

基于激光诱导击穿光谱技术的岩石表面 指纹图谱分析及分类方法

张蕊^{1,2)}, 孙兰香^{1,3,4)}, 陈彤^{1,3,4,5)}, 王国栋^{1,3,4,5)}, 张鹏^{1,3,4)}, 汪为^{1,3,4,5)}

1) 中国科学院沈阳自动化研究所机器人学国家重点实验室, 沈阳, 110016;

2) 东北大学信息科学与工程学院, 沈阳, 110819; 3) 中国科学院网络化控制系统重点实验室, 沈阳, 110016;

4) 中国科学院机器人与智能制造创新研究院, 沈阳, 110169; 5) 中国科学院大学, 北京, 100049

内容提要:岩石岩性识别在油气田探测开发、研究地球成因及演化发展、地质灾害分析预测等众多方面起着不可替代的导向作用,因此岩石的识别分类对于地质勘探分析来说至关重要。为了提高岩石的分类准确率,提出了一种基于激光诱导击穿光谱技术(LIBS)的岩石表面指纹图谱分析及分类方法。通过 LIBS 对岩石表面不同位置进行激发,获取原始光谱数据。对收集到的光谱数据进行去除异常点、归一化等预处理操作,根据岩石矿物成分确定五种含量差异较大元素(硅、铝、钾、钠、镁)的特征谱线并得到元素指纹图谱。然后选择支持向量机(SVM)作为分类器进行分类,分别建立利用光谱均值的分类模型和多维指纹图谱融合的分类模型,并对两种分类结果进行比较。利用光谱均值的分类模型准确率为 59.4%,多维指纹图谱融合的分类模型准确率为 96.5%。实验结果表明,元素指纹图谱展示了岩石表面元素分布,可以充分利用不同种类岩石本身的不均匀性结构信息,极大地提高了岩石的分类准确率。

关键词:激光诱导击穿光谱;支持向量机;特征提取;指纹图谱

岩石矿物鉴定是地质勘探分析过程中不可缺少的一项基础工作,在油气田探测开发、研究地球成因及演化发展、地质灾害分析预测等众多方面起着不可替代的导向作用(Xie Hongjing et al., 2017; Zhang Jiahui et al., 2018)。传统的地质勘探分析工作中,地质工作人员通过肉眼观察岩石的颜色、光泽、条痕、硬度等性质初步确定岩石岩性,这种主要依靠研究人员知识经验的判断方式主观性强、重复性低。其中岩石薄片鉴定法,需要将矿物或岩石标本磨制成薄片,在偏光显微镜下观察矿物的结晶特点,测定其光学性质,确定岩石的矿物成分,研究它的结构、构造,分析矿物的生成顺序,确定岩石类型及其成因特征,最后定出岩石的名称。而近些年随着智能地质学和智能矿床学的发展,地质勘探数字化技术得到不断提高,其中包括 X 射线荧光光谱法(XRF)(Zeng Meiyun et al., 2018)、X 射线衍射分

析法(XRD)(Barnes, 2011)、 γ 能谱法(Freudenthal et al., 2013)等。然而这些方法大都需要在实验室内进行,并且实验样品需要较为复杂的制备过程,分析周期长,时间滞后性严重,因此不适合石油钻井用于野外分析作业(Lei Jun et al., 2017)。

激光诱导击穿光谱(Laser-induced breakdown spectroscopy, LIBS)是一种近些年得到快速发展并在多个领域应用的原子发射光谱分析方法,其基本原理是利用激光脉冲轰击待分析样品,从而激发部分物质产生等离子体,然后根据等离子体谱线波长可进行物质元素的定性分析,根据等离子体谱线强度可进行物质元素的定量分析。相比于其他元素分析技术,LIBS 技术具备样品预处理简单、破坏性小、分析时间短、可实现实时在线及远程监测等强大的优势(Sun Lanxiang, 2009)。基于以上优点,LIBS 现已被广泛应用于生物医学(Rehse et al., 2010;

注:本文为中国科学院前沿科学重点研究计划(编号 QYZDJ-SSW-JSC037)和中国科学院青年创新促进会联合资助成果。

收稿日期:2019-05-13;改回日期:2019-11-10;网络发表日期:2020-01-07;责任编辑:张招崇;责任编辑:周健。

作者简介:张蕊,女,1993 年生,硕士,控制工程专业,Email: zhangrui@sia.cn。通讯作者:孙兰香,女,1980 年生,博士,研究员,机械电子工程专业,Email: sunlanxiang@sia.cn。

引用本文:张蕊,孙兰香,陈彤,王国栋,张鹏,汪为. 2020. 基于激光诱导击穿光谱技术的岩石表面指纹图谱分析及分类方法. 地质学报, 94(3):991~998, doi: 10.19762/j.cnki.dizhixuebao.2020127.
Zhang Rui, Sun Lanxiang, Chen Tong, Wang Guodong, Zhang Peng, Wang Wei. 2020. Fingerprint analysis and classification of rock surface based on laser-induced breakdown spectroscopy. Acta Geologica Sinica, 94(3):991~998.

