

基于多适应度量子遗传算法的 X 射线荧光重叠峰分解

汪雪元^{1, 2, 3}, 何剑锋^{1, 2, 3*}, 聂逢君², 袁兆林^{1, 2, 3}, 刘琳^{1, 2, 3}

1. 东华理工大学江西省放射性地质学大数据技术工程实验室, 江西 南昌 330013
2. 东华理工大学江西省核地质学数据科学与系统工程技术研究中心, 江西 南昌 330013
3. 东华理工大学软件学院, 江西 南昌 330013

摘要 智能算法在对谱峰重叠严重的复杂地质样品进行分析时, 往往存在计算量过大、弱峰误差较大、收敛于局部极小值或不收敛等问题。量子遗传算法因其具有良好的收敛性, 可用于 X 射线荧光光谱重叠峰的分解。针对 X 射线荧光分析过程中经常遇到的谱峰重叠问题, 提出了一种基于元素关联高斯混合模型(GMM-ER)和多适应度量子遗传算法的重叠峰分解方法。首先介绍了基于元素 K 系和 L 系特征 X 射线的重叠峰 GMM-EB 模型。然后基于 X 射线荧光光谱的物理特性, 对传统量子遗传算法进行了改进, 引入了多适应度函数。由锰、铁、钴和镍的特征 X 射线产生一段谱峰严重重叠的模拟光谱, 然后基于 GMM-EB 模型, 分别用传统量子遗传算法和改进的多适应度量子遗传算法对模拟光谱进行了 10 次解析。实验结果显示, 改进后的量子遗传算法的重叠峰分解精度平均提高了 32.1%, 最佳分解精度提高了 73.9%。应用改进量子遗传算法进行分解时, 含量比例低的元素分解精度得到较大改善, 最佳情况下元素分解的相对误差范围缩小了 64.5%。并且, 改进算法收敛速度快于传统算法。该方法适合严重重叠谱峰的分解, 且对弱峰有较高的分解精度。

关键词 X 射线荧光光谱; 重叠峰分解; GMM-EB 模型; 量子遗传算法

中图分类号: O433.4 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2022)01-0152-06

引言

在复杂地质样品的 X 射线荧光分析中, 峰位接近的谱峰之间常常会发生重叠, 严重的重叠谱峰对于样品成分定性分析的准确度和定量分析的精度构成较大影响。重叠峰分解一直是光谱分析领域的重点研究课题, 遗传算法和人工神经网络等智能算法近年来被广泛应用于光谱重叠峰分解^[1-6]。黄洪全等提出了高斯混合模型结合期望最大化迭代算法进行重叠峰分解^[7]; 杨熙等将粒子群算法应用于重叠谱峰的解析^[1]; 黄凡等将模拟退火算法应用于振动光谱成分分析^[2]; 徐喜荣^[4]等将神经网络分析应用于重叠峰的分解。智能算法在对谱峰重叠严重的复杂地质样品进行分析时, 往往存在计算量过大、弱峰误差较大、收敛于局部极小值或不收敛等问题。

量子遗传算法具有较好收敛性, 本文对量子遗传算法进行了改进。并将改进后算法和特征 X 射线谱的概率统计模型, 应用于 X 射线荧光重叠峰的分解。实验结果显示, 新方

法提高了重叠峰分解的准确度。

1 原理与算法

1.1 GMM-EB 模型

在 X 射线荧光能谱分析中, K 系和 L 系特征 X 射线分别用于轻元素和重元素的定性定量分析。K 系谱线有 $K_{\alpha 1}$, $K_{\alpha 2}$, $K_{\beta 1}$, $K_{\beta 2}$ 四条, L 系谱线主要有 $L_{\alpha 1}$, $L_{\alpha 2}$, $L_{\beta 1}$, $L_{\beta 2}$, $L_{\gamma 1}$ 五条。将元素的 K 系和 L 系特征 X 射线应用于能谱分析, 有助于提高元素定性分析的准确度和定量分析的精度。因此, 提出了一种基于 X 荧光分析仪分析范围内的所有元素的元素关联高斯混合模型 (gaussian mixture model-element related, GMM-ER)

$$P(x | \theta) = \prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^{T(i)} a(i, j) \frac{1}{\sigma(i, j) \sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}(x - u(i, j))^2 / \sigma(i, j)^2\right] \quad (1)$$

