

神经网络在管制化学品识别中的应用与发展趋势

张镡月¹, 易继军², 邱 诚^{1*}

¹成都工业学院材料与环境工程学院, 四川 成都

²四川羽润晨环保科技有限公司, 四川 成都

收稿日期: 2025年9月27日; 录用日期: 2025年10月21日; 发布日期: 2025年10月28日

摘 要

准确识别管制化学品是预防公共安全事件、控制环境污染与规避工业事故的核心前提; 神经网络凭借其强大的模式识别能力, 已成为提升管制化学品识别效能的关键技术; 本文对神经网络在管制化学品识别中的应用现状进行了综述, 剖析了其技术优势以及当前面临的挑战, 探讨了未来发展方向, 以加速该技术从研究向实战应用的转化。

关键词

神经网络, 管制化学品, 识别, 发展趋势

Application and Development Trends of Neural Networks in the Identification of Controlled Chemicals

Xinyue Zhang¹, Jijun Yi², Cheng Qiu^{1*}

¹School of Materials and Environmental Engineering, Chengdu Technological University, Chengdu Sichuan

²Sichuan Yurunchen Environmental Protection Technology Co., Ltd., Chengdu Sichuan

Received: September 27, 2025; accepted: October 21, 2025; published: October 28, 2025

Abstract

The accurate identification of regulated chemicals is of great significance for public safety,

*通讯作者。

文章引用: 张镡月, 易继军, 邱诚. 神经网络在管制化学品识别中的应用与发展趋势[J]. 交叉科学快报, 2025, 9(6): 801-809. DOI: 10.12677/isl.2025.96101

environmental protection, and industrial production safety. Neural networks, with their powerful pattern recognition capabilities, exhibit tremendous application potential in the identification of regulated chemicals. This paper reviews the current application status of neural networks in the identification of regulated chemicals, analyzes their technical advantages and current challenges, and explores future development trends, aiming to provide a reference for research and practice in this field.

Keywords

Neural Networks, Controlled Chemicals, Identification, Development Trends

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

管制化学品是根据国家相关法律法规，实施特殊管控的化学物质，包括剧毒类、能用于制毒和制爆的化学品等不同类别；这类物质在流通、生产、储运和使用过程中，一旦出现管理漏洞或意外泄漏，会给公众健康、生态平衡以及社会稳定带来重大威胁；因此，高效精准地识别这些特殊化学品，成为维护社会安全的关键技术需求。

目前，主流的识别方法多是将实验室检测和人工筛查相结合，但这种方式普遍存在时效性差、资源消耗多、操作复杂等不足。基于神经网络的识别方法，因其在精度与效率上的突破性进展，已成为该领域的前沿研究方向；基于神经网络的新型识别方法凸显出明显优势，该技术能自动从海量数据中提取关键特征，实现化学品的自动分类和快速鉴别；和传统方法相比，该智能识别模式不仅将准确率提升了 30% 以上，更将响应时间缩短至秒级，为解决化学品管控难题提供了创新的技术方案。

2. 神经网络基本原理与相关技术

2.1. 神经网络基本原理

作为一种仿生计算架构，神经网络的设计灵感来源于生物神经系统的工作机制。该模型由众多相互关联的处理单元(即人工神经元)构成，这些单元通过特定方式相互连接形成网络拓扑结构。当外部信号输入时，每个计算单元会对接收到的多路信号进行加权整合，随后经由非线性转换函数处理生成输出响应。

神经网络的学习过程主要依赖于反向传播算法(如 BP 算法)，BP 神经网络是基于反向传播算法的前馈网络，通过逐层传递误差并调整权重最小化误差，其基本原理是从后向前逐层传播系统误差，并通过调整网络权重和阈值来最小化误差[1]。自动调整神经元间权值，实现对复杂非线性关系的映射，隐含层神经元状态影响输入输出关系，通过调整权系数优化网络性能[2]，其核心在于通过训练数据学习输入与输出的映射规则，形成决策区域以完成分类或预测任务[3]。值得注意的是，这种学习机制使得网络能够自动建立输入与输出间的非线性对应关系；隐含层中的神经元通过特定的激活状态，实质上构建了输入空间到输出空间的转换规则；经过充分训练后，网络内部能形成高度复杂的判别边界，从而实现对复杂光谱模式的精准分类与预测。在迭代优化过程中，让参数不断调整，网络输出逐渐逼近目标值，最终获得理想的泛化能力。

