

# 基于WMT-CNN与双阶段光谱匹配的岩矿识别模型研究

陈三明<sup>1</sup>, 罗蜜<sup>2</sup>, 蒋二龙<sup>3</sup>, 蒲子怡<sup>2</sup>, 成乙荣<sup>3</sup>

<sup>1</sup>桂林航天工业学院计算机科学与工程学院, 广西 桂林

<sup>2</sup>桂林理工大学地球科学学院, 广西 桂林

<sup>3</sup>莱森光学(深圳)有限公司, 广东 深圳

收稿日期: 2026年2月24日; 录用日期: 2026年4月10日; 发布日期: 2026年4月24日

## 摘要

针对当前矿物识别中特征工程复杂、多元素同步预测能力不足的问题, 本研究提出了一种多模态岩矿智能识别框架。该框架创新性地融合了激光诱导击穿光谱(LIBS)与可见光-短波红外(VIS-SWIR)光谱数据。首先, 构建加权多任务卷积神经网络(WMT-CNN)模型, 实现对Si、Al、Fe等9种元素的高精度同步定量预测,  $R^2$ 达0.8933。继而, 设计基于KPCA-KNN与孪生网络的双阶段光谱匹配算法筛选矿物。最终, 通过融合元素定量结果、光谱匹配排序与基团信息, 建立“元素-光谱-基团”协同约束机制, 实现岩矿大类的智能识别。实验表明, 该集成框架对金属矿石和岩浆岩的识别准确率分别达到95.8%和88.9%, 显著提升了复杂矿物组分分析的自动化程度与可靠性, 为野外高效勘查提供了关键技术方案。

## 关键词

岩矿识别, 激光诱导击穿光谱(LIBS), 加权多任务卷积神经网络(WMT-CNN), 元素定量分析, 深度学习

# Rock and Ore Identification Based on WMT-CNN and Two-Stage Spectral Matching Study

Sanming Chen<sup>1</sup>, Mi Luo<sup>2</sup>, Erlong Jiang<sup>3</sup>, Ziyi Pu<sup>2</sup>, Yirong Cheng<sup>3</sup>

<sup>1</sup>School of Computer Science and Engineering, Guilin University of Aerospace Technology, Guilin Guangxi

<sup>2</sup>School of Earth Sciences, Guilin University of Technology, Guilin Guangxi

<sup>3</sup>Lisen Optics (Shenzhen) Co., Ltd., Shenzhen Guangdong

Received: February 24, 2026; accepted: April 10, 2026; published: April 24, 2026

文章引用: 陈三明, 罗蜜, 蒋二龙, 蒲子怡, 成乙荣. 基于 WMT-CNN 与双阶段光谱匹配的岩矿识别模型研究[J]. 地球科学前沿, 2026, 16(4): 461-472. DOI: 10.12677/ag.2026.164041

## Abstract

To address the challenges in current mineral identification—namely the complexity of feature engineering and the insufficient capability for synchronous prediction of multiple elements—this study proposes a multimodal intelligent rock-ore identification framework. The framework innovatively integrates laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) with visible to shortwave infrared (VIS-SWIR) spectral data. First, a weighted multi-task convolutional neural network (WMT-CNN) model is developed to achieve high-accuracy synchronous quantitative prediction of nine elements, including Si, Al, and Fe, with an  $R^2$  of 0.8933. Next, a two-stage spectral matching algorithm based on KPCA-KNN and a Siamese network is designed to screen minerals. Finally, by fusing quantitative elemental results, spectral matching rankings, and functional group information, an “element-spectrum-group” collaborative constraint mechanism is established to enable intelligent identification of broad rock-ore categories. Experimental results show that the proposed integrated framework achieves identification accuracies of 95.8% and 88.9% for metallic ores and igneous rocks, respectively, significantly improving the automation and reliability of complex mineral composition analysis and providing a key technical solution for efficient field exploration.

