# 激光与光电子学进展

# 激光诱导击穿光谱技术结合 PCA-PSO-SVM 对矿石分类识别

文大鹏1,梁西银1\*,苏茂根2,杨富春2,张天辰1,陈瑞霖1,吴梦1

<sup>1</sup>西北师范大学物理与电子工程学院甘肃省智能信息技术与应用工程研究中心,甘肃 兰州 730070; <sup>2</sup>西北师范大学物理与电子工程学院甘肃省原子分子物理与功能材料重点实验室,甘肃 兰州 730070

摘要 利用激光诱导击穿光谱(LIBS)技术结合主成分分析-粒子群优化-支持向量机(PCA-PSO-SVM)算法对 12类矿石进行分类识别。运用 Savitzky Golay 滤波、分段特征值提取法对光谱进行平滑滤波与基线校正预处理。 选取经主成分分析(PCA)降维后的前25个主成分作为PSO-SVM分类模型的输入,得到对12类矿石的最佳识别 准确率为100%。分别建立主成分-线性判别分析(PCA-LDA)、主成分-粒子群优化-误差反向传播神经网络(PCA-PSO-BP)两种分类模型,并与PCA-PSO-SVM模型进行对比实验,结果表明,PCA-PSO-SVM分类模型的识别准 确度最高,其平均识别准确率可达99.90%。

关键词 激光光学;激光诱导击穿光谱;主成分分析;粒子群优化算法;支持向量机;矿石分类
 中图分类号 O433.4 文献标志码 A doi: 10.3788/LOP202158.2314006

## Classification of Ores Using Laser-Induced Breakdown Spectroscopy Combined with PCA-PSO-SVM

Wen Dapeng<sup>1</sup>, Liang Xiyin<sup>1\*</sup>, Su Maogen<sup>2</sup>, Yang Fuchun<sup>2</sup>, Zhang Tianchen<sup>1</sup>, Chen Ruilin<sup>1</sup>, Wu Meng<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Engineering Research Center of Gansu Province for Intelligent Information Technology and Application, College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou, Gansu 730070, China;

<sup>2</sup>Key Laboratory of Atomic and Molecular Physics & Functional Material of Gansu Province,

 $College \ of \ Physics \ and \ Electronic \ Engineering, \ Northwest \ Normal \ University, \ Lanzhou, \ Gansu \ 730070, \ China \ Northwest \ Normal \ University, \ Lanzhou, \ Gansu \ 730070, \ China \ Northwest \ Normal \ University, \ Lanzhou, \ Gansu \ 730070, \ China \ Northwest \ Normal \ University, \ Lanzhou, \ Gansu \ 730070, \ China \ Northwest \ Normal \ University, \ Lanzhou, \ Gansu \ 730070, \ China \ Northwest \ Normal \ University, \ Lanzhou, \ Gansu \ 730070, \ China \ Northwest \ Normal \ University, \ Lanzhou, \ Gansu \ 730070, \ China \ Northwest \ Normal \ University, \ Lanzhou, \ Gansu \ 730070, \ China \ Northwest \ Normal \ University, \ Lanzhou, \ Gansu \ 730070, \ China \ Northwest \ Normal \ University, \ Lanzhou, \ Gansu \ 730070, \ China \ Northwest \ Normal \ University, \ Lanzhou, \ Gansu \ 730070, \ China \ Northwest \ Normal \ University, \ Lanzhou, \ Gansu \ 730070, \ China \ Northwest \ Normal \ Northwest \ Northwes$ 

**Abstract** Twelve types of ores were identified using laser-induced breakdown spectroscopy combined with the principal component analysis-particle swarm optimization-support vector machine (PCA-PSO-SVM) algorithm. A Savitzky-Golay filter was used to smooth the spectrum, and the segmented eigenvalue extraction method was used to perform baseline correction on the spectrum. The first 25 principal components reduced by PCA were selected as the input to the PSO-SVM classification model, and the best recognition accuracy rate for the 12 types of ore was 100%. The PCA-PSO-SVM model was compared with two classification models, i.e., principal component-linear discriminant analysis and a PCA-particle swarm optimization-error back propagation neural network. Experimental results showed that the recognition accuracy of the PCA-PSO-SVM classification model was the highest with an average recognition accuracy rate of up to 99.90%.