2.2. 卷积神经网络(CNN)

卷积神经网络是一种专门用于处理具有网格结构数据的神经网络，如图像、光谱等。CNN 通过卷积层、池化层和全连接层的组合，自动提取输入数据的特征。以及通过局部连接和权值共享机制，实现了对光谱数据特征的自动提取和分类[4]，其中，特征提取模块利用滑动窗口对输入实施局部运算，捕获细微模式；降维模块则通过压缩操作保留有效信息，既提升运算性能又增强模型适应性；最终的决策模块将分布式特征映射为分类结果。

针对特殊化学品检测场景，这种架构可有效解析拉曼或红外光谱数据。该架构的核心优势，是能自动捕获并学习光谱曲线中具有鉴别意义的吸收峰与波形特征，无需依赖人工设计特征。实验表明，基于 CNN 的识别系统在违禁化学品分类任务中展现出卓越的准确性与可靠性，为安检领域提供了高效的技术解决方案。

2.3. 注意力机制

注意力机制通过模拟人类认知过程中的信息筛选特性，赋予神经网络动态聚焦关键数据的能力。这种技术采用权重分配策略，使模型在处理输入信息时能够自主强化对分类决策有显著贡献的特征表达。以光谱分析为例，该机制可有效增强特征峰信号，同时抑制背景噪声的干扰作用。

在化学物质鉴别领域，这种选择性关注机制展现出独特优势。拉曼光谱数据中各类化合物拥有特定的振动峰值及强度分布，借助注意力权重调节，计算模型能够自动锁定最具判别性的光谱区域。这种聚焦式处理提升了物质鉴定的精确度，同时增强了模型对干扰因素的抵抗能力，为复杂场景下的化学品快速检测提供了可靠的技术支持(见表 1)。

Table 1. Neural network types and their applications in controlled chemicals identification

表 1. 神经网络类型及其在管制化学品识别中的应用

神经网络类型	应用场景	优势
卷积神经网络(CNN)	拉曼光谱、红外光谱数据处理	自动特征提取，高准确性
BP 神经网络	混合气体或液体化学品定性定量分析	非线性映射能力强，适用于复杂数据
注意力机制神经网络	光谱数据关键特征识别	动态聚焦关键数据，提升识别精度

3. 神经网络在管制化学品识别中的应用现状

3.1. 基于拉曼光谱的管制化学品识别

作为一种非破坏性检测手段，拉曼光谱技术以其高效、无需接触的特点，能够精确记录物质的特征光谱数据；基于拉曼光谱的识别研究呈现出从单一模型到引入注意力机制等增强模块的发展路径，其核心目标是提升在复杂真实环境下的鲁棒性。这种分析方法在违禁化学品识别领域展现出独特价值，尤其适用于需要快速响应的现场检测场景；但是，常规光谱解析过程过度依赖专业人员经验判断，不仅耗时较长，还容易引入人为偏差。

随着深度学习技术的突破，神经网络模型被成功引入光谱数据处理领域。通过自动提取光谱特征并建立智能分类模型，这一方法显著提升了分析效率与客观性。例如，谢宇浩等(2025)将注意力机制引入卷积神经网络中，提出了一种基于拉曼光谱的管制化学品识别方法。该方法对 500 种管制化学品的分类准确率达到了 99.47%，为管制化学品的快速、准确识别提供了有力支持[5]；祁文博等人针对朱砂、雌黄、淡黄三元混合矿物颜料，Deep-CNN 直接处理便携设备采集的拉曼光谱(含环境光和噪声)，实现成分识别[6]。

从技术路径来看,基于拉曼光谱的神经网络识别方法之所以成效显著,关键在于其能够将传统依赖专家经验的谱峰解读过程,转化为数据驱动的特征学习问题。CNN 架构通过局部连接和权重共享机制,有效捕捉光谱中的局部特征与整体形态,而注意力机制的引入进一步强化了对判别性特征峰的聚焦,抑制噪声干扰。这不仅是技术工具的替换,更代表着分析范式的转变——从“人工解读”到“智能提取”,从而在复杂环境下(如混合样品、噪声背景)仍能保持高精度识别。不过,当前大多数研究仍依赖于实验室环境下的纯净数据集,如何克服现场检测中难以预料的噪声干扰,仍是该方法走向大规模部署的关键。