Unnikrishnan et al. ,2014; Singh et al. ,2015)、环境监测(Marcella et al. ,2011; Yu Xiaodong et al. , 2014; Hang et al. ,2015)、冶金分析(Cong Zhibo et al. ,2014; Sun Lanxiang et al. ,2015; Hao et al. , 2015)和食品安全(Gibaek et al. ,2012; Bilge et al. ,2016; Dixit et al. ,2017)等领域。在先前的地质研究中,采用 LIBS 与主成分分析相结合的方法对岩石光谱进行了分析,通过主成分分析的方法得到三种岩石样品第一主成分与第二主成分的三维得分图,显示了沉积岩和变质岩样品与火成岩样品的相似性,表明了 LIBS 与主成分分析相结合可以成为岩石样品快速分类和原位鉴别的重要工具(Rai et al. ,2017)。在岩石分类方面,研究人员(Chen Xinglong et al. ,2013)使用构造特征变量和主成分分析两种方法对五类岩心样品取平均后的原始光谱进行特征提取,提取后的变量作为自组织映射神经网络的输入向量,样品岩性分类准确率分别为 75% 和 86%。另外,研究人员(Zhang Tingting et al. , 2017)利用远程激光诱导击穿光谱技术结合偏小二乘算法(PLS)建立岩石成分定量分析模型,岩石中 Si 和 Al 元素含量的平均预测误差分别为 9.4% 和 9.6%。中山大学研究人员(Xu Shuteng et al. , 2018)对镜下岩石照片中不同种类的矿物进行颜色标注,设计了 Unet 卷积神经网络模型,自动提取矿相显微镜下矿石矿物的深层特征信息,岩石薄片镜下图像的矿石矿物识别准确率达到 90% 以上。

传统的基于岩石平均光谱进行分类的方法丢失了岩石本身的矿物结构信息,不利于岩石分类准确率的提高。本文采用 LIBS 技术,对花岗岩和片麻岩两大类岩石进行表面扫描分析,根据岩石矿物组成差异确定特征谱线然后得出岩石表面元素的指纹图谱,并进一步通过这些获得的指纹图谱建立了支持向量机(SVM)分类模型。这种首次利用岩石成分分布不均匀的特征直接对岩石进行分类的方法,提高了分类准确率。

1 实验部分

1.1 实验装置与软件

实验装置如图 1 所示。LIBS 系统的激发源为半导体泵浦固体激光器(Montfort, M-NANO),激光器波长 1064nm,脉冲宽度 8ns,最大脉冲能量 80mJ,实验时激光能量经过能量衰减器衰减为 33mJ。脉冲激光经过焦距为 50mm 的聚焦透镜垂直聚焦在放置于三维位移台上的岩石样品表面上,

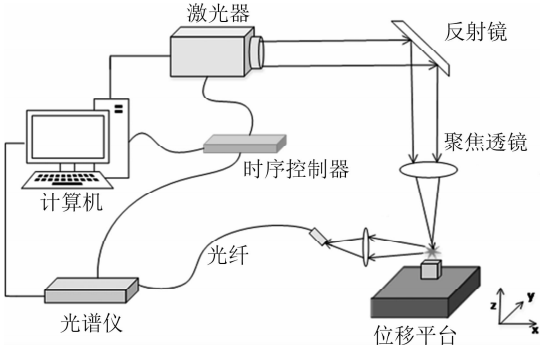


图 1 LIBS 系统装置示意图

Fig. 1 Schematic experimental setup of LIBS system

激发产生的等离子体经收集透镜和一分二光纤耦合到两块 Avantes 光谱仪(AvaSpec-2048 型光纤光谱仪,光谱范围分别为 190~310nm,470~970nm)。

1.2 样品与实验参数

实验样品为 6 块岩石标本,分别为:1 块花岗片麻岩和 2 块相同类型的片麻岩(这两块片麻岩分别标记为片麻岩 1 和片麻岩 2),1 块钾长花岗岩、1 块花岗斑岩和 1 块斜长花岗岩。其中花岗片麻岩和片麻岩 1、片麻岩 2 共同属于片麻岩,因此归为同一类并设定类别标签为 1,记为类别 1;在后三块岩石中钾长花岗岩和斜长花岗岩同属于花岗岩,花岗斑岩由于矿物成分与花岗岩相同并且岩石表面花纹分布与花岗岩类似,因此将花岗斑岩与钾长花岗岩和斜长花岗岩归为一大类并设定类别标签为 2,记为类别 2。分类的目标是将 6 块样品正确区分为类别 1 和类别 2 两大类。考虑到岩石上灰尘污迹导致表面杂质对实验数据产生的影响以及岩石表面凹凸不平会导致样品表面与聚焦透镜之间的距离发生变化,因此在实验前对岩石样品表面进行了简单的打磨抛光处理。

在实验时,岩石矿物中的非金属元素如 Si 的等离子体需要较大的激发能量,但是能量过高又会造成岩石矿物中如 Na、K 等易激发的金属元素谱线强度太大从而容易发生饱和,综合考虑设置激光能量经能量衰减器衰减后为 33mJ。实验时通过两块不同谱段的光谱仪进行光谱数据的检测收集,由于第一块光谱仪谱段(190~310nm)大致处于紫外光谱谱段内导致谱线强度普遍较弱,并且第二块光谱仪测量范围包括 Na、K 等易激发金属元素波长所以谱线强度普遍较强。这就导致当采集延时设置较小时谱线强度较高,会有很高的连续背景;当采集延时设置较大时谱线连续背景微弱但是谱线强度衰减严重。为了在紫外段得到合适的谱线强度,并保证第

二块光谱仪谱段内饱和谱线较少,最终确定采集延时为 $1.28\mu\text{s}$ 。

实验参数确定后,使用激光脉冲轰击岩石样品,并在岩石表面留下斑点,每个斑点位置轰击一次。由于斑点个数与岩石本身大小有关,因此大小不一的岩石上斑点个数互不相同。载物台沿 Z 字形路线移动配合激光以 4Hz 的出光频率完成对岩石表面的扫描轰击,其中斑点直径为 $350\mu\text{m}$,斑点中心间隔设置为 $150\mu\text{m}$,斑点之间存在重叠,保证激光轰击区域完全覆盖岩石表面。