## Keywords

Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS), Weighted Multi-Task Convolutional Neural Network (WMT-CNN), Siamese Network, Quantitative Elemental Analysis, Mineral Identification

Copyright © 2026 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

新一轮找矿突破战略行动是我国保障能源资源安全的核心战略[1]。岩石和矿物是地球物质组成的基本单元，对其成分、结构和分布的准确识别是地质学的核心。长期以来，岩矿鉴定主要依赖于偏光显微镜观察、X射线衍射(XRD)、X射线荧光光谱(XRF)[2]以及湿化学分析等方法，这些方法虽需要复杂的样品制备流程，分析周期长，且难以实现大规模、快速的现场分析。光谱技术的出现，特别是 LIBS [3]、VIS-SWIR 和基团，能快速、全元素、无损、即时识别岩矿。

在矿物识别技术应用领域，刘志红[4]构建基于特征融合的遗传优化支持向量机回归(FF-GA-SVR)模型，对类火星矿物 LIBS 定量分析，结果平均决定系数  $R^2$  达到 0.961，能准确检测未知矿石样品的成分；孙鹏[5]用 PCA-KNN、RFE-RF 和 PCA-CNN 对天然铝土矿 LIBS 进行分类以及对铁矿石鉴别，得出 PCA-CNN 模型预测准确率达 98.16%和 98.37%。这些成果印证了 LIBS 结合机器学习在矿物分析中的巨大潜力。张博等[6]则基于近红外岩心光谱扫描技术，批量识别了鄂尔多斯盆地彭阳铀矿床中的伊利石/蒙脱石混层等关键矿物组合，揭示了矿物分布特征。Cai 等[7]基于 Landsat8 多光谱数据构建了 Red-NIR-SWIR 光谱特征空间模型，实现区域矿物蚀变信息提取。技术融合是当前的重要趋势，Jahoda 等[8]研究发现，融合可见光-近红外、LIBS 与拉曼光谱的多源数据，其识别性能显著优于单一数据源。

尽管取得进展，现有研究仍存在特征工程复杂、多元素同步预测能力受限等问题[9]。为此，本研究创新提出多模态矿物识别框架：通过 WMT-CNN 模型[10]实现 LIBS 全波段自主特征提取与多元素高精度定量；结合孪生网络筛选匹配度前十矿物并利用基团识别纠偏，最终构建“元素定量-矿物初筛”一体化智能解译流程。

## 2. 实验准备

实验数据来源于 50 种国标矿物压片样本(图 1), 样品涵盖花岗岩、玄武岩、碳酸岩等典型岩性, 以及非金属矿物和金属矿物, 主量元素(Si、Al、Fe 等)浓度梯度分布明确。

本实验属于实验室条件下的可行性研究, 采用莱森光学有限公司(深圳)分体式 LIBS 激光诱导光谱仪采集样本 LIBS 光谱数据和地物波谱数据。LIBS 光谱数据经小波变换去噪、SG 滤波、8%分位基线校正 [11]及面积归一化预处理(图 2)。地物波谱数据经 5 点平均、SG 平滑与去包络线处理后归一化。