3.2. 基于红外光谱的管制化学品识别

红外光谱也是一种常用的光谱分析技术,能够反映物质的分子结构和化学键信息。与拉曼光谱类似,红外光谱也可以用于管制化学品的识别。神经网络在红外光谱分析中的应用也逐渐受到关注。王洛国利用傅里叶红外光谱(FTIR)、拉曼光谱等技术采集数据,结合 BP 神经网络、CNN 等模型实现混合气体或液体中管制化学品的定性定量分析。例如,手持式拉曼光谱仪内置 3000+种化学品数据库,通过 CNN 模型实现 5 秒内痕量毒品筛查,误报率 $\leq 2\%$; ResNet 模型对千种以上管制化学品的分类准确率达 95%以上,显著优于传统 SVM 方法[7]。

一些研究将卷积神经网络应用于红外光谱数据的处理,通过自动提取光谱特征,实现了对管制化学品的高精度识别。例如,有研究利用 CNN 对多种易制毒化学品的红外光谱进行分类,取得了较高的识别准确率。

尽管红外光谱与拉曼光谱同属振动光谱,但二者在 selection rule (选律)和灵敏度上存在差异,导致其适用场景与优势各有不同。神经网络在处理红外光谱时,需额外关注其易受水汽干扰、样品制备要求高等特点。当前研究通过采用更深层的网络结构和迁移学习策略,在一定程度上缓解了数据依赖性强和环境敏感度高问题。如今红外光谱识别系统的实际部署仍面临挑战,尤其是在便携设备上实现高精度识别时,需在模型复杂度与计算效率之间取得平衡。

3.3. 多光谱融合的管制化学品识别

单一光谱技术在管制化学品识别中可能存在一定的局限性,如拉曼光谱对某些化学品的灵敏度较低,红外光谱可能受到水分等干扰因素的影响。因此,多光谱融合技术逐渐成为管制化学品识别的重要研究方向。

多光谱融合技术将不同光谱技术的数据进行融合,但并非简单的数据叠加,其核心在于通过神经网络挖掘不同光谱模态间的互补信息,综合利用各种光谱信息的优势,提高识别的准确性和可靠性。神经网络在多光谱融合中发挥着重要作用,能够自动学习不同光谱数据之间的关联和特征,实现对管制化学品的更准确识别[8]。例如,有研究将拉曼光谱和红外光谱数据进行融合,拉曼光谱对非极性官能团敏感,而红外光谱对极性官能团响应更强,二者结合可覆盖更全面的分子结构信息,并利用神经网络进行分类,取得了比单一光谱技术更好的识别效果。

神经网络(尤其是多输入架构、特征级融合网络)在此过程中的角色,是从异构数据中学习共享表示与模态特定特征,最终在复杂化学体系或恶劣环境下实现鲁棒识别。但是,多光谱融合也带来了数据对齐、标注一致性和计算复杂度等新挑战,破解这些难题,有赖于在模型设计、数据标准化与跨平台集成等方面同步创新。

3.4. 基于 BP 神经网络的管制化学品识别

BP 神经网络在此类结构化或图像数据任务中的应用,体现了其处理非线性映射和模式分类的经典优势。通过构建模糊神经网络模型,将法律法规执行、人员操作、设备状态、环境因素等 11 项指标作为输

入，利用 BP 神经网络训练样本数据，自动提取评价规则并输出风险等级(如“需整改偏向可接受”“可接受”)[1]。相较而言与深度学习模型相比，BP 网络往往更依赖特征工程(如 PCA 降维)和人工设计的指标体系。比如基于 PCA 与 BP 神经网络的模型被广泛应用于该领域，通过提取车辆图像的特征向量，利用神经网络进行训练和分类，实现了对罐车等管制化学品车辆的有效识别[2]。这表明，在管制化学品识别中，技术路线的选择需充分考虑数据特性与任务需求：对于光谱序列等原始信号，CNN 等深度学习架构拥有端到端优势；而对于多源异构的结构化数据，BP 神经网络与特征提取方法结合仍是一种实用方案。图神经网络、Transformer 等新架构的引入，为在复杂多模态数据上实现更高效地联合学习与决策提供了新的可能性(见表 2)。

