

一维空洞卷积神经网络的矿物光谱分类

田青林¹, 郭帮杰¹, 叶发旺¹, 李 瑶², 刘鹏飞¹, 陈雪娇¹

1. 核工业北京地质研究院遥感信息与图像分析技术国家级重点实验室, 北京 100029
2. Zachry Department of Civil and Environmental Engineering, Texas A&M University, Texas 77843, USA

摘要 矿物光谱综合反映了岩矿的物理化学特性、组分和内部结构特征, 已被应用于岩矿识别研究。传统的矿物光谱分类方法需要先对矿物光谱进行预处理, 再采用不同方法分析光谱特征, 从而实现分类目的。但同时也会造成部分光谱信息丢失, 导致最终分类精度不高且操作过程繁琐、效率低下, 难以应对日益增长的大数据处理需求。因此, 建立一个准确、高效的矿物光谱自动分类模型意义重大。卷积神经网络是应用最广泛的深度学习模型之一, 它通过逐层抽取数据特征并组合形成高层语义信息, 具有极强的模型表达能力, 在光谱数据分析方面应用潜力巨大。针对矿物光谱数据的特点, 提出了基于一维空洞卷积神经网络(1D-DCNN)的矿物光谱分类方法, 利用空洞卷积神经网络提取光谱特征, 采用反向传播算法结合随机梯度下降优化器调整模型参数, 输出光谱分类结果, 实现了矿物类别的端到端检测。该网络包含1个输入层、3个空洞卷积层、2个池化层、2个全连接层和1个输出层, 采用交叉熵为损失函数, 引入空洞卷积扩大滤波器感受野, 有效避免光谱细节特征丢失。实验采集了白云母、白云石、方解石、高岭石四种矿物光谱, 并通过添加噪声的方式进行数据增强, 构建数量充足的矿物光谱样本用于神经网络模型训练与测试; 探讨了卷积类型、迭代次数对模型分类结果的影响, 并与多种传统矿物光谱分类方法进行对比, 评价模型性能。实验结果表明, 提出的1D-DCNN模型可实现矿物光谱快速准确分类, 分类准确率达到99.32%, 优于反向传播算法(BP)和支持向量机(SVM), 说明所提方法能够充分学习矿物光谱特征并有效分类, 且模型具有良好的鲁棒性和可扩展性。该方法也可推广到煤炭、油气、月壤等其他领域光谱分类应用中。

关键词 矿物光谱; 自动分类; 空洞卷积; 深度学习

中图分类号: TP391 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2022)03-0873-05

引言

实时岩矿识别在资源勘查、地质分析、天体探测等领域具有重要意义。岩矿光谱特征与 Fe^{2+} , Fe^{3+} 或 OH^- , CO_3^{2-} 等离子基团关系密切, 在350~2500 nm波段范围内存在明显的诊断性光谱吸收特征, 为岩矿光谱分类奠定了基础^[1]。传统的矿物光谱分类步骤比较繁琐, 需要先对光谱数据进行一系列复杂预处理; 然后提取光谱中重要的波峰、波谷信息或利用主成分分析等方法对原始光谱信号降维, 保留重要特征的同时降低运算复杂性; 最后运用支持向量机、决策树等机器学习方法分类。然而, 随着光谱测量技术的发展和地学大数据的积累, 对光谱分类方法准确性、实时性带来新的挑战。

近年来, 深度学习技术不断发展, 被广泛应用于图像分

类^[2]、语音识别^[3]、医学信号处理^[4]等领域。卷积神经网络(convolutional neural network, CNN)^[5-6]是深度学习中一个重要网络结构, 其强大的学习和分类能力远超传统机器学习方法, 具有广泛适用性。何东远等^[7]提出一种一维CNN模型对恒星光谱进行分类, 并给出了不同波段对不同恒星类型的贡献率, 具有较高的分类精度和鲁棒性。赵勇等^[8]提出一种一维CNN模型, 对雌激素粉末拉曼光谱进行分类, 无需光谱预处理和特征提取步骤, 展现出良好的分类性能和抗噪声干扰能力。

本工作通过引入空洞卷积, 将一维空洞卷积神经网络(one-dimensional dilated convolutional neural network, 1D-DCNN)应用于矿物光谱分类领域, 研究矿物类别的端到端检测, 分析了卷积类型和迭代次数对模型分类结果的影响, 并与反向传播算法(back propagation, BP)和支持向量机(support vector machine, SVM)方法结果进行对比。