Figure 1. Photograph of the 50 samples after pelletizing  
图 1. 50 个样本压片后样本图

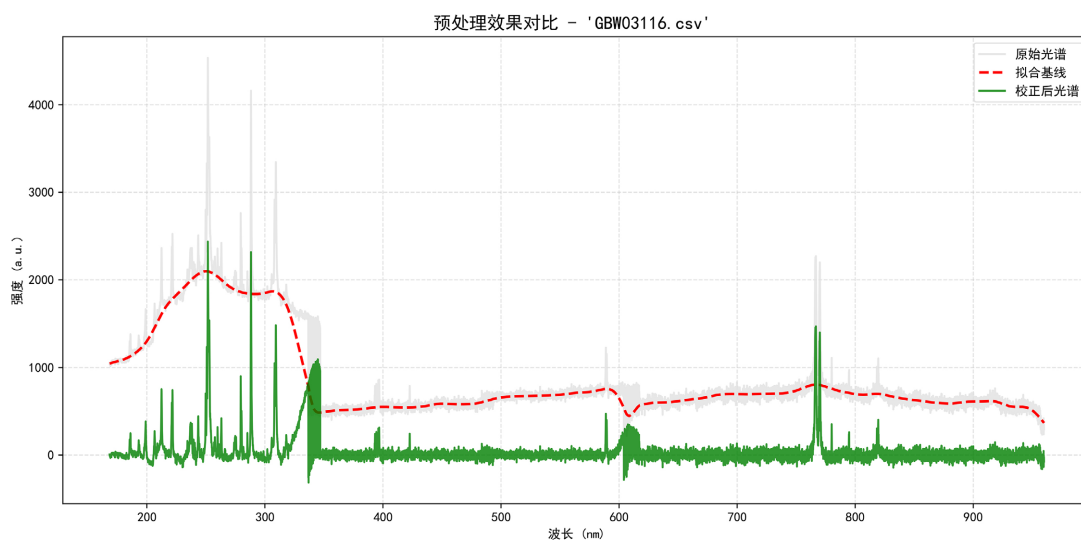


Figure 2. LIBS data preprocessing  
图 2. LIBS 数据预处理

### 3. LIBS 元素定量

#### 3.1. 基于留一法交叉验证的加权多任务 CNN 模型

针对 LIBS 光谱数据样品数量有限、元素间浓度分布不均以及模型泛化能力评估的需求[12], 本研究构建了一种基于留一法交叉验证(LOOCV)的加权多任务卷积神经网络(CNN)模型。该模型通过特征工程与深度学习相结合, 输入为经过预处理的 10238 维全谱光谱数据, 经特征选择后降至 1400 维, 最终输出 11 种目标元素(Si、Al、Fe、Ca、Mg、Na、K、C、S、Ti、O)的浓度预测值。

本研究构建的 1D-CNN 模型由 Stem 模块、双残差块(ResBlock)、SE 通道注意力模块及预测层组成。Stem 层采用  $7 \times 1$  卷积核进行初始特征映射(输出通道 32), 经批归一化(BN)与 ReLU 激活后通过步长为 2 的最大池化降采样至 700 维, 以扩大感受野。残差模块含两个串行 ResBlock, 每块由两层  $5 \times 1$  卷积(含 BN-ReLU)构成, 通过跳跃连接实现恒等映射:

$$h = \text{ReLU}(x + F(x)) \quad (1)$$

式中,  $F(x)$  代表残差块内部的两层卷积对输入  $x$  进行的非线性变换。有效缓解梯度消失并增强非线性拟合能力。

第二个 ResBlock 后接入 SE 模块, 通过全局平均池化(GAP)将  $64 \times 350$  特征图压缩为 64 维通道描述符, 经全连接层( $64 \rightarrow 8 \rightarrow 64$ )学习通道间依赖关系, 生成权重向量实现特征自适应校准。最终特征经自适应平均池化固定至  $64 \times 16 = 1024$  维, 通过两层全连接层( $256 \rightarrow 128$ )输出 11 种元素浓度预测值。

由于样本数量较少, 采用留一法交叉验证(LOOCV)以最大化利用有限样本, 即每轮以  $N - 1$  个样品训练、1 个样品验证, 循环  $N$  次确保全样本预测。引入跨折热启动加速收敛——首折随机初始化, 后续各折加载前一折最优参数作为初始值, 显著降低训练耗时。

损失函数采用元素自适应加权 Smooth L1 Loss 平衡不同浓度尺度差异。权重依据训练集各元素浓度标准差反比计算, 低含量元素(波动小)获更高权重, 确保模型对高低含量元素的均衡优化。具体实现为:

$$L = \frac{1}{BT} \sum_{b=1}^B \sum_{t=1}^T w_t \cdot \text{SmoothL1}(\hat{y}_{b,t}, y_{b,t}) \quad (2)$$

其中  $w_t = 1/(\sigma_t + \epsilon)$ ,  $\sigma_t$  为元素  $t$  的浓度标准差。

50 个标样的元素含量源于国家岩矿化石标本资源共享平台[13], 模型在 50 件国标样本中表现优异:  $R^2$  均值 0.8933, 73% 样本  $R^2 > 0.85$ ; RMSE 均值 2.0402; MAE 均值 0.9970, 误差集中且未出现过拟合。