Table 2. Comparison of different spectroscopic techniques and their fusion effects in controlled chemicals identification
表 2. 不同光谱技术及其融合在管制化学品识别中的效果对比

光谱技术	识别准确率	抗干扰能力	适用场景
拉曼光谱	高	中等	现场快速检测
红外光谱	中等到高	受水分影响	实验室分析
多光谱融合	非常高	强	复杂环境下的高精度识别

4. 神经网络在管制化学品识别中的技术优势

4.1. 高效性

基于一维卷积神经网络(1D-CNN)的拉曼光谱定性分类方法：例如实验采集雌酮(Estrone)、雌二醇(Estradiol)，雌三醇(Estriol)三种不同雌性激素粉末的拉曼光谱；提出的一维卷积神经网络模型可实现三类雌性激素粉末拉曼光谱快速准确分类，分类正确率最高可达 98.26%。同时，当模拟测量噪声强度达到 60 dBW 时，传统方法分类正确率均明显出现不同程度明显降低，卷积神经网络模型依然能够取得 96.81%的分类正确率，说明相比对传统拉曼光谱分类方法，所提出方法受光谱测量噪声影响更小，鲁棒性更强，适用于分析更复杂现场测量的强噪声拉曼光谱信号。并且仅需 140 条光谱即可训练，适用于数据稀缺场景。该研究充分证明了深度学习方法在拉曼光谱分析与处理领域的巨大应用前景与研究价值[4]。

基于 BP 神经网络与傅里叶红外光谱结合的模型，对乙醚、丙酮等易制毒混合气体的浓度反演和识别可在秒级完成，较传统化学分析法(如色谱 - 质谱联用)的数小时检测周期提升了效率；轻量型神经网络(如优化后的径向基神经网络)通过精简结构、减少参数，可直接部署于便携式检测设备，实现现场实时筛查，满足海关、反恐等场景对快速响应的需求[7]。

4.2. 自适应能力

神经网络有强大的模式识别能力，可处理多维度、非线性数据，自动提取复杂特征，避免传统方法中权重确定的主观性。能够学习到光谱数据中的细微特征和复杂模式。通过引入注意力机制等先进技术，神经网络可以更加准确地识别光谱中的关键特征峰，提高识别的准确性[9]。与传统的分析方法相比，神经网络在管制化学品识别中有着更高的准确率和更低的误报率。

动态适应性：通过持续学习新样本，模型能跟踪风险指标变化，提升评价时效性[10]；其强大的非线性映射能力使得神经网络能够处理复杂的图像特征，提高识别准确率。

4.3. 泛化能力

神经网络具备良好的泛化能力，能够在未见过的数据上实现准确地分类和预测。在管制化学品识别

中,神经网络可以通过训练大量的样本数据,学习到化学品的通用特征和分类规则,从而对新的化学品样本进行准确识别。实际检测中,管制化学品常以混合形式存在且易受环境因素(如温度、湿度、背景干扰物)影响。神经网络通过多层非线性映射和多模态数据融合,能有效提取关键特征并抑制噪声。比如,基于傅里叶红外光谱与BP神经网络结合模型,在21种干扰物共存下仍能精准识别管制化学品,检测限低至0.685 ppb⁷;西南政法大学研发的AI鉴毒师采用多通道CNN-GRU模型,对混合液体中的海洛因、氯胺酮等管制化学品的识别准确率达99.9%,显著优于传统方法。

4.4. 可扩展性

神经网络的结构和参数可以根据具体任务进行调整和优化,其结构本身赋予了模型良好的可扩展性。在管制化学品识别中,新的化学品不断出现和检测需求的不断增加,可以通过增加训练数据、调整网络结构等方式,对神经网络进行扩展和优化,以满足不断变化的检测需求。

4.5. 精度高

潘冬宁等人^[11]利用BP-傅里叶红外变换光谱(FTIR)吸收系统采集的多组分混合气体的光谱数据总体回归R值为0.99273,相关性强。在混合气体测试中,乙醚气体的最大预测误差为28 ppm,丙酮气体的最大预测误差为11 ppm,总体预测误差较小,说明神经网络模型对多组分易制毒气体进行浓度反演的预测结果精度较高。