**收稿日期**: 2021-03-04; **修回日期**: 2021-04-01; 录用日期: 2021-04-09 基金项目: 甘肃省引导科技创新专项(2019zx-10) 通信作者: \*silver@nwnu. edu. cn

Key words laser optics; laser-induced breakdown spectroscopy; principal component analysis; particle swarm optimization algorithm; support vector machine; ore classification **OCIS codes** 140. 3440; 200. 4260; 300. 6365

#### 1 引 言

矿产资源是经济社会发展的重要物质基础,而 矿石鉴定是地质勘探中必不可少的工作。传统的 鉴定方法是依靠矿石的外形与物理性质进行手标 本鉴定,该方法简便易行且成本低,但鉴定的准确 度较差,且对鉴定人员的专业知识要求高[1]。随着 地质勘探数字化技术的不断发展,X射线荧光光谱 法(XRF)、X射线衍射分析法(XRD)、y能谱法陆续 被应用到矿石鉴别,但这些方法大都需要在实验室 进行,且样品制作过程复杂,很难实现对矿石的快 速在线识别<sup>[2-3]</sup>。

激光诱导击穿光谱(LIBS)检测是一种原子发 射光谱分析方法,具有快速实时在线检测、样品制 备简单、破坏性小等优点,已被广泛应用于地质分 析、食品安全、文化遗产、生物医学分析等领域[47]。 将LIBS技术与机器学习方法结合可实现对物质种 类、等级、产地等的快速分类识别。Yang 等<sup>[2]</sup>采用 LIBS技术结合主成分分析(PCA)与人工神经网络 (ANN)对来自3个产出国的12个品牌的铁矿石进 行鉴别,该方法对铁矿石产出国的识别率达到 100%,对铁矿石品牌的平均识别率为99.19%。董 鹏凯等<sup>[4]</sup>采用LIBS技术结合PCA后,再分别结合 误差反向传播神经网络(BPNN)和支持向量机 (SVM)对人参产地进行分类识别,两种算法对人参 产地的平均识别率分别达到 99.08% 和 99.5%。 Sheng 等<sup>[8]</sup>将 LIBS 技术分别与 SVM、随机森林 (RF)方法结合,对10个等级的铁矿石进行分类识 别,结果表明LIBS技术结合SVM对铁矿石等级的 识别率为96%,LIBS技术结合RF对铁矿石的等级 识别率达到100%。

目前采用LIBS技术结合机器学习方法对矿石 进行分类识别的研究还比较少。本文以公开发表 的LIBS矿石数据集为实验数据集<sup>[9]</sup>,首先对矿石的 LIBS 光谱数据进行平滑、基线校正、归一化等预处 理,通过PCA对光谱数据进行降维;然后,建立粒子 群优化(PSO)的支持向量机分类模型(PCA-PSO-SVM),对矿石的LIBS光谱数据进行分类识别;最 后,分别建立PCA-线性判别分析分类模型(PCA- LDA)、PCA-粒子群优化-BP神经网络分类模型 (PCA-PSO-BP),并将它们与PCA-PSO-SVM分类 模型进行矿石分类识别对比实验。结果表明,LIBS 技术结合 PCA-PSO-SVM 分类方法可对矿石进行 快速且高准确度的识别。

#### PSO-SVM算法原理 2

#### 2.1 PSO 算法

PSO算法是一种基于种群搜索的优化算法,最 早由 Reynolds 提出, Kennedy 和 Eberhart<sup>[10]</sup>在 1995年 对该算法进行改进。PSO算法用粒子的速度、位 置、适应度值代表粒子的特征,适应度值由适应度 函数计算得到[11]。粒子在多维搜索空间中运动,每 次运动后获取个体所经历位置的最优适应度位置 作为个体极值pbest,将群体中所有粒子搜索到的最 优适应度位置作为群体极值 $g_{\text{best}}$ ,通过个体极值 $p_{\text{best}}$ 与群体极值gbest更新个体的速度与位置,不断迭代, 从而在解空间中获取最优解。PSO算法更新速度 与位置的方程式为[12]