**Table 1.** Performance evaluation of the CNN model

**表 1.** CNN 模型性能评估

Element	$R^2$	RMSE	MAE
Si	0.909931958	3.847202642	2.475251198
Al	0.971081257	1.049848689	0.600557446
Fe	0.947396696	4.572213272	2.40044713
Ca	0.972023606	1.890167307	0.91922313
Mg	0.744582713	1.913716312	0.637236357
Na	0.858978391	0.636153128	0.23549895
K	0.743888915	0.84617112	0.258185565
C	0.79806149	2.171270602	0.572600067

续表

S	0.881262481	2.207384145	0.598552585
Ti	0.852041304	0.427501057	0.115559824
O	0.94635874	2.880992284	2.162901402

### 3.2. 基于偏最小二乘回归(PLSR)的元素定量反演模型

为实现基于 LIBS 光谱对多元素含量的定量预测,采用偏最小二乘回归建立光谱矩阵与元素含量之间的回归模型。PLSR 能够在“通道维度极高、变量强共线、噪声水平偏强、多元素信号耦合明显”的光谱数据场景下,通过以少量潜变量替代数千个波长通道,把共线冗余进行压缩并削弱其影响,同时把激光能量波动、等离子体温度漂移等扰动在建模过程中更多地推入残差项之中,从而获得稳定的回归关系。

特征选择两类信息: NIST 中采集得到的特征波长表,并提取峰值、峰面积、均值、标准差等主要信息;全体样品平均光谱中峰值最高的 30 个峰,并提取局部最大值做补充特征。

PLSR 的模型原理在于把光谱矩阵  $X$  与浓度矩阵  $Y$  同步进行分解,并通过约束二者得分向量的协方差达到最大,使得“信号的凝聚”与“浓度的关联”这两项工作在同一潜变量空间内得以同时完成。与 PCA 以方差最大化为准则不同,PLSR 把准则调整为更偏向预测目标的协方差最大化,因此潜变量会直接携带与元素含量联系最紧密的光谱信息,从而在数据维度很高且存在共线性的情况下,也能在一定程度上避免峰位重叠、背景漂移等因素带来的子空间错位问题。PLSR 的核心回归关系可写为:

$$\hat{Y}_{\text{元素}} = \left( X_{\text{光谱(特征波长)}} - \bar{X}_{\text{sel}} \right) B + \bar{Y} \quad (3)$$

其中  $X$  表示在“特征波长”处提取的光谱强度,  $Y$  为真实的元素定量结果,  $B$  为通过 PLSR 求得的系数矩阵。

偏最小二乘回归(PLSR)可视为 PLS 在回归任务上的扩展形式,其做法是直接从  $X$  与  $y$  中提取成分并用于回归预测,基本表达为:

$$y = \sum_{k=1}^m t_k q_k + f \quad (4)$$

其中  $q_k$  为回归系数,  $f$  为残差。PLSR 在迭代构建潜变量的过程中会最大化  $X$  与  $y$  之间的协方差,并把降维与建模过程结合到一起,因此对存在共线性的数据更为适配。

潜变量数是 PLSR 关键超参数。本文在每一次留一法迭代的训练集上,通过 1 折交叉验证搜索最优成分数,评分函数使用负均方误差最大化等价于 MSE 最小化。表 2 分别从三个指标衡量 PLSR 模型性能,全面评估模型表现:

**Table 2.** Performance evaluation of the PLSR model

**表 2.** PLSR 模型性能评估

Element	R <sup>2</sup>	RMSE	MAE
Si	0.674234608	7.316649186	5.60528592
Al	0.846894627	2.415641128	1.611312681
Fe	0.734723672	10.2676053	6.076823969
Ca	0.964539347	2.128030641	1.394284982