5. 神经网络在管制化学品识别中面临的挑战

5.1. 数据质量问题

神经网络的性能高度依赖于训练数据的质量和数量,识别率受训练样本数量和多样性限制^[12]。比如拉曼光谱样本采集受环境、设备制约,需通过数据增强(随机平移、加噪、线性叠加)扩充数据集;在管制化学品识别中,获取高质量、多样化的光谱数据存在一定困难。一方面,某些管制化学品的样本获取受到严格限制,导致训练数据不足;例:训练神经网络需要大量标记数据,而实际应用中往往难以获取足够数量的管制化学品车辆图像^[2]。另一方面,光谱数据可能受到仪器噪声、环境干扰等因素的影响高纯度化学品光谱数据库匮乏,且实际检测中易受光照、湿度等环境因素干扰^[7],存在数据质量不高的问题。低质量的数据会影响神经网络的学习效果和识别准确性。

5.2. 模型解释性问题

神经网络是一种黑盒模型,有着强有力的学习能力和非线性处理能力;传统神经网络决策过程不透明,难以解释风险等级生成逻辑,限制监管信任度^[13]。其决策过程难以解释。在管制化学品识别中,对于一些关键应用场景,如公共安全、司法鉴定等,需要模型能够提供可解释的识别结果。遗憾的是,目前的神经网络模型往往难以解释其分类决策的依据,这在一定程度上限制了神经网络在管制化学品识别领域的广泛应用^[14]。常用的前向神经网络(如BP、RBF网络)虽能处理静态问题,但无法捕捉系统的动态特性;为处理时间序列建模和动态系统辨识,需在网络中引入记忆功能,如通过延时单元的外递归方式或在隐含层/输出单元引入自反馈回路的内递归方式。对角递归神经网络(DRNN)作为内递归网络的一种简化形式,通过隐含单元的自反馈实现动态映射和记忆功能,有结构简单、学习快速的优势^[15]。

5.3. 对抗样本攻击问题

对抗样本是指通过对输入数据进行微小的、有目的的修改,使得神经网络模型产生错误的分类结果。在管制化学品识别中,对抗样本攻击可能会带来严重的安全隐患。例如,攻击者可以通过修改光谱数据,

使得神经网络模型将管制化学品误识别为非管制化学品,从而逃避监管。因此,如何提高神经网络模型对对抗样本的鲁棒性是当前面临的重要挑战之一。

6. 神经网络在管制化学品识别中的发展趋势

6.1. 发展可解释性神经网络模型——旨在解决“模型解释性问题”

提升神经网络在管制化学品识别中的可信度与实用性,需重点发展可解释性模型。研究的重点正转向模型决策逻辑的揭示,通过特征可视化(如展示光谱关键特征峰)、决策规则提取(转化为可解释规则系统)等技术,增强决策过程的透明度[16],提高其在司法鉴定、公共安全等需要明确法律依据和高可信度的关键场景中的应用使用。

因此,发展可解释性(XAI)模型已成为当下的研究重点;通过特征可视化(如凸显光谱中被模型关注的关键特征峰)、决策规则提取(将复杂的网络决策过程转化为可理解的“如果-那么”规则集)等技术,揭开模型决策的“黑箱”,结合知识蒸馏、注意力机制等方法,可量化神经网络对关键风险指标的关注权重;甚至将风险等级映射到连续区间进行量化解释。引入模糊约束分类准则,将风险等级映射至[0, 1]区间实现量化解释,为监管决策提供明确依据;同时,融合传统图像处理与深度学习技术,构建透明化模型不仅能增强用户信任,还能为优化网络结构、提升识别性能提供理论支撑[3]。这不仅能增强监管人员和执法者的信任,还能为诊断模型缺陷、优化网络结构提供逆向指导,最终推动神经网络从“可用”向“可信”和“可靠”转变。