收稿日期: 2020-11-19, 修订日期: 2021-02-25

基金项目: 国家自然科学基金项目(11865002), 江西省核地质学数据科学与系统工程技术研究中心开放基金项目(JETRCNGDSS201903)资助

作者简介: 汪雪元, 1977 年生, 东华理工大学江西省放射性地质学大数据技术工程实验室讲师 e-mail: wangxueyuan@ecit.cn

* 通讯作者 e-mail: hjf_10@yeah.net

式(1)中, M 为 X 荧光分析仪能识别的元素数量。 $T(i)$ 为元素 i 的特征 X 射线条数, $\alpha(i, j)$ 为元素 i 的第 j 条分支谱线的权重, 且满足式(2)。

$$\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^{T(i)} \alpha(i, j) = 1, \alpha(i, j) \geq 0 \quad (2)$$

式(2)中, $u(i, j)$ 和 $\sigma(i, j)$ 分别为元素 i 的第 j 条分支谱线的均值和标准差。 $u(i, j)$ 和元素的对应射线能量相关联, 是线性关系; 并且, $\sigma(i, j)$ 和 $u(i, j)$ 之间存在线性关系^[1], 即有 $\sigma(i, j) = u(i, j)\sigma(1, 1)/u(1, 1)$ ($i=1, \dots, M; j=1, \dots, T(i)$)。对于 K 系特征 X 射线, 除少量轻元素外, $\alpha(i, 1), \alpha(i, 2), \alpha(i, 3), \alpha(i, 4)$ 之间的比值是确定的。 GMM-ER 模型的参数可表示为 $\theta = [\alpha(1, 1), \alpha(1, 2), \dots, \alpha(1, T(1)), \dots, \alpha(M, 1), \alpha(M, 2), \dots, \alpha(M, T(M)), u(1, 1), u(1, 2), \dots, u(1, T(1)), \dots, u(M, 1), u(M, 2), \dots, u(M, T(M)), \sigma(1, 1), \sigma(1, 2), \dots, \sigma(1, T(1)), \dots, \sigma(M, 1), \sigma(M, 2), \dots, \sigma(M, T(M))]$ 。

1.2 GMM-EB 模型的参数估计

设样本数据为 $x(n)$ ($n=1, 2, 3, \dots, N$), n 为道址, $x(n)$ 为道址 n 处的计数值。可以采用期望最大化法(expectation maximization, EM)的迭代算法由样本数据求得 GMM-ER 模型的参数 θ 值。在实际求解过程中, 由于 GMM-ER 模型的参数太多, θ 的求解经常难以实现。本文通过下面方法实现对 θ 的简化。

首先, 利用 $\alpha(i, j), u(i, j)$ 和 $\sigma(i, j)$ 之间关联关系, 简化 θ 中要求解的参数个数。对于强度存在固定比例关系的 K 系和 L 系特征 X 射线, 有 $\alpha(i, j) = \alpha(i, 1)p(j)$, $j=2, 3, 4, 5$, $p(j)$ 的值可以由元素特征 X 射线参数表查得。在实际

$$q = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \dots & \alpha_{1k} & \alpha_{21} & \alpha_{22} & \dots & \alpha_{2k} & \dots & \alpha_{e(d),1} & \alpha_{e(d),2} & \dots & \alpha_{e(d),k} \\ \beta_{11} & \beta_{12} & \dots & \beta_{1k} & \beta_{21} & \beta_{22} & \dots & \beta_{2k} & \dots & \beta_{e(d),1} & \beta_{e(d),2} & \dots & \beta_{e(d),k} \end{pmatrix} \quad (3)$$