$$\boldsymbol{v}_{k}(t+1) = \boldsymbol{\omega} \boldsymbol{v}_{k}(t) + c_{1} \operatorname{rand}_{1} \left[ \boldsymbol{p}_{\operatorname{best}_{k}} - \boldsymbol{x}_{k}(t) \right] + c_{2} \operatorname{rand}_{2} \left[ \boldsymbol{g}_{\operatorname{best}} - \boldsymbol{x}_{k}(t) \right], \quad (1)$$

$$\mathbf{x}_k(t+1) = \mathbf{x}_k(t) + \mathbf{v}_k(t+1), \quad (2)$$

式中: $\mathbf{x}_{k} = [x_{k1}, x_{k2}, \cdots, x_{kn}]^{\mathrm{T}}$ 为第 k个粒子在 n 维搜 索空间中的位置; $\boldsymbol{v}_k = \left[ v_{k1}, v_{k2}, \cdots, v_{kn} \right]^{\mathrm{T}}$ 为第 k个粒 子的速度; $p_{\text{best}_k}$ 表示第k个粒子的最优位置; $g_{\text{best}}$ 表 示群体中所有粒子的最优位置;c1与c2为加速度因 子; rand<sub>1</sub>与 rand<sub>2</sub>是[0,1]区间内两个独立的随机 数<sup>[13]</sup>;t为当前迭代次数;ω为惯性权重,该值较大 时,全局搜索能力强,该值较小时更利于局部搜索, 且该值的不合理设置容易导致算法陷入局部最优。 为平衡PSO算法的全局与局部搜索能力和避免陷 入局部最优,通常采用动态惯性权重,本文采取线 性递减惯性权重[14-15],即

$$\omega = \frac{(\omega_{\text{start}} - \omega_{\text{end}})(t_{\text{max}} - t)}{t_{\text{max}}} + \omega_{\text{end}} , \qquad (3)$$

式中: $\omega_{\text{start}}$ 与 $\omega_{\text{end}}$ 分别为 $\omega$ 的起始值与终止值; $t_{\text{max}}$ 为 最大迭代次数。通常取 $\omega_{\text{start}} = 0.9$ 和 $\omega_{\text{end}} = 0.4$ 获 得最优的搜索能力<sup>[12]</sup>。

#### 2.2 SVM

SVM 是由 Vapnik 于 1995年提出,是一种基于 统计学习理论的机器学习方法,最初是为解决二值 分类问题而设计<sup>[16]</sup>。SVM 的构造需要设计最优分 类超平面并获得其决策函数,设输入数据集为 I = $\{(x_i, y_i), x \in \mathbb{R}^d, y \in \mathbb{R}\}(i = 1, 2, ..., n), 其中 x_i 为包$ 含 <math>d 个特征的输入特征向量,  $y_i$  为期望输出,即 类别标签; SVM 分类器模型可表示为f(x) = $\eta \varphi(x) + b$ ,其中 $\varphi(x)$ 为非线性函数, $\varphi(x)$ 将输入 数据映射到高维特征空间中, $\eta \varphi(x) + b = 0$ 可表示 最优分类超平面;决策函数可表示为f(x) =sign [ $\eta \varphi(x) + b$ ];由于分类器会有一定的容错率, 故通常采用软边距SVM分类器,其定义式为<sup>[17-19]</sup>

$$R(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{\eta}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\eta} + C\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{\xi}_{i}, \qquad (4)$$

s.t.  $y_i \left( \boldsymbol{\eta}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_i + b \right) \ge 1 - \boldsymbol{\xi}_i, \ \boldsymbol{\xi}_i \ge 0,$  (5)

式中:**η**为超平面斜率,是一个n维向量; *5*为松弛变量; *C*为惩罚因子。采用拉格朗日乘子法求解优化

可以得到最优分类决策函数[18]

$$f(\mathbf{x}) = \operatorname{sign}\left[\sum_{i=1}^{n} y_i \alpha_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + b\right], \quad (6)$$

式中: $\alpha_i$ 为拉格朗日乘子,其取值范围为  $0 \leq \alpha_i \leq C$ ; $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})$ 为核函数。本文采用径向基函 数作为核函数,该函数可表示为<sup>[20-21]</sup>

$$K(\boldsymbol{x}_{i},\boldsymbol{x}) = \exp\left(-\gamma \left\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_{i}\right\|^{2}\right), \, \gamma > 0_{\circ} \quad (7)$$