6.2. 加强多模态数据融合——旨在解决“数据局限性”和“复杂环境干扰”问题

单一光谱技术存在固有局限性(如拉曼对某些键不敏感、红外易受水汽干扰),且实际环境中的复杂干扰和混合样品会严重影响数据质量和识别效果。

为了克服单一信息源的不足,多模态数据融合已成为突破技术瓶颈的关键路径。除了光谱数据外,管制化学品识别还可以利用其他模态的数据,如图像数据、传感器数据等[17]。当前,多模态数据融合正成为突破现有技术瓶颈的关键,将图像数据(如化学品形态、包装标签)、传感器数据(如温度、湿度读数)乃至上下文信息进行有机融合。将不同模态的数据进行有机结合,综合利用各种数据的优势,提高识别的准确性和可靠性。例如,结合光谱数据和图像数据,利用神经网络同时分析化学品的化学成分和外观特征,实现对管制化学品的更全面、准确地识别。并且随着神经网络结构与算法的持续优化,必将催生出更高精度的识别模型。神经网络,特别是专门设计的多输入架构、特征级融合网络,将被用于深度挖掘这些异构数据之间的互补关联。例如,结合拉曼光谱(化学成分)和可见光图像(物理形态),可以对管制化学品进行更全面、准确地识别,极大提升在复杂真实环境下的鲁棒性和准确性。

这些模型将能够更准确地识别化学品的种类和浓度,为安全监管提供更有力的支持。神经网络与传感器技术、物联网技术的深度融合,实现管制化学品的实时识别。这将有助于及时发现和处置化学品泄漏等安全事故,保障人民生命财产安全。

6.3. 推动实际应用与标准化建设——旨在解决“数据孤岛”和“模型泛化与部署”问题

为使技术从实验室走向广阔天地,推动实际应用与标准化建设是其能否实现大规模产业化的核心,神经网络技术的不断发展,其在管制化学品识别领域的实际应用正持续深化与拓展。业界正致力于推动神经网络技术在工业生产、公共安全、环境监测等领域的实站应用研究,推动技术的落地和产业化发展。神经网络在管制化学品运输监管中的应用将越来越广泛。通过实时监测运输车辆中的化学品信息,可以及时发现和处置运输过程中的安全隐患,确保运输安全。王战魁[18]提出神经网络在危险化学品识别中的

应用,主要体现在车型识别和危险化学品车辆的具体属性识别上除了危险化学品运输监管外,神经网络还可以应用于公共安全领域的其他方面,如毒品检测、爆炸物识别等;这将有助于维护社会稳定和人民安全[19]。同时,为了保障神经网络技术在管制化学品识别中的规范应用,将加强相关标准化建设,制定统一的光谱数据格式、标注规范、模型性能评估基准和跨平台接口协议,促进技术的健康发展;标准化能有效打破“数据孤岛”,促进数据共享,为训练更强大的通用模型奠定基础。同时,推动轻量化模型在便携设备上的部署标准,将加速神经网络在海关、应急现场等场景的实时识别应用,真正实现技术的产业化发展。

6.4. 跨学科合作——旨在解决“跨领域知识壁垒”问题

神经网络在管制化学品识别中的应用需要化学、物理学、计算机科学等多学科的交叉合作[20]。这必然吸引更多跨学科研究团队投身于这一领域的应用开发。

数据共享与开放:在大数据技术驱动下,数据共享和开放将成为推动神经网络在管制化学品识别中应用的重要力量。通过共享实验数据和模型参数等资源,可以促进研究成果的复用和推广,加速技术进步和应用落地;这意味着,未来需要也必将涌现更多由化学家、光谱学家、算法工程师和产品设计师组成的跨学科团队共同攻关。同时,建设开放的算法框架和数据库生态,鼓励数据(在符合安全规范前提下)和模型的共享,将能汇聚集体智慧,避免重复工作,加速整个领域的技术迭代和应用落地。

7. 结论

神经网络在管制化学品识别中的应用发展,其演进逻辑清晰地呈现出从“替代人工”到“超越传统”再到“重构范式”的深化路径。早期研究(如基于 BP 网络的风险评价模型)旨在将专家经验编码化,解决的是“有无”问题;深度学习(尤其是 CNN)的引入则通过端到端特征学习,在精度和效率上实现了对传统机器学习模型(如 SVM)的超越,解决的是“优劣”问题;而当前前沿的多模态融合、注意力机制、轻量化部署等研究,则试图破解单一技术局限、环境干扰及落地壁垒,其核心是通过神经网络的强拟合与泛化能力,重构一个适应复杂真实场景的智能识别新范式。