式(3)中, k 为编码每一位基因的量子比特数, $e(d)$ 为第 d 光谱段待分析元素数量, 且有 $|\alpha_{ij}|^2 + |\beta_{ij}|^2 = 1$ 。

(2) 适应度评估: 在传统量子遗传算法中, 每个个体有一个适应度值, 基于个体的适应度进行迭代演化。本课题中对适应度函数进行改进, 为每个个体设置 $e(d)+1$ 个适应度值。为第 d 光谱段设置一个总适应度 $\text{fitness}(\hat{\theta}_d)$, 并且为第 d 光谱段每一个待分析元素设置一个适应度值 $\text{fitness}_d(i, \hat{\theta}_d)$, $i=1, 2, \dots, e(d)$ 。

$$\text{fitness}(\hat{\theta}_d) = - \sum_{x=\text{begin}(d)}^{\text{end}(d)} c_x \ln P(x | \hat{\theta}_d) \quad (4)$$

式(4)中, x 为道址, $\text{begin}(d)$ 和 $\text{end}(d)$ 分别为第 d 光谱段的起始和结束道址。 c_x 表示道址 x 处的相对计数值。 $P(x | \hat{\theta}_d)$ 的计算见式(1)。

$$\text{fitness}_d(i, \hat{\theta}_d) = - \sum_{x=u(i,d)-\bar{\sigma}/3}^{u(i,d)+\bar{\sigma}/3} c_x \ln P(x | \hat{\theta}_d) \quad (5)$$

式(5)中, $u(i, d)$ 为第 d 光谱段第 i 个待分析元素强度最大特征峰的道址, $\bar{\sigma}$ 为特征谱线标准差估计值, 取 $u(1, d)\sigma_u$ 的值。 $\text{fitness}_d(i, \hat{\theta}_d)$ 值表示解析后光谱与原始光谱在特征峰区间 $[u(i, d) - \bar{\sigma}/3, u(i, d) + \bar{\sigma}/3]$ 的相似程度。

(3) 量子旋转门: 量子遗传算法通常采用量子旋转门实现演化操作, 如式(6)所示, 其中 θ_i 为旋转角。

的 X 射线荧光光谱分析中, 由于仪器能量分辨率的原因, 通常将原子序数较低的同一种元素的 $K_{\alpha 1}$ 和 $K_{\alpha 2}$ 当作一个峰 K_α , $L_{\alpha 1}$ 和 $L_{\alpha 2}$ 当作一个峰 L_α 。 K_β 与 K_α 的比例也随元素存在的状态而进行适当调整。对于强度不存在固定比例关系的元素的特征 X 射线, 只保留强度最大的一条, 即令 $p(j)=0$ ($j=2, 3, 4, 5$)。通过确定 X 荧光分析仪的能量刻度, 由能量和道址的关系式可以计算出所有 $u(i, j)$ 的值。令 σ_u 表示方差道址比例常数, 即 $\sigma_u = \sigma(1, 1)/u(1, 1)$, 则有 $\sigma(i, j) = u(i, j)\sigma_u$ 。可见, GMM-ER 模型的参数 θ 可以简化为 $\hat{\theta} = [\alpha(1, 1), \alpha(2, 1), \dots, \alpha(M, 1), \sigma_u]$, 参数个数为 $M+1$ 。

经过简化之后的 $\hat{\theta}$ 中参数个数还是太多, 在有效时间内往往还是无法获得准确的分析结果。可以通过标准样品先求得能量色散 X 荧光分析仪的 σ_u 值。然后, 对光谱扣除本底后划分成若干个不重叠的光谱段, 每一个光谱段为一独立特征峰或重叠峰。则第 d 光谱段的参数为 $\hat{\theta}_d = [\alpha(d_1, 1), \alpha(d_2+1, 1), \dots, \alpha(d_e, 1)]$, d_1 表示第 d 光谱段的第一个特征峰, d_e 表示第 d 光谱段的最后一个特征峰。每段光谱的重叠峰数量有限, 对光谱逐段进行解析将极大的降低了光谱解析的时间复杂度。

