Murdoch W J, Singh C, Kumbier K, et al. Definitions, methods, and applications in interpretable machine learning [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2019,116(44):22071−22080.

[67] Kucheryavskiy S. Analysis of NIR spectroscopic data using decision trees and their ensembles [J]. Journal of Analysis and Testing, 2018, 2(3):274−289.

[68] Beć K B, Grabska J, Huck C W. Interpretability in near−infrared (NIR) spectroscopy: Current pathways to the long−standing challenge [J]. TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2025,189:118254.

[69] Langley A, Lonergan M, Huang T, et al. Analyzing mixed construction and demolition waste in material recovery facilities: Evolution, challenges, and applications of computer vision and deep learning [J]. Resources, Conservation and Recycling, 2025,217:108218.

[70] Zhu J J, Yang M, Ren Z J. Machine learning in environmental research: Common pitfalls and best practices [J]. Environmental Science & Technology, 2023,57(46):17671−17689.

[71] Noto N, Kunisada R, Rohlfs T, et al. Transfer learning across different photocatalytic organic reactions [J]. Nature Communications, 2025, 16(1):3388.

[72] Liu X, An H, Cai W, et al. Deep learning in spectral analysis: Modeling and imaging [J]. TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2024,172:117612.

[73] Chen C, Liang R, Song M, et al. Noise−assisted data enhancement promoting image classification of municipal solid waste [J]. Resources, Conservation and Recycling, 2024,209:107790.

[74] Adarsh U K, Kartha V B, Santhosh C, et al. Spectroscopy: A promising tool for plastic waste management [J]. TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2022,149:116534.

[75] Yao S, Yu Z, Hou Z, et al. Development of laser−induced breakdown spectroscopy based spectral tandem technology: A topical review [J]. TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2024,177:117795.

[76] Azcarate S M, Ríos−Reina R, Amigo J M, et al. Data handling in data fusion: Methodologies and applications [J]. TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2021,143:116355.

[77] Wang H P, Chen P, Dai J W, et al. Recent advances of chemometric calibration methods in modern spectroscopy: Algorithms, strategy, and related issues [J]. TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2022,153: 116648.

[78] Daghighi A, Casanola Martin G M, Iduoku K, et al. Multi−endpoint acute toxicity assessment of organic compounds using large−scale machine learning modeling [J]. Environmental Science & Technology, 2024,58(23):10116−10127.

[79] Zhang C Y, Li X, Keil Stietz K P, et al. Machine Learning−Assisted Identification and Quantification of Hydroxylated Metabolites of Polychlorinated Biphenyls in Animal Samples [J]. Environmental Science & Technology, 2022,56(18):13169−13178.

[80] Corso G, Stark H, Jegelka S, et al. Graph neural networks [J]. Nature Reviews Methods Primers, 2024,4(1):17.

[81] Wu Z, Wang J, Du H, et al. Chemistry−intuitive explanation of graph neural networks for molecular property prediction with substructure masking [J]. Nature Communications, 2023,14(1):2585.

作者简介：邹惠煌(1996−),男,广东惠州人,同济大学博士研究生,研究方向为基于多模态成像与人工智能的固体废物智能识别.hhzou@tongji.edu.cn.