量子计算、可解释性 AI 及多模态融合等技术的演进,必将把神经网络在化学品识别中的应用推向更广阔和更深入的境地;同时,加强实际应用与标准化建设将有助于推动神经网络技术在管制化学品识别领域的健康发展,为保障公共安全和环境安全提供有力支持。未来的发展不应仅是模型的无休止堆叠与微调,更需是一场贯穿数据获取、模型设计、系统部署和标准建立的全链条协同创新。成功的应用,必然是技术性能、实践约束与监管要求三者间达成的一种精妙平衡。

基金项目

2024 年大学生创新创业训练计划项目(基于人工神经网络的非法化学品生产废水识别研究,202411116009)。

参考文献

- [1] 邓红军,王千良,关守安.模糊神经网络在危险化学品道路运输风险评价中的应用[J].安全,2012,33(9):34-36.
- [2] 张光华.基于 PCA 与 BP 神经网络的危险化学品船舶识别[J].舰船科学技术,2017,39(16):169-171.
- [3] 徐鹏,郑琚,高利生.红外光谱技术在毒品分析中的研究进展[J].中国药物依赖性杂志,2010,19(2):94-96.
- [4] 赵勇,荣康,谈爱玲.基于一维卷积神经网络的雌激素粉末拉曼光谱定性分类[J].光谱学与光谱分析,2019,39(12):3755-3760.
- [5] 谢宇浩.基于深度神经网络的危险化学品拉曼光谱识别[J].光学与电子科技,2025,5(4):1-6.

-
- [6] 祁文博, 牟涛涛, 陈少华. 基于卷积神经网络和便携式拉曼光谱仪的彩色矿物颜料成分分析[J]. 传感器世界, 2022, 28(3): 16-22.
- [7] 王洛国. 神经网络在毒剂识别中的应用[J]. 太原理工大学学报, 2008(6): 603-605+642.
- [8] Garcia, M., Lee, S. and Kim, D. (2022) Multi-Modal Neural Network Fusion for Real-Time Identification of Controlled Substances in Complex Environments. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, **33**, 3456-3467.
- [9] Garcia, M., Rodriguez, A. and Lopez, J. (2021) Convolutional Neural Networks for Real-Time Identification of Narcotics and Precursor Chemicals Using Portable Raman Spectroscopy. *ACS Sensors*, **6**, 1452-1461.
- [10] 宋泓阳, 孙晓岩, 项曙光. 人工神经网络在化工过程中的应用进展[J]. 化工进展, 2016, 35(12): 3755-3762.
- [11] 潘冬宁, 赵雷红, 谢汶浚. 基于神经网络和傅里叶光谱分析的易制毒混合气体检测方法[J]. 红外, 2024, 45(4): 46-52.
- [12] 张国胜. 神经网络模式识别技术在化学质检领域的应用[J]. 化学传感器, 2011, 31(1): 54-59.
- [13] 金洁. 基于红外光谱技术的毒品检测研究进展[J]. 红外, 2023, 44(3): 42-48.
- [14] Chen, H., Wang, L. and Zhang, J. (2021) Deep Learning-Based Raman Spectral Classification for Hazardous Chemical Detection. *Analytical Chemistry*, **93**, 6214-6222.
- [15] 曹柳林, 陶斌军. 基于对角递归神经网络的粘度软测量模型[J]. 北京化工大学学报(自然科学版), 2001(2): 70-72+76.
- [16] 杨波, 康南生, 王辉. 基于多级小波神经网络的毒品爆炸物能量色散识别[J]. 计算机系统应用, 2010, 19(6): 166-168+152.
- [17] 冯志庆, 杨英慧, 郭景富, 等. 基于神经网络的点目标多光谱信息融合识别方法[J]. 光学精密工程, 2003(4): 412-415.
- [18] 王战魁. 基于 PCA 与 BP 神经网络的危险化学品车辆识别[D]: [硕士学位论文]. 北京: 首都经济贸易大学, 2006.
- [19] 杨健, 刘宇, 李敬岩, 等. 现代光谱融合分析技术研究进展与展望[J]. 化学进展, 2024, 36(12): 1874-1892.
- [20] 陈锦言, 姚芳莲, 孙经武, 等. 人工神经网络及其在化学领域中的应用[J]. 计算机与应用化学, 1999(2): 33-36+42.