收稿日期: 2021-02-26, 修订日期: 2021-06-15

基金项目: 核能开发项目([2021]88)和遥感信息与图像分析技术国家级重点实验室基金项目(遥 ZJ2019-2)资助

作者简介: 田青林, 1988年生, 核工业北京地质研究院遥感信息与图像分析技术国家级重点实验室工程师 e-mail: 736924158@qq.com

1 实验部分

1.1 光谱数据采集

测量矿物光谱的仪器为美国 ASD 公司的 FieldSpec@3 型便携式光谱仪(350~2 500 nm), 共 2 151 个波段, 考虑到边缘波段噪声及数据量的原因, 在 380~2 420 nm 波长范

围, 按 3 nm 间隔进行重采样, 得到 511 个波段。光谱仪视场角为 25°, 数据采集过程中将光纤探头垂直于矿物样本, 距离约 2 cm, 尽量使采集到的光谱数据不受干扰。

按照上述方法采集白云母、白云石、方解石、高岭石四种矿物光谱样本, 数量分别为 478 条、972 条、540 条、976 条, 如图 1 所示。

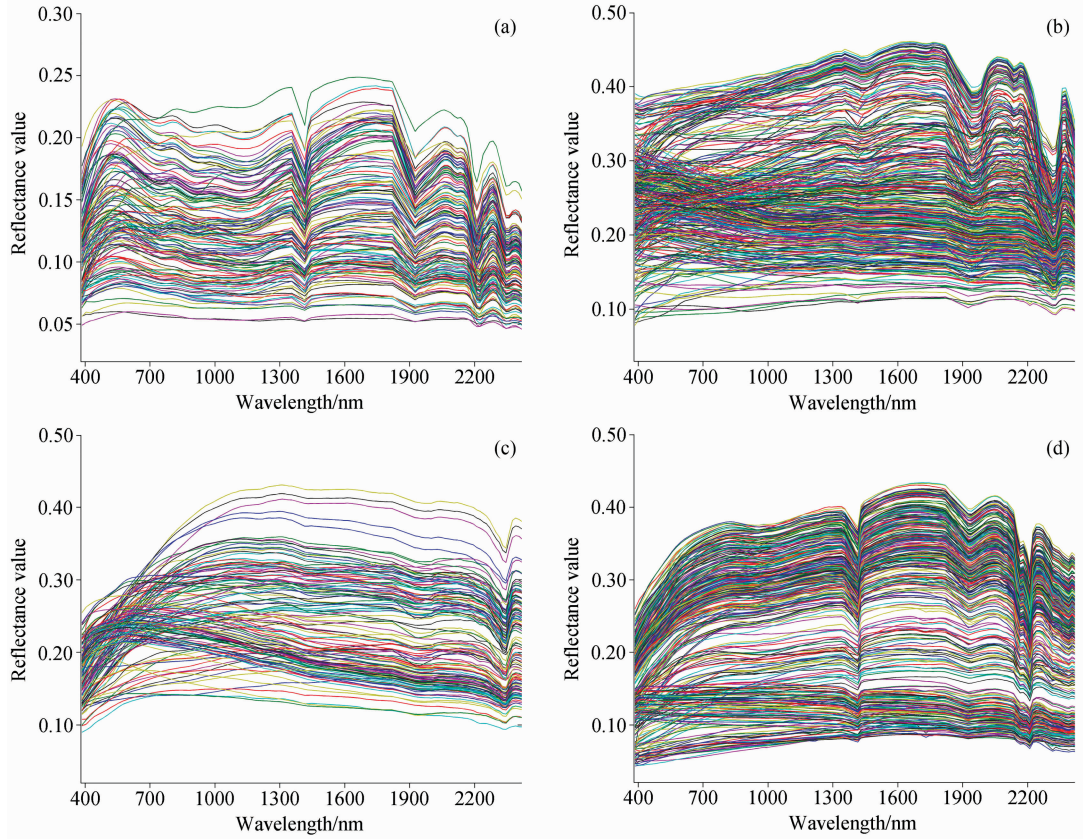


图 1 部分矿物光谱数据

(a): 白云母; (b): 白云石; (c): 方解石; (d): 高岭石

Fig. 1 Part of the mineral spectra

(a): Muscovite; (b): Dolomite; (c): Calcite; (d): Kaolinite

1.2 模型与算法

1.2.1 光谱数据增强

CNN 的优异性能需要大量数据样本作为支撑。充足的训练样本有助于网络模型充分学习样本类内特征和类间区别。而受样本数量、采集环境、测量设备等限制, 一般较难获取大量带有标签的矿物光谱数据, 故采用数据增强的方式扩充样本。具体方法是向原始矿物光谱数据中添加强度不等的随机高斯白噪声, 将白云母光谱扩充至 1 434 条, 白云石光谱扩充至 2 916 条, 方解石光谱扩充至 1 620 条, 高岭石光谱扩充至 2 928 条。经过数据增强, 得到包含四类矿物光谱样本的数据集共 8 898 条, 并按照 6 : 1 : 3 比例划分为训练集、验证集和测试集, 用于模型训练、参数优化及精度测试。