1.3 数据预处理与特征谱线的选取

由于谱段 467~670nm 内谱线明显饱和较多,不能通过谱线强度准确反映元素含量,所以删除谱段 467~670nm 内的谱线数据,将余下谱段的光谱数据求平均值可以得到各个波长处谱线强度的平均值。由于等离子体发射光谱中包含线光谱和连续背景光谱,连续背景光谱的存在影响了特征谱线强度的准确检测与计算,进而影响通过光谱特征谱线强度值来推断样品内对应元素含量的 LIBS 光谱分析,因此需要扣除谱线连续背景。采用前期研究(Sun et al.,2009)提出的一种自动估计校正光谱连续背景干扰的方法后得到岩石样品中钾长花岗岩和片麻岩 2 的平均谱图如图 2 所示。然后对光谱数据进行光谱强度和归一化的数据预处理操作,减小了光谱数据波动的影响。最后,将光谱强度值中所有小于 0 的异常数值全部用数值 0 取代,并且通过设置合适的阈值将超过阈值的数据值作为异常值通过其邻近的数据值进行替代。

由于地壳中分布最广、组成各种岩石的最基本的元素即造岩元素为硅、钾、钠、铝、镁、铁、钙及氧等。类别 1 片麻岩中的主要矿物为石英、长石,次要矿物为黑云母、角闪石、石榴石和十字石。类别 2 中花岗岩与花岗斑岩的主要矿物为钾长石、斜长石、石英,次要矿物为白云母、黑云母、角闪石和辉石。组成这些矿物的主要元素包括:硅、铝、钾、氧、钠、钙、铁、镁,根据花岗岩和片麻岩两大类岩石矿物组成成分的差异并结合光谱仪谱段范围和 NIST(美国国家标准与技术研究院)在线数据库选择了 Si 线:288.2nm, Al 线:309.2nm, K 线:769.8nm, Na 线:819.4nm, Mg 线:279.5nm 作特征谱线。

2 结果与讨论

2.1 数据集的形成

按照收集的特征谱线的光谱强度值与激光在岩

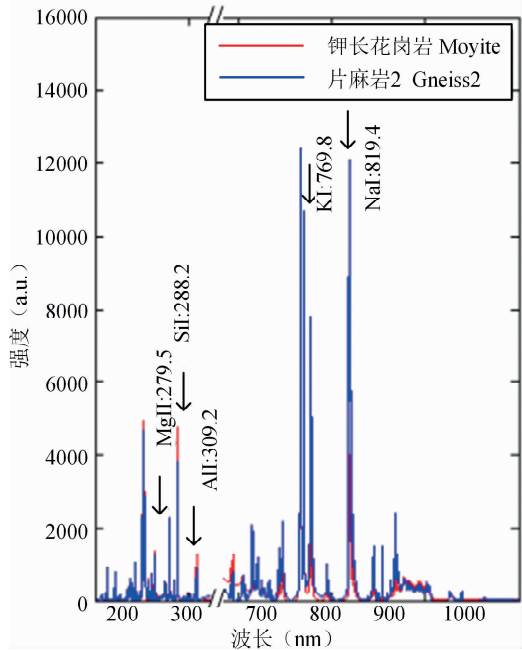


图 2 钾长花岗岩和片麻岩 2 平均谱图
Fig.2 Average spectrum of potassium feldspar granite and gneiss-2

MgII—Mg 元素二次电离离子线,波长为 279.5nm;SiI—Si 元素一次电离离子线,波长为 288.2nm;AlI—Al 元素一次电离离子线,波长为 309.2nm;KI—K 元素一次电离离子线,波长为 769.8nm;NaI—Na 元素一次电离离子线,波长为 819.4nm
MgII—The second ionization ion line of Mg element has a wavelength of 279.5 nm; SiI—the primary ionization ion line of Si element has a wavelength of 288.2 nm; AlI—the primary ionization ion line of Al element has a wavelength of 309.2 nm; KI—the primary ionizing ion line of K element has a wavelength of 769.8 nm; NaI—the primary ionizing ion line of Na element with wavelength of 819.4 nm

石上打点位置的元素含量相互对应可以画出岩石特定区域上的特征谱线的元素指纹图谱(即元素空间分布图),其中钾长花岗岩和片麻岩 2 的岩石自身图片与其五个元素的指纹图谱如图 3 和图 4 所示。由于实验数据数量有限,需要对元素指纹图谱进行裁剪来扩充原始图像数据集以达到数据增强的目的。受到岩石本身尺寸大小的限制,6 块岩石的元素指纹图谱大小也不相同,考虑到岩石本身花纹斑块大小,将元素指纹图谱裁剪成大小为 50×50 的局部分布图,即共包含 2500 个激光作用点,对应于岩石表面大小为 $0.75\text{cm}\times 0.75\text{cm}$ 的区域,该区域大小可以保证将岩石上最大的花纹斑块也包含在内。由于所得实验数据数量有限并且为了得到更多的裁剪图片,采用交叠裁剪的方式即元素分布图横向(x 方向)每隔 5 列进行裁剪,横向完成后在竖向(y 方向)