#### 2.3 PSO优化 SVM 算法

本文的 SVM 算法采用径向基函数作为核函数,该 SVM 分类器的性能主要受惩罚因子 C 与参数γ的影响。太大的 C 将导致模型在训练集上的分 类准确率较高,在测试集上的分类准确率较低,太 小的 C 将导致模型在训练集与测试集上的分类准确 率都较低;参数γ太大会导致模型输出过拟合,太小 则会导致欠拟合。为了得到合适的惩罚因子 C 与参 数γ,本实验采用 PSO 算法对这两个参数进行寻优, 从 而 到 达 优 化 SVM 分类器的目的。 PSO 优 化 SVM 算法的流程如图 1 所示。



图 1 PSO-SVM分类模型流程 Fig. 1 Flow of PSO-SVM classification model

#### 3 实验数据获取与预处理

#### 3.1 矿石数据集的获取

本实验的LIBS 矿石数据集来源于 Képeš 等<sup>[9]</sup> 提供的LIBS 基准分类数据集,该数据集由138个样 品的LIBS 光谱组成,这些样品属于12个矿石类别, 这12类矿石的信息如表1所示。本实验从该数据 集的每个类别中随机取出100条光谱对应的数据, 组成包含12个矿石类别、共1200条光谱的实验数 据集。

图 2 为 12 类矿石的 LIBS 全谱图,可以看到 12 类矿石的光谱形貌相似,主要元素的强度不同, 但难以从光谱图直接区分这12 类矿石,需要对光谱 数据作进一步处理,才能达到光谱识别的目的。

表1 数据集中的矿石类别信息

Table 1	Ore category	information	in the o	lataset
---------	--------------	-------------	----------	---------

Ore category label	Ore name	Ore category label	Ore name	Ore category label	Ore name
Ore 1	U ore	Ore 5	Au-Cu ore	Ore 9	Hematite ore
Ore 2	Zn-Pb-Ag sulfide ore	Ore 6	Mn ore	Ore 10	Anomalous ferruginous ore
Ore 3	Ni-Cu ore	Ore 7	Gold oxide ore	Ore 11	Silver copper gold ore
Ore 4	Sn ore	Ore 8	Zinc sulfide ore	Ore 12	Skarn tungsten magnetite ore



图 2 12类矿石样品的LIBS全谱图 Fig. 2 LIBS spectra of 12 types of ore samples

### 3.2 数据预处理

由于不同波长对应的强度值相差较大,且LIBS 光谱测量存在连续背景与随机误差,故需要对测量 的光谱数据进行归一化与平滑、基线校正等预处 理,以提高模型分类识别的准确率。以U ore 的任 一组光谱数据为例,首先将光谱强度值中小于0的 异常值全部用0替换,并采用Savitzky Golay滤波对 光谱数据进行平滑滤波处理;然后对光谱数据进行 基线校正,本实验采用分段特征值提取法进行基线 校正,其主要过程如下<sup>[57]</sup>。

1)将光谱数据平均分为N个数据点群,即

$$N = \frac{\lambda_{\rm WL}}{N_{\rm num}},\tag{8}$$

式中:λ<sub>wL</sub>为光谱数据的波长范围;N<sub>num</sub>为每个数据 点群的像素点数量。

2) 分段求取特征值点,即每个数据点群中光谱

#### 第 58 卷 第 23 期/2021 年 12 月/激光与光电子学进展

#### 研究论文

强度的最小值 Imin:

$$I_{\min} = \min\{A(\alpha_i)\}, j = 1, 2, 3, \cdots, N_{\circ}$$
(9)

3)基线校正,将每个数据点群的光谱强度值减 去对应点群的特征值点,并拼接N个数据点群,得 到基线校正后的光谱数据。

4) 将该组光谱数据归一化到[0,1],归一化的 公式为

$$y = \frac{y - y_{\min}}{y_{\max} - y_{\min}},$$
 (10)