1.3 GMM-EB 参数的改进量子遗传算法估计

量子遗传算法(quantum genetic algorithm, QGA)基于量子计算原理, 对参数采用量子比特编码, 利用量子逻辑门实现染色体的演化。相对于常规遗传算法, 量子遗传算法常常可以获得较好的收敛性^[8-10]。为减少计算量和演化迭代次数, 本文根据光谱数据特点对传统量子遗传算法进行改进。

(1) 量子比特编码: 首先对 $\hat{\theta}_d$ 进行二进制编码, 然后对每个二进制位用一个量子比特进行编码。则 $\hat{\theta}_d$ 基因可表示为

$$\begin{bmatrix} \alpha'_i \\ \beta'_i \end{bmatrix} = U(\theta_i) \begin{bmatrix} \alpha_i \\ \beta_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\theta_i) & -\sin(\theta_i) \\ \sin(\theta_i) & \cos(\theta_i) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_i \\ \beta_i \end{bmatrix} \quad (6)$$

传统量子遗传算法中, 旋转角 θ_i 的方向和大小由个体的适应度值与最佳个体的适应度值进行比较后确定。在改进量子遗传算法中, 由个体的总适应度 $\text{fitness}(\hat{\theta}_d)$ 确定最佳个体, 但 $\hat{\theta}_d$ 中与特征峰关联的参数 $\alpha(d_i, 1)$ 的旋转角 θ_i 的方向和大小由 $\text{fitness}_d(i, \hat{\theta}_d)$ 确定。

(4) 初始化群体: 在改进量子遗传算法中, 由式(7)得到 $\alpha(i, 1)$ 的初始值, 其中, $c_{u(i,1)}$ 表示道址 $u(i, 1)$ 处的相对计数值。由 $\alpha(i, 1)$ 确定个体量子比特编码初始值。

$$\alpha(i, 1) = \frac{\sqrt{2\pi}\sigma(i, 1)c_{u(i,1)}}{\sqrt{2\pi}\sigma_u u(i, 1)c_{u(i,1)}} \quad (7)$$

2 重叠谱峰解析

2.1 模拟重叠谱生成

用高斯函数模拟能量色散 X 荧光谱线特征峰, 产生原子序数 25—28 元素锰、铁、钴和镍的模拟光谱。这四种元素的主要 K 系特征 X 射线能量及比例关系如表 1 所示。

表 1 锰、铁、钴和镍的主要 K 系特征 X 射线

Table 1 Main K-series characteristic X-rays of Mn, Fe, Co and Ni

元素	K _{α1}		K _{α2}		K _{β1}	
	能量/keV	能量/keV	比例	能量/keV	比例	
Mn	5.898	5.887	51	6.490	16	
Fe	6.403	6.390	50	7.057	16	
Co	6.930	6.915	50	7.649	16	
Ni	7.477	7.460	50	8.264	17	

假设—2 048 道的能量色散 X 荧光分析仪的能量刻度已知, 其能量 E 和道址 N 的关系式如式(8)所示

$$E = 0.007\ 955N + 0.134\ 714 \text{ (keV)} \quad (8)$$

则由式(8)可求得 GMM-ER 模型中元素锰、铁、钴和镍的 $u(i, j)$ 的值。设 σ_u 值已知为 0.04, 则由 $\sigma(i, j) = u(i, j)\sigma_u$ 可求得 $\sigma(i, j)$ 的值, 如表 2 所示

表 2 锰、铁、钴和镍的 $u(i, j)$ 值和 $\sigma(i, j)$ 值Table 2 $u(i, j)$ and $\sigma(i, j)$ values of Mn, Fe, Co and Ni

元素	i	$u(i, 1)$	$\sigma(i, j)$	$u(i, 2)$	$\sigma(i, j)$	$u(i, 3)$	$\sigma(i, j)$
Mn	1	724	28.98	723	28.924 13	799	31.96
Fe	2	788	31.52	786	31.453 36	870	34.81
Co	3	854	34.17	852	34.093 2	945	37.78
Ni	4	923	36.92	921	36.833 62	1 022	40.88