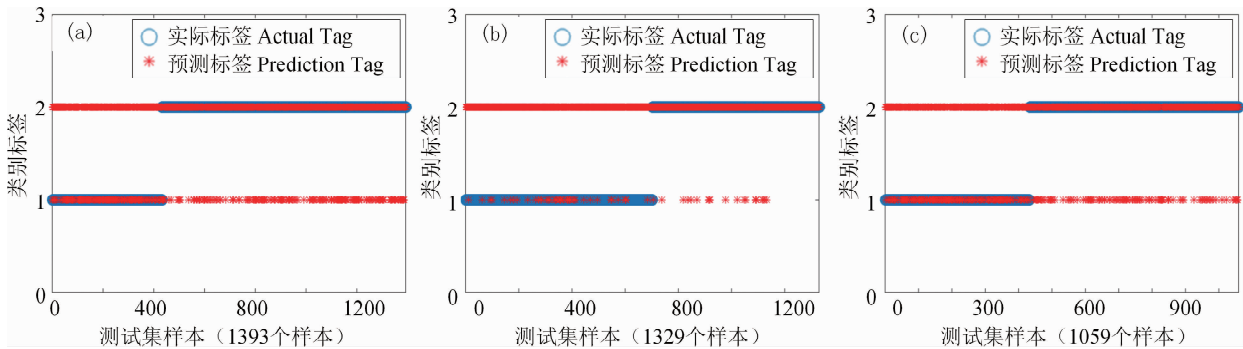


图 3 利用光谱均值的分类结果

Fig. 3 Classification results using spectral mean

(a)—测试集为片麻岩 1 和钾长花岗岩的分类结果；(b)—测试集为片麻岩 2 和斜长花岗岩的分类结果；
(c)—测试集为片麻岩 1 和斜长花岗岩的分类结果
(a)—The result of the classification of gneiss 1 and granite; (b)—the result of the classification of gneiss 2 and plagiogranite; (c)—the result of the classification of gneiss 1 and plagiogranite

每隔 10 行进行裁剪直至剩下需要裁剪的尺寸小于局部分布图(50×50) 尺寸,这样平均每块岩石可以得到 578 张相同尺寸大小且代表岩石不同位置的小图片,其中花岗片麻岩共 420 个样本,片麻岩 1 共 432 个样本,片麻岩 2 共 702 个样本,花岗斑岩共 324 个样本,钾长花岗岩共 961 个样本,斜长花岗岩共 627 个样本。将这些小图片进行后续处理后作为训练集和测试集进行岩石分类实验。

2.2 利用光谱均值的分类效果

传统的分类方法一般以击打样品的平均光谱作为分类数据集。因此,首先我们也以这种方式对岩石进行分类。在指纹图谱裁剪完毕生成局部分布图后,分别求出每个分布图所包含的 2500 个光谱的平均值,然后将 5 个特征谱线的平均值拼接在一起作为一个样本。选择 6 块岩石中的 4 块作为训练集,剩余两块作为测试集,然后选择支持向量机(SVM)高斯核进行岩石分类。经过网格搜索法进行参数寻优后得到最佳分类结果如图 3 所示。

对于不同分类方法的准确率计算的公式为：
准确率= $\frac{\text{预测正确的样本数}}{\text{全部样本数}}$

将利用光谱均值进行分类的对应岩石训练集、测试集及测试集分类准确率整理为表 1,由表 1 可得岩石不同测试集的平均分类准确率为 59.4%。结合图 2 可知,钾长花岗岩与片麻岩 2 的平均谱线强度变化趋势大致相似,甚至部分谱线存在重叠,其他花岗岩和片麻岩平均谱线情况类似,两类岩石这种谱线的相似性说明单纯依靠平均谱图中的特征很难对花岗岩和片麻岩进行分类,平均分类准确率

不高。

表 1 平均谱模型下不同岩石分类准确率

Table 1 Classification accuracy of different rocks based on average spectrum model

训练集	测试集	测试集准确率
花岗片麻岩、片麻岩 2、花岗斑岩、斜长花岗岩	片麻岩 1、钾长花岗岩	66.3%
花岗片麻岩、片麻岩 1、花岗斑岩、钾长花岗岩	片麻岩 2、斜长花岗岩	48.9%
花岗片麻岩、片麻岩 2、花岗斑岩、钾长花岗岩	片麻岩 1、斜长花岗岩	62.9%

2.3 多维指纹图谱融合的分类模型及分类效果

在图 4 和图 5 中元素指纹图谱右侧为表示元素相对强度的色条卡,其中元素谱线强度越强即元素含量越高越接近红色区域,谱线强度越弱越接近蓝色区域。通过矿物的外观特征,包括颜色、光泽、断口、条痕及硬度等,可以对矿物种类进行快速辨别。例如,石英化学式为 SiO₂,颜色包括透明、白色、灰色等,断口光滑且呈圆弧状,条痕为白色,具有玻璃光泽;黑云母化学式为 K(Mg, Fe)₃AlSi₃O₁₀(F, OH)₂,颜色包括黑色、棕黑色等,断口呈参差状,条痕为无色,具有玻璃或珍珠光泽;钾长石化学式为 KAlSi₃O₈,颜色为粉红色、红棕色、乳白色等,断口呈参差状至圆弧状,条痕为白色,具有暗淡光泽(Tang, 2014)。从图中可以看出,元素指纹图谱和岩石自身图片相互对应,如在图 4 中钾长花岗岩自身图片中的透明矿物主要为二氧化硅,而在 Si 元素指纹图谱中的红色区域说明硅含量较多,正好与透明矿物大体对应;岩石图片中黑色花纹矿物为黑云母,黑云母中元素 Mg 含量较多,可以对应 Mg 元素