式中:y为该组光谱在各个波长的强度值;y<sub>min</sub>为该 组光谱数据强度值中的最小值;y<sub>max</sub>为该组光谱数 据强度值中的最大值。

图 3(a)为U ore 的一组原始光谱图,图 3(b)为 预处理后的光谱图。



图 3 U ore 的 LIBS 光谱。(a) 原始光谱;(b) 预处理后的光谱 Fig. 3 LIBS spectra of U ore. (a) Original spectrum; (b) spectrum after preprocessing

4 结果与分析

#### 4.1 PCA

PCA 是一种广泛使用的统计方法,可实现数据 压缩与特征提取。本实验使用的数据集中每条光 谱包含40002个波长点,若将全谱的强度值作为分 类模型的输入数据,将出现输入维度高、训练时间 长、模型难以收敛等问题,故本实验将预处理后得 到的1200×40002光谱矩阵作为PCA的输入,从而 降低分类模型的输入维度。

图 4(a) 所示为经过预处理的数据在 PCA 处理 后的前 10 个主成分得分与累计得分, 左纵轴表示各



图 4 12类矿石 LIBS 数据的 PCA 分析结果。(a)各主成分得分和主成分累计得分;(b)前 3 个主成分的三维散点图 Fig. 4 PCA analysis results of LIBS data for 12 types of ores. (a) Each principal component score and the cumulative score of principal components; (b) three-dimensional scatter plot of the first three principal components

#### 研究论文

个主成分的解释率,右纵轴表示主成分的累计解释 率。可以看到,前10个主成分的累计得分达到 97.5%,可以代表矿石光谱的主要信息。图4(b)为 预处理后的矿石数据经过PCA降维后,对前3个主 成分通过聚类分析得到的三维散点图,每个散点代 表一个样本。可以看出,样本的聚类效果较好,同 类样本呈区域性聚集,达到了明显的区域划分效 果,但不同类样本的间隔较小,Ore 11与Ore 12样 本的分布较为稀疏,且个别样本与其他样本混杂在 一起,因此需要借助其他分类算法对经过预处理和 PCA降维的矿石数据作进一步处理。

#### 4.2 PCA-PSO-SVM对12类矿石的分类识别

本实验将经过 PCA 降维的不同数量的主成分 作为 PSO-SVM 分类模型的输入,12类矿石中每类 矿石包含 100组 LIBS 光谱数据,共1200组 LIBS 光 谱数据。从每类矿石的 100组光谱数据中随机取 60组光谱数据用于训练,即训练集包含 720组光谱 数据;每类样本剩余的 40组光谱数据用于测试,即 测试集包含 480组光谱数据。将分类准确率 (ACC; *R*<sub>ACC</sub>)作为分类模型的分类性能评价指标, 其定义为

$$R_{\rm ACC} = \sum_{i=1}^{n} T_i / \left( \sum_{i=1}^{n} T_i + \sum_{i=1}^{n} F_i \right), \qquad (11)$$

式中:T<sub>i</sub>表示第 i类矿石样本中正确分类的样本数 量;F<sub>i</sub>表示第 i第类矿石样本中错误分类的样本数 量;n表示矿石的类别数。

实验中的 SVM 算法基于台湾大学林智仁等提 供的 libsvm 3.1软件库实现。将分类模型的分类准 确率作为 PSO 的适应度函数,即 PSO 的目标函数, 其定义如(11)式所示; PSO 的关键影响参数——惯 性权重  $\omega$  采用线性递减惯性权重,其定义见(3)式, 惯性权重  $\omega$  的取值范围为  $0.4 \le \omega \le 0.9$ ;实验中将 加速度因子、粒子群规模与最大迭代次数作为 PSO 寻优 SVM 分类模型的参数,并对比寻优得到的对 应 SVM 模型分类准确率与分类时间,选定加速度 因子  $c_1 = c_2$ 分别为 0.6 = 0.7,粒子群规模为 10,最 大迭代次数为 20;将 SVM 中惩罚因子 C 的搜索范 围设置为 0.01 < C < 10000,参数  $\gamma$  的搜索范围设置 为  $0.001 < \gamma < 100$ 。