续表

Mg	-0.553290099	4.719312346	2.357793284
Na	0.706377934	0.917937619	0.550799674
K	0.881652735	0.575205633	0.383342577
C	-0.230912155	5.360655596	2.664354304
S	0.082639389	6.135556641	3.42014727
Ti	0.097783589	1.055655792	0.497431686
O	0.247662363	10.78944023	7.709314204

### 3.3. 元素定量预测结果

表 1 和表 2 对比可见 CNN 模型在准确度上更优秀。WMT-CNN 模型精准预测了 50 项国家标准物质中九种元素的含量，构建了完整的地球化学谱系。其对 Si、Al、Fe、Ca 等主量元素的预测跨越三个数量级而未现畸变，展现了对复杂基体效应的卓越适应能力。同时，模型成功捕捉到 Na、K 等低丰度元素与岩性高度相关的分异趋势，解析了其矿物成因指纹。故选择 CNN 模型继续下列操作。

## 4. 基于 KPCA-KNN 与孪生网络的双阶段光谱匹配算法

针对矿物反射光谱固有的高维非线性特征与不同矿物间谱形的高度相似性这一学界长期存在的技术瓶颈，本文提出一种融合核主成分分析(KPCA)、K 近邻算法(KNN)与孪生网络(Siamese Network)的递进式双阶段光谱匹配模型。该算法秉承“粗粒度快速锁定候选集合 + 细粒度深度鉴别矿物亚类”的地球化学甄别逻辑，旨在从 USGS 标准矿物光谱库中高效筛选出与待匹配光谱相似度最高的十种端元矿物，为复杂矿物组合样品的精准识别提供兼具计算效率与判别精度的技术解决方案。整体技术路线如图 3 所示：

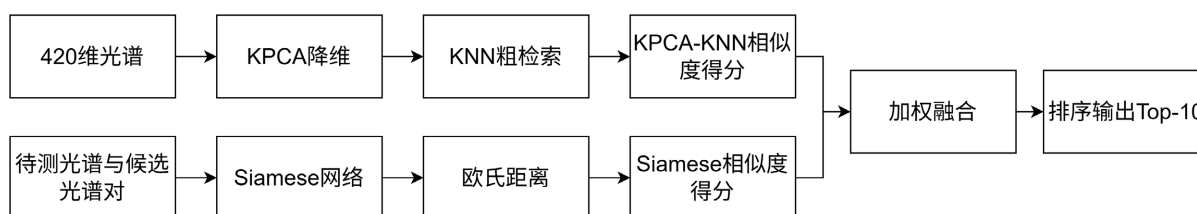


Figure 3. Flowchart of the spectral matching algorithm

图 3. 光谱匹配算法流程图

### 4.1. 基于 KPCA-KNN 的非线性空间粗检索

矿物反射光谱作为岩石矿物晶体化学信息的载体，其谱形变异受化学成分变异、颗粒度分选、表面粗糙度及风化蚀变程度等多重因素耦合控制，在可见光 - 短波红外波段(400~2500 nm)呈现出显著的非线性映射关系。传统主成分分析(PCA)依托线性变换难以有效捕捉复杂的谱形演变规律，尤其面对碳酸盐矿物与蒸发盐类矿物在 1800~2500 nm 区间因晶格振动引起的宽缓吸收特征时，其降维效果往往不尽人意。

本研究引入核主成分分析技术，通过径向基函数(RBF)将原始 420 维反射率光谱隐式映射至高维再生核希尔伯特空间，实现非线性结构的线性可分性转换。经波长归一化与 Savitzky-Golay 滤波预处理后的

光谱数据,在核空间中经中心化操作后,提取前 100 维主成分,经验证可保留 95%以上累积方差贡献率,在有效抑制随机噪声的同时,显著降低了后续最近邻检索的计算复杂度。在降维后的特征子空间中,采用 KNN 算法计算待测光谱与 USGS 谱库样本间的余弦相似度,该距离度量对光谱曲线整体形态的相对变化具有鲁棒性,避免欧氏距离对绝对反射率强度变化的敏感性。