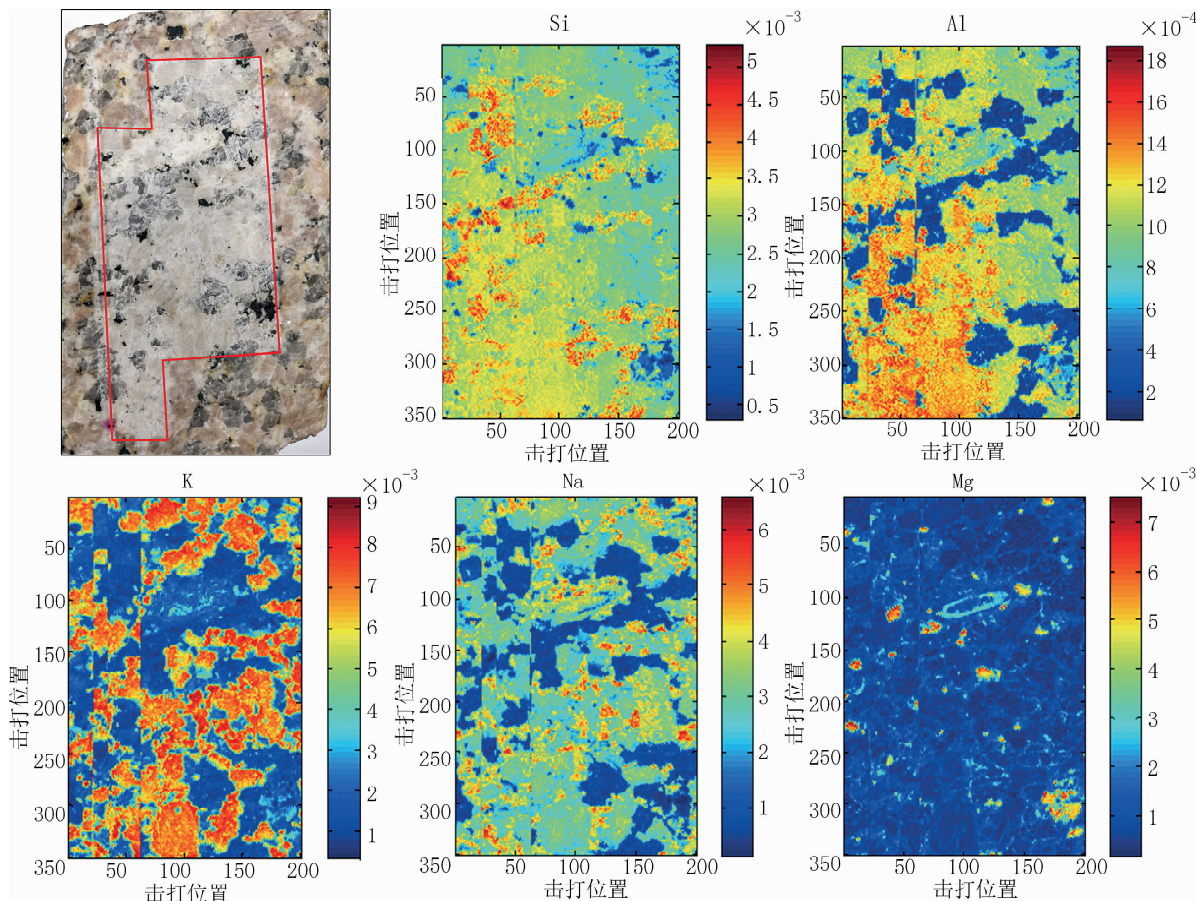


图 4 钾长花岗岩图片和五个特征谱线指纹图谱

Fig. 4 Potassium feldspar granite pictures and five characteristic line fingerprints

指纹图谱中的红色区域;另外岩石图片中的粉色区域主要组成矿物为钾长石,对应 K 元素指纹图谱中的红色区域。其余岩石图片与元素指纹图谱对应情况相似,并且类别 1 和类别 2 两大类别中类内元素分布相似,两大类别之间元素分布相差较大。这说明岩石的元素分布特征可以将两大类岩石进行区分,具有明显的指纹特征。

将 5 种元素对应的 5 条特征谱线的二维局部分布矩阵(裁剪后的小图)分别按行映射为一维行向量,然后将 5 条特征谱线分别对应的一维行向量依次拼接成一个样本,作为 SVM 的输入向量。实验时用到类别 1 和类别 2 中各两块岩石作为训练集,两大类别中各剩余一块岩石作为测试集进行分类测试。

在模型建立阶段,根据指纹图谱的图像特点,SVM 同样选择应用较广且性能较好、参数较少的高斯核进行分类,并且使用网格搜索法在确定参数搜索的大范围之后进行小范围的参数寻优,结合寻优结果得到不同训练集和测试集情况下的分类结果如

图 6 所示。将图 6 对应的岩石训练集、测试集及测试集分类准确率整理为表 2,由表 2 可得岩石不同测试集的平均分类准确率为 96.5%。

表 2 多维指纹图谱融合模型下不同岩石分类准确率

Table 2 Classification accuracy of different rocks based on multi-dimensional fingerprint fusion model

训练集	测试集	测试集准确率
花岗岩片麻岩、片麻岩 2、花岗斑岩、斜长花岗岩	片麻岩 1、钾长花岗岩	100%
花岗岩片麻岩、片麻岩 1、花岗斑岩、钾长花岗岩	片麻岩 2、斜长花岗岩	89.5%
花岗岩片麻岩、片麻岩 2、花岗斑岩、钾长花岗岩	片麻岩 1、斜长花岗岩	100%

3 结论

本文利用 LIBS 技术,对 6 块岩石样品进行分类,提出了一种基于岩石表面指纹图谱的分类方法。结合岩石本身的矿物组成信息选择元素 Si、Al、K、Na、Mg 谱线作为特征谱线,绘制了特征谱线强度的空间分布指纹图谱,并对指纹图谱进行交叠裁剪。进行岩石分类时,首先采用传统的利用光谱均值的