锰、铁、钴和镍的模拟高斯特征峰($K_{\alpha 1}$)的强度(峰面积)分别设为 20 000, 30 000, 30 000 和 20 000。则模拟重叠谱如图 1 所示。可以看出, 谱峰重叠严重。

2.2 重叠谱峰分解

采用传统量子遗传算法和改进的量子遗传算法的群体搜索技术, 计算在统计意义下形成重叠谱的随机数归属于各个 GMM-ER 模型的概率, 搜索到“全局最大概率”GMM-ER 模型, 该 GMM-ER 的参数就是所求元素 $K_{\alpha 1}$ 或 $L_{\alpha 1}$ 特性 X 射线的强度。

表 3 重叠谱分解的最优适应度值

Table 3 Optimal fitness values of overlapping spectral decomposition

实验	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	平均值
传统算法	58 095	23 388	220 592	43 815	21 542	175 392	13 833	23 574	13 871	14 332	60 843.4
改进算法	231 213	32 299	6 046	28 092	3 604	29 962	24 557	18 203	15 873	23 343	41 319.2

从表 3 结果计算可得, 最优适应度平均值降了 32.1%, 改进量子遗传算法的重叠峰分解效果总体优于传统量子遗传算法。传统量子遗传算法第 7 次实验的分解效果最佳, 最优适应度值为 13 833, 改进量子遗传算法第 5 次实验的分解效果最佳, 最优适应度值为 3 604, 最优适应度值降了 73.9%, 可以看出, 在最佳重叠峰分解效果方面, 改进量子遗传算法远远优于传统量子遗传算法。

(4) 最佳分解效果分析

对两种遗传算法的最佳重叠峰分解效果进行比较。传统

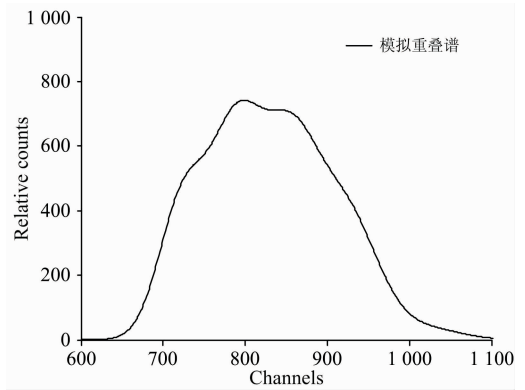


图 1 锰、铁、钴和镍的模拟重叠谱

Fig. 1 Simulated overlapping spectra of Mn, Fe, Co and Ni

(1) 确定 GMM-ER 模型参数

图 1 所示模拟重叠谱重叠区间为 [630, 1 100], 由式(8)可算出相应能量区间为 [5.146, 8.885] (keV)。铬(Cr)、锰(Mn)、铁(Fe)、钴(Co)、镍(Ni)、铜(Cu)和锌(Zn)的 K 系特征 X 射线与原子序数 60(镱)至 75(铼)的元素的 L 系特征 X 射线能量在此区间范围。由于同一元素 K 系特征 X 射线强度存在固定比例关系, 即形成的特征峰具有更强的相关性。为减少计算量, 可先对重叠谱用 K 系特征 X 射线拟合, 然后再对剥去 K 系射线谱峰的谱线用 L 系特征 X 射线拟合。本文重叠谱的 K 系特征 X 射线的 GMM-ER 模型参数 $\hat{\theta}_d = [\alpha_{Cr}, \alpha_{Mn}, \alpha_{Fe}, \alpha_{Co}, \alpha_{Ni}, \alpha_{Cu}, \alpha_{Zn}]$ 。

(2) 确定参数 $\hat{\theta}_d$ 的范围向量

由公式(7)可求得参数 $\hat{\theta}_d$ 的范围向量 [0, 0, 0, 0, 0, 0, 0; 4 990, 5 3892, 86 594, 90 701, 62 702, 14 166, 2 733]。