1.2.2 一维空洞卷积神经网络模型

CNN 模型应用于图像语义分割领域时, 重复的卷积、池

化操作会降低特征图分辨率, 导致图像细节结构和边缘信息丢失^[10]。而在光谱分类中同样面临上述问题, 为此通过引入空洞卷积来解决这一问题, 在保持分辨率的同时扩大滤波器感受野, 尽可能地保留光谱细节特征。对一维光谱信号的情形, 需要进行一维空洞卷积操作, 如图 2 所示, 当空洞率 rate=1 时, 空洞卷积相当于标准卷积, 滤波器以连续的方式对输入信号进行处理, 当 rate=2 时, 在原始滤波器的每个元素间插入一个 0, 以跳跃的方式处理信号。

因此, 针对矿物光谱数据的特点, 设计了 1D-DCNN 模型, 其结构如图 3 所示, 详细参数见表 1。模型包含 1 个输入层, 3 个空洞卷积层, 卷积核大小分别为 5×1 , 3×1 和 3×1 , 卷积核数量均为 64, 步长为 1, 空洞率为 2, 选择 ReLU 作为激活函数。2 个池化层紧接在第 1 个和第 2 个空洞卷积层之后, 池化核大小均为 3×1 , 步长为 2, 池化类型为最大

池化。第 3 个空洞卷积层之后紧接 2 个全连接层，最后通过 softmax 输出层得到分类概率预测。

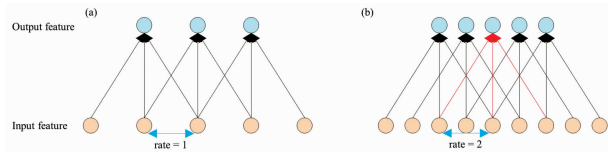


图 2 一维空洞卷积示意图^[9]

(a): 标准卷积; (b): 空洞卷积

Fig. 2 Schematic of one-dimensional dilated convolution

(a): Standard convolution; (b): Dilated convolution

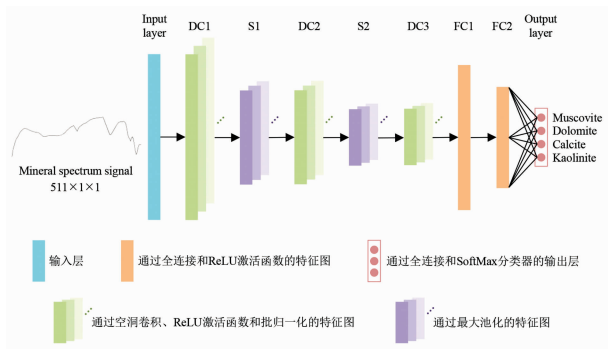


图 3 一维空洞卷积神经网络结构

Fig. 3 The structure of one-dimensional dilated convolutional neural network

表 1 1D-DCNN 网络各项参数

Table 1 The parameters of 1D-DCNN

层序号	层类别	卷积核大小	卷积核数量	步长
1	Input layer	511×1		
2	DC1	5×1	64	1
3	S1	3×1		2
4	DC2	3×1	64	1
5	S2	3×1		2
6	DC3	3×1	64	1
7	FC1	256 outputs		
8	FC2	64 outputs		
9	Output layer	4 outputs		

1.2.3 模型训练

1D-DCNN 网络模型采用交叉熵作为损失函数，使用 SGD(stochastic gradient descent) 优化器进行训练，具体参数设置为学习率 $lr = 0.008$ ，权值衰减系数 $decay = 0.000\ 000\ 1$ ，动量 $momentum = 0.5$ ， $Epoch = 200$ 。为实现 1D-DCNN 模型快速收敛，训练集被分成多个批次 (batch)，批处理样本数量 (batch size) 设置为 40。