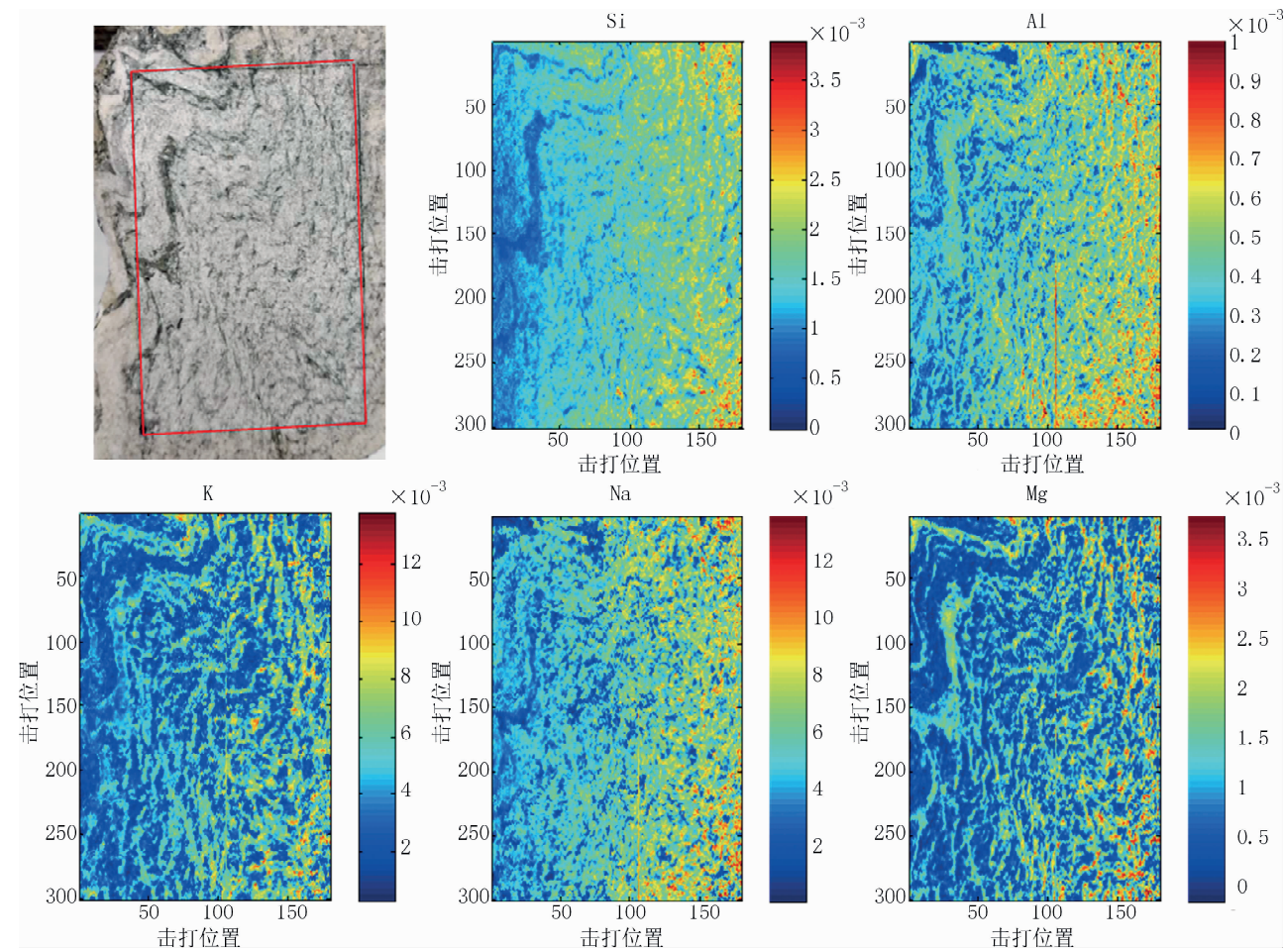


图 5 片麻岩 2 图片和五个特征谱线指纹图谱
Fig. 5 Gneiss-2 pictures and five characteristic line fingerprints

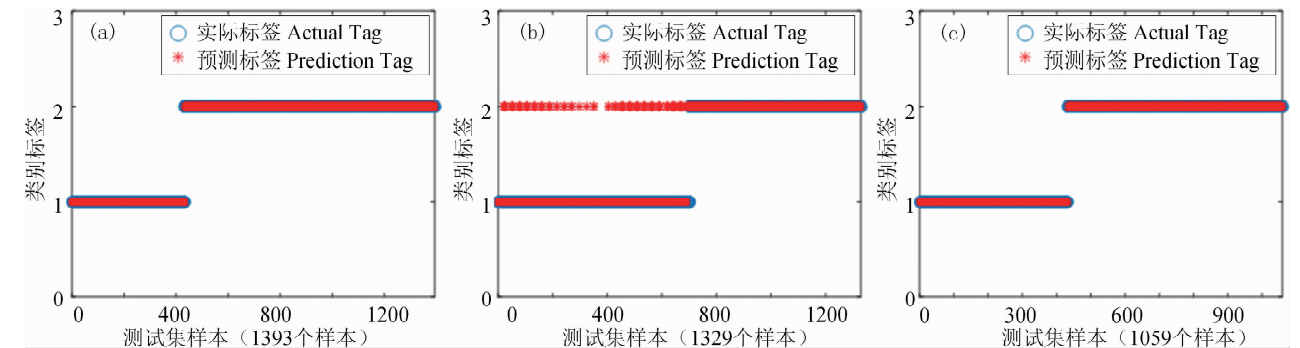


图 6 多维指纹图谱融合模型分类结果
Fig. 6 Classification results of multi-dimensional fingerprint fusion model

(a)—测试集为片麻岩 1 和钾长花岗岩的分类结果；(b)—测试集为片麻岩 2 和斜长花岗岩的分类结果；
(c)—测试集为片麻岩 1 和斜长花岗岩的分类结果

(a)—The result of the classification of gneiss 1 and granite; (b)—the result of the classification of gneiss 2 and plagiogranite;
(c)—the result of the classification of gneiss 1 and plagiogranite