表2所示为将不同数量的主成分作为PSO-SVM分类模型的输入变量时得到的测试集分类识别结果,其中对同一种输入变量的数量重复进行 10次分类识别实验,取10次实验识别准确率的平均

#### 第 58 卷 第 23 期/2021 年 12 月/激光与光电子学进展

表 2 不同输入变量对应的 PSO-SVM 识别结果 Table 2 PSO-SVM recognition results with different

#### input variables

Numbers of	Cumulative	Average	
variables	interpretation rate $/\%$	accuracy rate $/\%$	
3	94.63	41.46	
5	96.16	76.88	
10	97.64	98.54	
15	98.03	99.79	
25	98.23	99.92	
50	98.47	99.77	

值作为该种变量数量的识别准确率。从表2可以看 到:随着输入变量的主成分数量增加,PSO-SVM模 型的识别准确率不断提高,当主成分数量为25时, PSO-SVM模型的平均准确率可达99.92%;但是当 主成分数量过大时,会导致模型的识别准确率有所 下降。

通过以上实验对比分析,本实验选定矿石光谱 数据经PCA降维后的前25个主成分作为模型的输 入来训练PSO-SVM模型,对测试集进行分类识别 的结果如图5所示。图5(a)所示为PSO寻优的适 应度曲线,其中纵坐标的适应度为十折交叉验证的 平均识别准确率,PSO寻得的SVM最优参数分别 为C=1891.93、γ=0.001。从图5(a)可以看到,在 第2次迭代后,最佳适应度达到100%,即PSO-SVM模型对训练集的交叉验证识别准确率达到 100%,模型收敛速度非常快,达到了快速优化SVM 模型参数的目的。图5(b)所示为该分类模型对测 试集的最优分类识别结果,可以看到所构建的 PSO-SVM模型对12类矿石的识别准确率可以达 到100%。

为了验证 PCA-PSO-SVM 分类模型对矿石识 别的有效性,将 PCA-PSO-SVM 与其他分类算法的 识别结果进行比较。本实验分别建立 PCA-LDA 分 类模型、PCA-PSO-BP 分类模型,并对建立的模型 进行参数优化调整。其中,PCA-PSO-BP 分类模型 中 BP 神经网络的输入层神经元数为 25,隐含层神 经元数为 15,输出层的神经元数为 25,隐含层神 经元数为 15,输出层的神经元数为 12,隐含层的激 励函数为 tansig 函数,输出层的激励函数为 purelin 函数,学习率为 0.1,网络训练的最大训练次数为 2000,网络训练目标误差为 0.01。采用 PSO 对 BP 神网络中神经元间的权值与阈值进行优化,PSO 的 参数取值如下:加速度因子 c<sub>1</sub>与 c<sub>2</sub>分别为 0.6 与 0.7,粒子群规模为 50,最大迭代次数为 80,线性递



图 5 PCA-PSO-SVM 对 12类矿石的识别结果。(a) PSO 寻优结果;(b) PCA-PSO-SVM 识别结果 Fig. 5 PCA-PSO-SVM recognition results on 12 types of ores. (a) PSO optimizing results; (b) PCA-PSO-SVM recognition results

减惯性权重的取值范围为0.4 ≪ ω ≪ 0.9。使用这 3种模型分别对预处理后的矿石数据进行50次独立 的识别实验,并记录每次实验的误差识别数量。将 50次实验的算术平均识别准确率作为该模型的识 别准确率,分别统计50次实验的分类识别时间(含 建模时间),将50次实验的算术平均分类识别时间 作为该模型的分类识别时间。图6所示为3种分类 模型分别进行50次独立识别实验的识别误差数量 对比,表3所示为3种分类模型分别进行50次独立 识别实验的结果统计。从图6与表3可以看到: PCA-LDA模型的识别性能最稳定且识别时间最 短,但其识别率只能达到98.54%,为3种模型的最 低值;PCA-PSO-BP模型的识别性能不稳定且识别



图 6 三种分类模型下对矿石分类识别的误差数量对比 Fig. 6 Comparison of number of errors in ore classification by three classification models

	表3 三种分类模型的识别结果
Table 3	Recognition results of three classification models

Model	Mean	Average classification	Average classification
	01101	time /s	accuracy / ½
PCA-LDA	7.00	1.60	98.54
PCA-PSO-BP	5.58	3.03	98.84
PCA-PSO-SVM	0.46	10.76	99.90