1.2.4 模型评价方法

采用训练集和测试集的判别准确率作为模型评价指标。判别准确率 P 可表示为

$$P = \frac{N_c}{N_n} \times 100\% \quad (1)$$

式(1)中： N_c 为判别正确的样本数目， N_n 为样本总数目。

2 结果与讨论

2.1 卷积类型对 1D-DCNN 模型的影响

为检验卷积类型对模型性能的影响，将 1D-DCNN 中空洞卷积替换为标准卷积，记为 1D-CNN，其他参数保持不变，比较二者分类精度和收敛速度差异，结果如图 4 所示。

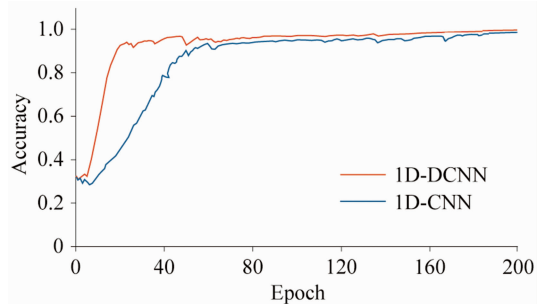


图 4 不同卷积核类型的模型性能比较

Fig. 4 Model performances with different convolution kernel types

从图 4 可以看出，在网络训练过程中，1D-CNN 模型的最佳分类精度为 98.78%，而引入空洞卷积的 1D-DCNN 模型精度更高，达到 99.40%，提高了 0.62%。在收敛速度方面，1D-DCNN 模型在迭代 23 次后便达到 94% 的分类准确率，而 1D-CNN 模型达到相近精度需要迭代 60 次。由此可见，引入空洞卷积同时能够加快收敛速度，提高计算效率，使模型更快得到精确结果。

2.2 迭代次数对 1D-DCNN 模型的影响

为选取最优的网络迭代参数，对比了不同迭代次数对模型精度的影响，结果如表 2 所示。当迭代次数很少时，模型训练不够充分，网络参数未达到最优，分类准确率较差；随着迭代次数增加，准确率随之提高；当迭代次数达到足够量时，模型分类效果变化不大，网络达到收敛状态。综合考虑模型精度和效率，选择迭代次数为 200。

表 2 不同迭代次数的 1D-DCNN 模型判别结果

Table 2 1D-DCNN model discrimination results of different number of iteration

迭代次数	准确率/%
10	54.27
50	92.16
100	96.98
150	98.32
200	99.40
250	98.99

2.3 不同分类方法精度对比

为验证 1D-DCNN 模型的矿物光谱分类性能，将 BP 算法、SVM 与 1D-DCNN 进行对比，各分类器均已经过参数调试和优化，分类结果如表 3 所示。

表 3 不同算法分类准确率

Table 3 The classification accuracies of different algorithms

分类算法	准确率/%
SVM	97.94
BP	98.65
1D-DCNN	99.32

根据表 3 结果可以看出, 1D-DCNN 分类效果最好, 准确率达到 99.32%; 其次是 BP 算法, 准确率为 98.65%; 最后是 SVM, 准确率为 97.94%。相比于 BP、SVM 等传统机器学习算法, 本文提出的 1D-DCNN 方法是通过构建具有多个隐含层的学习模型和大规模训练数据, 提取低层光谱特征并组合形成更抽象的高层语义类别信息, 从而提高光谱分类的准确率。

3 结 论

提出了基于一维空洞卷积神经网络的矿物光谱分类方

法。设计了 9 层网络结构, 采用交叉熵为损失函数, 随机梯度下降为优化器, 无需任何数据预处理操作, 实现了白云母、白云石、方解石、高岭石四种矿物类别的端到端检测。

(1)1D-DCNN 模型展现出强大的特征学习和表达能力, 避免了复杂的光谱预处理及特征提取过程。通过引入空洞卷积, 在保持特征分辨率的同时扩大滤波器感受野, 尽可能地保留光谱细节信息, 提高分类精度。

(2)实验结果表明, 与 BP、SVM 方法相比, 1D-DCNN 模型对矿物光谱分类准确率更高, 达到 99.32%, 展现出良好的分类性能。

在后续研究中, 会尝试增加矿物种类和样本数量, 设计更高效的深度学习模型, 为矿物光谱规模化检测提供可靠的技术支持。此外, 还可将 1D-DCNN 模型推广到煤炭、油气、月壤等其他领域的光谱分类应用中。