分类方法，求取裁剪后的局部指纹图谱的平均值，并建立利用光谱均值的分类模型进行分类，分类结果显示岩石的分类准确率只有 59.4%。为了提高岩石的分类准确率，利用裁剪后得到的局部指纹图谱构建 SVM 分类模型。分类准确率提高到 96.5%。通过两种分类方法对比可知：两种方法中所用到岩石样品及采集与处理数据的方法全部一样，但第一种分类方法利用了岩石的平均谱线中的特征，而第

二种分类方法则利用了岩石指纹图谱中的特征。在两类岩石矿物含量差异较小但岩石中矿物元素分布差异明显的情况下,指纹图谱保留了岩石的矿物空间结构特征,与岩石类别具有更好的对应关系,因此在岩石分类中相比利用平均光谱的方式更加有效。

References

- Barnes S L. 2011. Evaluation of X-ray diffraction of bit cuttings as a proxy for core data in determining bulk mineralogy and clay species, Bakken Formation, Williston Basin. Dissertations, Stillwater, Oklahoma: Oklahoma State University.
- Bilge G, Velioglu H M, Sezer B, Eseller Ke, Boyaci I H. 2016. Identification of meat species by using laser-induced breakdown spectroscopy. *Meat Science*, 119:118~122.
- Chen Xinglong, Dong Fengzhong, Tao Guoqiang, Li Youjian, She Mingjun, Fu Hongbo, Ni Zhibo, Wang Jingge, He Wengan, Tang Yuquan, Rao Ruizhong. 2013. Fast lithology Identification by laser-induced breakdown spectroscopy. *Chinese Journal of Laser*, 40(12):243~248 (in Chinese with English abstract).
- Cong Zhibo, Sun Lanxiang, Xin Yong, Li Yang, Qi Lifeng, Yang Zhijia. 2014. Quantitative analysis of alloy steel based on laser induced breakdown spectroscopy with partial least squares method. *Spectroscopy and Spectral Analysis* 34(2):542.
- Dixit Y, Casado-Gavaldà M P, Cama-Moncunill R, Cama-Moncunill X, Markiewicz-Keszycska M, Jacoby F, Cullen P J, Sullivan C. 2017. Introduction to laser induced breakdown spectroscopy imaging in food: Salt diffusion in meat. *Journal of Food Engineering*: S0260877417303436.
- Freudenthal T, Steinke S, Mohtadi M, Hebbeln D, Wefer G. 2013. Spectrum Gamma Ray bore hole logging while tripping with the sea floor drill rig MARUM-MeBo. EGU General Assembly 2013. Vienna, Austria. 2013.
- Gibaek K, Jihyun K, Jeunghwan C, Kihong P. 2012. Detection of nutrient elements and contamination by pesticides in spinach and rice samples using laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS). *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 60(3):718.
- Hang V M N, Moon S J, Choi J H. 2015. Improving the application of laser-induced breakdown spectroscopy for the determination of total carbon in soils. *Environmental Monitoring and Assessment*, 187(2):1~11.
- Hao Z Q, Li C M, Shen M, Yang X Y, Li K H, Guo L B, Li X Y, Lu Y F, Zeng X Y. 2015. Acidity measurement of iron ore powders using laser-induced breakdown spectroscopy with partial least squares regression. *Optics Express*, 23(6):7795~7801.
- Lei Jun, Wang Shenshi, Yang Yu. 2017. Application of digital cuttings logging technology in Tarim Oilfield. *Mud Logging Engineering*, 28(4):1~6 (in Chinese).
- Marcella D A, Rosalba G, Senesi G S, Alessandro D G, Claudio Z, Miano T M, Olga D P. 2011. Monitoring of Cr, Cu, Pb, V and Zn in polluted soils by laser induced breakdown spectroscopy (LIBS). *Journal of Environmental Monitoring*, 13(5):1422~1426.
- Rai A K, Maurya G S, Kumar R, Pathak A K, Pati J K, Rai A K. 2017. Analysis and discrimination of sedimentary, metamorphic, and igneous rocks using laser induced breakdown spectroscopy. *Journal of Applied Spectroscopy*, 83(6):1089~1095.
- Rehse S J, Mohaidat Q I, Palchaudhuri S. 2010. Towards the clinical application of laser-induced breakdown spectroscopy for rapid pathogen diagnosis: the effect of mixed cultures and sample dilution on bacterial identification. *Applied Optics*, 344045806210(300):300~6365.
- Singh V K, Kumar V, Sharma J. 2015. Importance of laser-induced breakdown spectroscopy for hard tissues (bone, teeth) and other calcified tissue materials. *Lasers in Medical Science*, 30(6):1763~1778.
- Sun Lanxiang. 2009. Method and experimental research on quantifying multielement alloys based on laser-induced breakdown spectroscopy. Dissertation, Shenyang: University of Chinese Academy of Sciences (in Chinese with English abstract).
- Sun Lanxiang, Yu Haibin. 2009. Automatic estimation of varying continuum background emission in laser-induced breakdown spectroscopy. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 64(3):278~287.
- Sun Lanxiang, Yu Haibin, Cong Zhibo, Xin Yong, Li Yang, Qi Lifeng. 2015. In situ analysis of steel melt by double-pulse laser-induced breakdown spectroscopy with a Cassegrain telescope. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 112:40~48.
- Tang Hongming. 2014. Experimental Course of Mineral Petrology. Beijing: Petroleum Industry Press.
- Unnikrishnan V K, Choudhari K S, Kulkarni S D, Nayak R, Kartha V B, Santhosh C, Suri B M. 2014. Biomedical and environmental applications of laser-induced breakdown spectroscopy. *Pramana*, 82(2):397~401.
- Xie Hongjing, Wang Yuwang, Li Dedong, Shi Yu, Zhou Guochao, Long Lingli. 2017. Geochronology and geochemistry study of the Shuangdinggou intrusion in the Qingchengzi ore concentration area, eastern Liaoning Province. *Acta Geologica Sinica*, 92(6):1264~1279 (in Chinese with English abstract).
- Xu Shuteng, Zhou Yongzhang. 2018. Artificial intelligence identification of ore minerals under microscope based on deep learning algorithm. *Acta Petrologica Sinica*, 34(11): 3244~3252 (in Chinese with English abstract).
- Yu Xiaodong, Li Yang, Gu Xiaofeng, Bao Jiming, Yang Huizhong, Sun Li. 2014. Laser-induced breakdown spectroscopy application in environmental monitoring of water quality: a review. *Environmental Monitoring and Assessment*, 186(12): 8969~8980.
- Zeng Meiyun, Zou Dihua, Li Xiaodan, Yang Xiaoli. 2018. Determination of major and minor components in nickel and cobalt polymetallic ore by X-ray fluorescence spectrometry. *Metallurgical Analysis*, 38(4):51~56.
- Zhang Jiahui, Jin Wei, Wang Yafei, Li Bin, Cai Libin. 2018. Formation and evolution of Eo-Paleoarchean granitic crust in the Anshan area: evidence from petrology, geochronology and geochemistry of the Shengouisi complex. *Acta Geologica Sinica*, 92(5):887~907 (in Chinese with English abstract).
- Zhang Tingting, Shu Rong, Liu Pengxi, Wan Xiong. 2017. Elemental analysis of rock with remote laser induced breakdown spectroscopy. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 37(2):594~598 (in Chinese with English abstract).