误差较大; PCA-PSO-SVM的分类识别虽然时间较长,但其准确率最高,最佳分类准确率可高达100%,且平均分类准确率可达99.90%。可见,所提出的PCA-PSO-SVM分类模型在矿石分类识别应用中具有较高的准确性。

#### 5 总 结

采用LIBS技术结合PCA-PSO-SVM分类模型 对12类矿石进行分类识别。对12类矿石的LIBS 光谱数据的预处理包括采用Savitzky Golay进行平 滑滤波,采用分段特征值提取法进行基线校正、归 一化等。利用PSO算法对SVM的参数进行寻优, 使得PCA-PSO-SVM模型得以快速收敛。采用 PCA对预处理后的光谱数据进行降维,并对比将不 同的主成分数量作为PCA-PSO-SVM分类模型的 输入变量时得到的识别准确率,发现分类模型的识 别准确率随着主成分数量的增加而增大,但主成分 数量较大时,分类模型的识别准确率反而有所下 降。因此,本实验选择前25个主成分作为分类模型

#### 研究论文

的输入变量,此时PCA-PSO-SVM模型的最佳识别 准确率可达100%。采用PCA-LDA、PCA-PSO-BP、PCA-PSO-SVM三种分类模型分别对12类矿 石进行识别,三种模型的平均识别准确率分别为 98.54%、98.84%、99.90%。实验结果表明,采用 LIBS技术结合PCA-PSO-SVM分类模型可对矿石 类别进行高准确度识别,为矿石类型鉴别提供了 一种有效的技术手段。

#### 参考文献

- [1] Deng T, Yu Y. Research on ore identification and separation based on improved PSO-Faster R-CNN algorithm[J]. Mining Research and Development, 2021, 41(2): 178-182.
  邓田,余翼.基于 PSO-Faster R-CNN改进算法的矿石识别分类研究[J].矿业研究与开发, 2021, 41(2): 178-182.
- [2] Yang Y W, Li C, Liu S, et al. Classification and identification of brands of iron ores using laser-induced breakdown spectroscopy combined with principal component analysis and artificial neural networks[J]. Analytical Methods, 2020, 12(10): 1316-1323.
- [3] Hu Y, Fan Z W, Li C, et al. Laser-induced breakdown spectroscopy combined with extreme learning machine mineral identification analysis research[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2016, 36(S1): 471-472.
  胡勇,范增伟,李超,等.激光诱导击穿光谱结合极

限学习机的矿物识别分析研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2016, 36(S1): 471-472.

- [4] Dong P K, Zhao S Y, Zheng K X, et al. Rapid identification of ginseng origin by laser induced breakdown spectroscopy combined with neural network and support vector machine algorithm[J]. Acta Physica Sinica, 2021, 70(4): 040201.
  董鹏凯,赵上勇,郑柯鑫,等.激光诱导击穿光谱技 术结合神经网络和支持向量机算法的人参产地快速 识别研究[J].物理学报, 2021, 70(4): 040201.
- [5] Li A Z, Wang X S, Xu X J, et al. Fast classification of tobacco based on laser-induced breakdown spectroscopy[J]. Chinese Optics, 2019, 12(5): 1139-1146.
  李昂泽, 王宪双, 徐向君, 等.激光诱导击穿光谱技 术对烟草快速分类研究[J]. 中国光学, 2019, 12(5): 1139-1146.
- [6] Zhou Z H, Tian X Y, Sun L X, et al. Identification of aluminum alloy grades by fiber-laser induced

breakdown spectroscopy combined with support vector machine[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2018, 55(6): 063002.

周中寒,田雪咏,孙兰香,等.Fiber-LIBS技术结合 SVM 鉴定铝合金牌号[J].激光与光电子学进展, 2018,55(6):063002.