(3) 重叠峰分解及总体结果分析

设置初始种群个体为 100, 迭代次数为 100。将传统量子遗传算法和改进量子遗传算法分别应用于模拟重叠谱的分解。每种算法进行 10 次分解, 分解过程的最优适应度值如表 3 所示。最优适应度值越小表示总体误差越小, 即重叠峰分解效果越好。

量子遗传算法第 7 次实验和改进量子遗传算法第 5 次实验的重叠谱分解情况如图 2 和表 4 所示。

从图 2 可以看出两种量子遗传算法均能成功分解重叠谱峰, 且 GMM-ER 重叠峰和原始重叠谱均能较好拟合。但从表 4 可以看出, 除铬、铁外, 锰、钴、镍、铜和锌的分解相对误差, 改进量子遗传算法优于传统量子遗传算法。在应用量子遗传算法对重叠峰进行分解的过程中, 含量比例高的元素对总体分解精度的影响大于含量比例低的元素。在只有一个适应度值的传统量子遗传算法中, 含量比例高的元素会获得

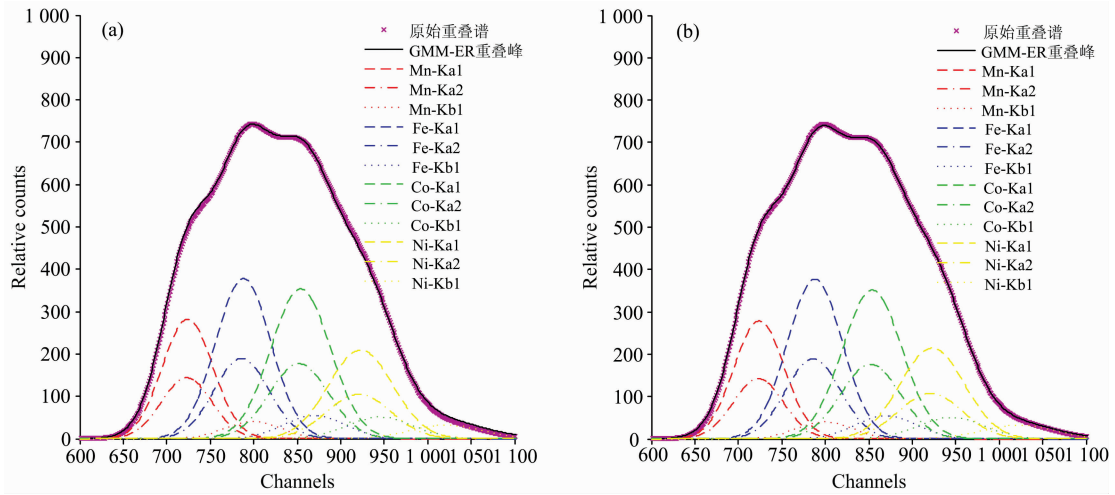


图 2 原始重叠谱、GMM-ER 重叠峰和分解峰

(a): 传统量子遗传算法; (b): 改进量子遗传算法

Fig. 2 Original overlapping spectrum, GMM-ER overlapping peak and decomposition peak

(a): Traditional quantum genetic algorithm; (b): Improved quantum genetic algorithm

表 4 分解前和分解后的特征 X 射线强度

Table 4 Intensity of characteristic X-ray before and after decomposition

元素	原始数据	传统量子遗传算法		改进量子遗传算法	
		GMM-ER 数据	相对误差/%	GMM-ER 数据	相对误差/%
Cr	0	126	—	190	—
Mn	20 000	20 470	2.35	20 230	1.15
Fe	30 000	29 867	-0.44	29 811	-0.63
Co	30 000	30 269	0.90	30 093	0.31
Ni	20 000	19 363	-3.19	19 837	-0.815
Cu	0	385	—	46	—
Zn	0	364	—	186	—

最优分解效果，而含量比例较低的元素分解精度可能较差。而改进量子遗传算法对每一种待分解元素都设有一个适应度值，使得不同含量比例的元素分解精度较为均衡。表 4 中，传统量子遗传算法的分解相对误差区间为 $[-3.19, 2.35]$ ，改进量子遗传算法为 $[-0.815, 1.15]$ ，缩小了 64.5%。可以看出，改进量子遗传算法的分解精度总体上高于传统量子遗传算法。