参 考 文 献

- 陈兴龙, 董凤忠, 陶国强, 李油建, 余明军, 付洪波, 倪志波, 王静鸽, 贺文干, 汤玉泉, 饶瑞中. 2013. 激光诱导击穿光谱在地质录井岩性快速识别中的应用. *中国激光*, 40(12):243~248.
- 雷军, 王慎实, 杨钰. 2017. 岩屑录井数字化技术在塔里木油田的应用. *录井工程* 28,(4):1~6.
- 孙兰香. 2009. 基于激光诱导击穿光谱的多元合金成分定量分析方法与实验研究. 沈阳:中国科学院大学博士学位论文.
- 唐洪明. 2014. 矿物岩石学实验教程. 北京:石油工业出版社.
- 解洪晶, 王玉往, 李德东, 石煜, 周国超, 龙灵利. 2017. 辽东青城子矿集区双顶沟岩体年代学及地球化学研究. *地质学报*, 92(6):1264~1279.
- 徐述腾, 周永章. 2018. 基于深度学习的镜下矿石矿物的智能识别实验研究. *岩石学报*, 34(11):3244~3252.
- 张家辉, 金巍, 王亚飞, 李斌, 蔡丽斌. 2018. 鞍山地区始一古太古

代花岗岩地壳的形成及演化——深沟寺杂岩的岩石学、年代学及地球化学证据. 地质学报, 92(5):887~907. 章婷婷, 舒嵘, 刘鹏希, 万雄. 2017. 远程激光诱导击穿光谱技术分析岩石元素成分. 光谱学与光谱分析, 37(02):594~598.

Fingerprint analysis and classification of rock surface based on laser-induced breakdown spectroscopy

ZHANG Rui^{1,2)}, SUN Lanxiang^{*1,3,4)}, CHEN Tong^{1,3,4,5)}, WANG Guodong^{1,3,4,5)},
ZHANG Peng^{1,3,4)}, WANG Wei^{1,3,4,5)}

- 1) *State Key Laboratory of Robotics, Shenyang Institute of Automation, Chinese Academy of Sciences, Shenyang, 110016;*
 - 2) *School of Information Science and Engineering, Northeastern University, Shenyang, 110819;*
 - 3) *Key Laboratory of Networked Control Systems, Chinese Academy of Sciences, Shenyang, 110016;*
 - 4) *Institutes for Robotics and Intelligent Manufacturing, Chinese Academy of Sciences, Shenyang, 110169;*
 - 5) *University of Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100049*
- * Corresponding author: sunlanxiang@sia.cn*

Abstract

Rock lithology identification plays an irreplaceable guiding role in many aspects, such as exploration and development of oil and gas fields, study of the origin and evolution of the earth, analysis and prediction of geological hazards etc. Therefore, rock identification and classification are very important for geological exploration and analysis. In order to improve the classification accuracy of rocks, a method of rock surface fingerprint analysis and classification based on laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) was proposed. In the experiment, six rock samples were placed on a three-dimensional displacement platform, and different positions of the rock surface were excited by LIBS to obtain the original spectral data. After removing abnormal points, normalization and other pretreatment operations on the collected spectral data, the characteristic spectral lines of five elements (silicon, aluminum, potassium, sodium and magnesium) with large content differences were determined according to the rock mineral composition, and the element fingerprint was obtained. Then, the support vector machine (SVM) was selected as the classifier for classification. The classification model using the spectral mean and the classification model of multi-dimensional fingerprint fusion were established respectively, and the two classification results were compared. The accuracy of traditional classification model based on spectral mean is 59.4%, while that of multi-dimensional fingerprint fusion model can reach 96.5%. The experimental results show that the element fingerprint shows the element distribution on the rock surface, which can make full use of the heterogeneous structure information of different kinds of rocks, thus greatly improving the classification accuracy of rocks.

Key words: LIBS; SVM; feature extraction; fingerprint