References

- [1] SUN Yu, ZHAO Ying-jun, LI Han-bo, et al(孙 雨, 赵英俊, 李瀚波, 等). Acta Geologica Sinica(地质学报), 2017, 89(1): 196.
- [2] YU Dong-hang, ZHANG Bao-ming, ZHAO Chuan, et al(余东行, 张保明, 赵 传, 等). Journal of Remote Sensing(遥感学报), 2020, 24(6): 717.
- [3] Jia G M, Cheng F Y, Yang J F, et al. Chinese Journal of Aeronautics, 2018, 31(12): 2280.
- [4] Yu M X, Sun Y C, Zhu B F, et al. Neurocomputing, 2020, 378: 270.
- [5] Sainath T N, Kingsbury B, Saon G, et al. Neural Networks, 2015, 64: 39.
- [6] Gu J, Wang Z, Kuen J, et al. Pattern Recognition, 2018, 77: 354.
- [7] HE Dong-yuan, LIU Wei, CAO Shuo, et al(何东远, 刘 伟, 曹 硕, 等). Journal of Beijing Normal University • Natural Science(北京师范大学学报 • 自然科学版), 2020, 56(1): 37.
- [8] ZHAO Yong, RONG Kang, TAN Ai-ling(赵 勇, 荣 康, 谈爱玲). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2019, 39(12): 3755.
- [9] HU Li, SHAN Rui, WANG Fang, et al(胡 丽, 单 锐, 王 芳, 等). Laser & Optoelectronics Progress(激光与光电子学进展), 2020, 57(12): 122803.
- [10] Chen L C, Papandreou G, Kokkinos I, et al. Deaplab: Semantic Image Sengmentation With Deep Convolutional Nets, Atrous Convolution, and Fully Connected CRFs, IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2018.

Mineral Spectra Classification Based on One-Dimensional Dilated Convolutional Neural Network

TIAN Qing-lin¹, GUO Bang-jie¹, YE Fa-wang¹, LI Yao², LIU Peng-fei¹, CHEN Xue-jiao¹

1. National Key Laboratory of Remote Sensing Information and Image Analysis Technology, Beijing Research Institute of Uranium Geology, Beijing 100029, China
2. Zachry Department of Civil and Environmental Engineering, Texas A&M University, Texas 77843, USA

Abstract The spectrum is a comprehensive reflection of the mineral's physical chemistry characteristics, composition and structure, which has been used in mineral and rock identification. The traditional classification methods of the mineral spectrum require complex spectral pretreatment, and then some spectral features are analyzed by different methods to achieve the goal of fine classification. However, the pretreatment may cause a partial loss of the spectral information and reduce the classification accuracy. Besides, the operation process is complex, so the efficiency is low, making it difficult to cope with the growing demand for big data processing. Therefore, it is important to establish an accurate, efficient and automatic classification model for the mineral spectrum. As one of the widely used deep learning models, the convolutional neural network extracts data features layer by layer and combines them to form higher-level semantic information. It has a strong capability of model formulation and great potential for the analysis of spectral data. This paper proposes a novel mineral spectrum classification method based on a one-dimensional dilated convolutional neural network (1D-DCNN). The DCNN is used for spectral feature extraction. The backpropagation algorithm combined with the random gradient descent optimizer is used to adjust the model's parameters, then output the classification result, which implements the end-to-end discrimination of mineral species. The 1D-DCNN includes one input layer, three dilated convolution layers, two pooling layers, two full connection layers and one output layer. It uses cross-entropy as the loss function, and dilated convolution is introduced to enlarge the receptive field of filters effectively avoid the loss of spectral feature details. The spectrum of four different minerals, muscovite, dolomite, calcite and kaolinite, are collected, and the data are augmented by way of adding noise to construct sufficient spectral samples, which are used for model training and testing. Then, we explore the impacts of different model parameters, such as the convolution type and the number of iterations, and then compare the proposed model with the traditional mineral spectrum classification methods to evaluate its performance. Experimental results indicate that the 1D-DCNN model can quickly and accurately classify mineral spectrum with the accuracy of 99.32%, which is superior to the backpropagation (BP) algorithm and support vector machine (SVM) methods, and it shows that the proposed method can fully learn mineral spectral features and implement a fine classification result, with good robustness and scalability. The proposed method can apply further to the spectra classification in coal, oil-gas, lunar soil and other fields.

Keywords Mineral spectra; Automatic classification; Dilated convolution; Deep learning

(Received Feb. 26, 2021; accepted Jun. 15, 2021)