图 3 为传统量子遗传算法和改进量子遗传算法运行过程中全局最优个体的适应度值随迭代次数变化趋势图。可见，改进量子遗传算法的收敛速度快于传统量子遗传算法。

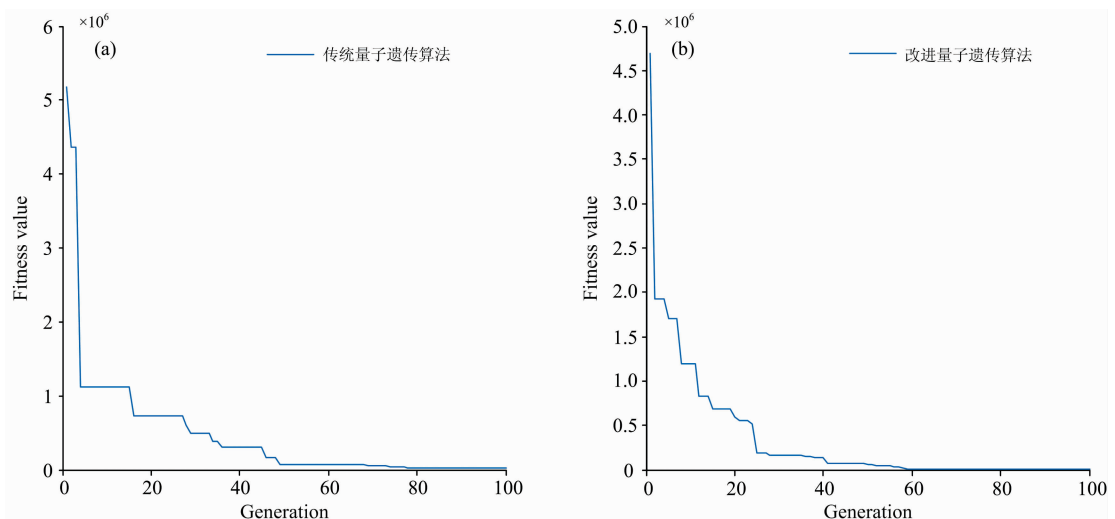


图 3 搜索全局最优 GMM-ER 的过程

(a): 传统量子遗传算法; (b): 改进量子遗传算法

Fig. 3 The process of searching global optimal GMM-ER

(a): Traditional quantum genetic algorithm; (b): Improved quantum genetic algorithm

3 结 论

由元素的 K 系和 L 系特征 X 射线, 从统计学角度提出了一种基于 X 荧光分析分析范围内所有元素的元素关联高斯混合模型(GMM-ER)。并基于 X 射线荧光光谱的物理特性和 GMM-ER 模型的特点, 对传统量子遗传算法进行了改进。用传统量子遗传算法和改进量子遗传算法对模拟重叠谱进行重叠峰分解。实验结果显示, 改进量子遗传算法的重

叠峰分解精度优于传统量子遗传算法, 并且收敛速度快于传统量子遗传算法, 且相对误差曲线更为平滑。通过对一铅黄铜标样(Cu: 62.83%, Zn: 33.56%, Pb: 2.30%, Fe: 0.16%, Sn: 0.33%, Ni: 0.31%, Mn: 0.12%)的实验光谱进行分析, 采用本文的改进量子遗传算法进行重叠峰分解, 其效果优于传统量子遗传算法。综上所述, 本文提出的基于元素关联高斯混合模型和改进量子遗传算法的谱线解析方法, 特别适合于严重的重叠谱峰的分解。