- [7] Yang C R. Study of the spectral data processing in laser induced breakdown spectroscopy technology
  [D]. Beijing: Beijing Jiaotong University, 2014: 26-31.
  杨崇瑞.激光诱导击穿光谱数据处理方法研究[D]. 北京:北京交通大学, 2014: 26-31.
- [8] Sheng L W, Zhang T L, Niu G H, et al. Classification of iron ores by laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) combined with random forest (RF)[J]. Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 2015, 30(2): 453-458.
- [9] Képeš E, Vrábel J, Střítežská S, et al. Benchmark classification dataset for laser-induced breakdown spectroscopy[J]. Scientific Data, 2020, 7(1): 53.
- [10] Kennedy J, Eberhart R. Particle swarm optimization [C]//Proceedings of ICNN'95-International Conference on Neural Networks, November 27-December 1, 1995, Perth, WA, Australia. New York: IEEE Press, 1995: 1942-1948.
- [11] García-Gonzalo E, Fernández-Martínez J L. A brief historical review of particle swarm optimization (PSO) [J]. Journal of Bioinformatics and Intelligent Control, 2012, 1(1): 3-16.
- [12] Marini F, Walczak B. Particle swarm optimization (PSO). A tutorial[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2015, 149: 153-165.
- [13] Tang Y Q, Li C H, Song Y F. Network security situation prediction based on improved particle swarm optimization and extreme learning machine[J]. Journal of Computer Applications, 2021, 41(3): 768-773.
  唐延强,李成海,宋亚飞.基于改进粒子群优化和极

限学习机的网络安全态势预测[J]. 计算机应用, 2021, 41(3): 768-773.

- [14] Su Y X. Sound event recognition based on adaptive particle swarm optimized matching tracking[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2020, 57(10): 101502.
  苏映新.自适应粒子群优化匹配追踪声音事件识别 算法[J].激光与光电子学进展, 2020, 57(10): 101502.
- [15] Shi Y, Eberhart R C. Empirical study of particle swarm optimization[C] //Proceedings of the 1999 Congress on Evolutionary Computation-CEC99 (Cat.

#### 第 58 卷 第 23 期/2021 年 12 月/激光与光电子学进展

No. 99TH8406), July 6-9, 1999, Washington, D.C., USA. New York: IEEE Press, 1999: 1945-1950.

[16] Yang Y L, Wang P, Ma C H. Quantitative analysis of Mn element in liquid steel by LIBS based on particle swarm optimized support vector machine[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2015, 52(7): 073004.
杨友良, 王鹏, 马翠红. 基于粒子群优化支持向量机

的LIBS 钢液 Mn 元素定量分析[J]. 激光与光电子学进展, 2015, 52(7): 073004.

- [17] Subasi A. Classification of EMG signals using PSO optimized SVM for diagnosis of neuromuscular disorders[J]. Computers in Biology and Medicine, 2013, 43(5): 576-586.
- [18] Yang Y S, Zhang Y, Yang Y L, et al. Qualitative analysis of molten steel based on support vector machine by LIBS[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2015, 52(5): 053001.

杨友盛,张岩,杨友良,等.基于支持向量机的钢水 LIBS定性分析[J].激光与光电子学进展,2015,52 (5):053001. [19] Sha W, Li J T, Lu C P. Quantitative analysis of Mn in soil based on laser-induced breakdown spectroscopy optimization[J]. Chinese Journal of Lasers, 2020, 47 (5): 0511001.
沙文,李江涛,鲁翠萍.基于激光诱导击穿光谱技术

寻优定量分析土壤中 Mn 元素[J]. 中国激光, 2020, 47(5): 0511001.

- [20] Liu J X, Du B, Deng Y Q, et al. Terahertz-spectral identification of organic compounds based on differential PCA-SVM method[J]. Chinese Journal of Lasers, 2019, 46(6): 0614039.
  刘俊秀, 杜彬,邓玉强,等.基于差分-主成分分析-支持向量机的有机化合物太赫兹吸收光谱识别方法 [J]. 中国激光, 2019, 46(6): 0614039.
- [21] Wang S T, Wu X, Zhu W H, et al. Fluorescence detection of polycyclic aromatic hydrocarbons by parallel factor combined with support vector machine [J]. Acta Optica Sinica, 2019, 39(5): 0530002.
  王书涛, 吴兴, 朱文浩,等.平行因子结合支持向量 机对多环芳烃的荧光检测[J].光学学报, 2019, 39 (5): 0530002.