References

- [1] YANG Xi, HUANG Hong-quan, JIANG Kai-ming, et al(杨 熙, 黄洪全, 蒋开明, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2017, 37(8): 2376.
- [2] HUANG Fan, ZHANG Xu-kun, SUN Lu, et al(黄 凡, 张旭坤, 孙 陆, 等). Laser Optoelectronics Progress(激光与光电子学进展), 2020, 57(9): 093001.
- [3] LI Ying-na, XU Zhi-bin(李颖娜, 徐志彬). Metallurgical Analysis(冶金分析), 2019, 39(1): 35.
- [4] XU Xi-rong, PAN Zi-qi, LI Xing-hua, et al(徐喜荣, 潘子琦, 李兴华, 等). Journal of Dalian University of Technology(大连理工大学学报), 2019, 59(1): 97.
- [5] Du Hua, Chen Wuhui, Zhu Qingjun, et al. Applied Radiation and Isotopes, 2018, 141: 149.
- [6] LI Qiang, LIU Jian, LI Xiao-sui, et al(李 强, 刘 坚, 李小穗, 等). Rock and Mineral Analysis(岩矿测试), 2016, 35(5): 488.
- [7] HUANG Hong-quan, HE Zi-shu, FANG Fang, et al(黄洪全, 何子述, 方 方, 等). Atomic Energy Science and Technology(原子能科学技术), 2010, 44(9): 1114.
- [8] CAO Bang-xing(曹邦兴). Journal of Gannan Normal University(赣南师范大学学报), 2019, (3): 14.
- [9] MA Ying, WANG Huai-xiao, LIU He, et al(马 莹, 王怀晓, 刘 贺, 等). Computer Engineering and Applications(计算机工程与应用), 2018, 54(20): 99.
- [10] HAO Huan, CHEN Liang, WU Feng-ge, et al(郝 欢, 陈 亮, 武凤阁, 等). Journal of Military Communications Technology(军事通信技术), 2017, 38(2): 17.

Decomposition of X-Ray Fluorescence Overlapping Peaks Based on Quantum Genetic Algorithm With Multi-Fitness Function

WANG Xue-yuan^{1, 2, 3}, HE Jian-feng^{1, 2, 3*}, NIE Feng-jun², YUAN Zhao-lin^{1, 2, 3}, LIU Lin^{1, 2, 3}

1. Jiangxi Engineering Laboratory on Radioactive Geoscience and Big Data Technology, East China University of Technology, Nanchang 330013, China
2. Jiangxi Engineering Technology Research Center of Nuclear Geoscience Data Science and System, East China University of Technology, Nanchang 330013, China
3. Software College, East China University of Technology, Nanchang 330013, China

Abstract When the intelligent algorithm is used to analyze the complex geological samples with serious overlapping spectral peaks, there are some problems such as big calculation, large error of weak peaks, convergence to local minimum or non-convergence. Because of its good convergence, the quantum genetic algorithm can decompose overlapping peaks in X-ray fluorescence spectra. A method of overlapping peak decomposition based on the GMM-ER model and quantum genetic algorithm with multi-fitness function is proposed. The overlapping peak model (GMM-ER) is first introduced based on K-series and L-Series of element characteristic X-ray. Then, based on the physical characteristics of the X-ray fluorescence spectrum, a multi-fitness function is introduced into the traditional quantum genetic algorithm. The simulated spectra are generated by the characteristic X-rays of Mn, Fe, Co and Ni. Then, based on the GMM-ER model, the simulated spectra are analyzed 10 times by traditional quantum genetic algorithm and improved multi-fitness quantum genetic algorithm, respectively. The experimental results show that the average decomposition accuracy of overlapping peaks is improved by 32.1%, and the optimal decomposition accuracy is improved by 73.9%. Using the improved algorithm, the decomposition accuracy of elements with a low content ratio

is greatly improved, and the relative error range of element decomposition is reduced by 64.5% under the optimal decomposition accuracy. Moreover, the convergence speed of the improved algorithm is faster than that of the traditional algorithm. This method is suitable for the decomposition of seriously overlapped peaks and has a high resolution for weak peaks.

Keywords X-ray fluorescence spectrum; Decomposition of overlapping peaks; GMM-EB model; Quantum genetic algorithm

(Received Nov. 19, 2020; accepted Feb. 25, 2021)

* Corresponding author