KPCA 的关键在于核函数对“谱形差异”的相似度刻画方式。本研究在实现上采用 RBF 核,其选择主要基于以下考虑:(1) 矿物光谱差异通常表现为吸收谷深度、峰谷位置微小偏移以及多基团叠加导致的局部形态改变,这类差异往往呈局部、非线性且难以用全局线性关系稳定描述;RBF 核以样本间欧氏距离为基础构建局部相似性,可在不显式设定映射形式的情况下逼近广泛的非线性结构,适合描述“局部谱形相近、远距离快速衰减”的光谱邻域关系。(2) 相较于多项式核对高阶项敏感、易受噪声与尺度影响的问题,RBF 核在光谱数据经 StandardScaler 标准化后表现更稳健,可降低由于反射率幅值差异、噪声扰动引起的相似性失真。(3) RBF 核参数  $\gamma$  控制相似度衰减尺度: $\gamma$  过小会使核近似线性、非线性表达不足; $\gamma$  过大会导致仅在极近邻范围内有效、出现过拟合与邻域碎片化。为此,本文将  $\gamma$  作为关键超参数纳入 PSO 寻优(4.4 节),在分类性能驱动下确定最优核尺度(最终  $\gamma = 0.0001$ )。此外,若核矩阵数值条件较差或分解不稳定,系统在工程实现中设置了降级策略:当 KPCA 求解失败时自动回退到线性 PCA 以保证流程可用性。

为消除不同批次光谱间的量纲差异,将检索获得的距离集合  $d$  进行稳健标准化处理,并转化为归一化相似性得分:

$$S_{KPCA-KNN}(i) = 1 - \frac{d_i - d_{\min}}{d_{\max} - d_{\min}} \quad (1)$$

其中:  $S_{KPCA-KNN}(i)$  表示第  $i$  个候选样本的 KPCA-KNN 相似性得分;  $d_i$  表示输入光谱与第  $i$  个候选样本在 KPCA 特征空间中的余弦相似度;  $d_{\min}$  表示候选集中最小距离值;  $d_{\max}$  表示候选集中最大距离值。

## 4.2. 基于孪生网络的精细特征度量

尽管 KPCA-KNN 可在全局统计特征层面实现光谱快速匹配,但面对绿泥石与蛇纹石等矿物在 2200 nm 附近因羟基伸缩振动与金属-OH 弯曲振动耦合产生的亚峰结构差异时,其判别能力明显不足。为此,引入孪生网络架构进行深度特征嵌入学习。该模型由两个权值共享的卷积神经网络分支构成,每个子网络包含 3 层一维卷积层(通道数逐层扩展为 32、64、128,卷积核尺寸依次为 5、5、3),配合 ReLU 非线性激活与步长为 2 的最大池化操作,在逐级扩大感受野的同时实现下采样。经展平层后通过全连接层映射至 64 维稠密嵌入空间,该维度经实验验证可在类内紧凑性与类间可分性间取得平衡。提取待测光谱与候选样本的特征嵌入向量  $E_{input}$  和  $E_i$ , 并计算欧氏距离,得到 Siamese 阶段相似性得分:

$$S_{Siamese}(i) = \frac{1}{1 + \|E_{input} - E_i\|} \quad (1)$$

其中:  $S_{Siamese}(i)$  是第  $i$  个候选样本的 Siamese 相似性得分;  $E_{input}$  是输入光谱的 Siamese 特征向量;  $E_i$  表示第  $i$  个候选光谱的 Siamese 特征向量。

该得分反映了深层神经网络学习到的抽象光谱语义相似性,对特征吸收谷位置偏移 0.5~2 nm 的微小扰动仍保持高度敏感性,显著提升了造岩硅酸盐矿物的亚类识别能力。

## 4.3. 加权融合判定策略

为统筹兼顾 KPCA-KNN 提供的全局统计特征与孪生网络捕捉的局部精细结构特征,本文构建混合加权评分模型:

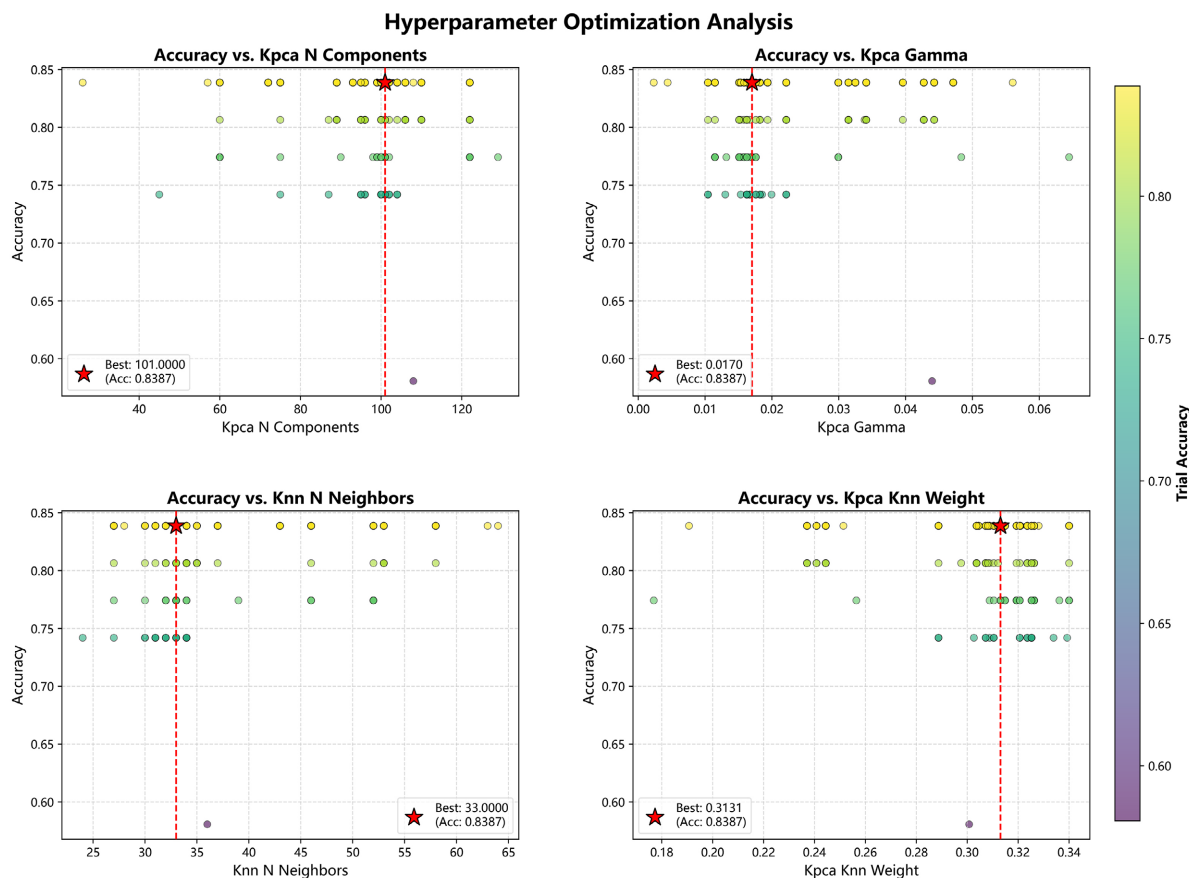
$$S_{total}(i) = w_{KPCA-KNN} \cdot S_{KPCA-KNN}(i) + w_{Siamese} \cdot S_{Siamese}(i) \quad (7)$$

其中:  $S_{total}(i)$ : 第  $i$  个候选样本的最终匹配得分;  $w_{KPCA-KNN}$ : KPCA-KNN 阶段得分权重;  $w_{Siamese}$ : Siamese 阶段得分权重。

#### 4.4. PSO 参数调优

双阶段匹配系统的性能对超参数配置存在显著依赖。本研究采用粒子群优化算法对四个关键参数进行自动化寻优: KPCA 主成分数(离散变量)、RBF 核参数  $\gamma$ (连续变量)、KNN 近邻数(整数变量)及融合通道权重(连续变量)。优化目标函数定义为五折交叉验证下的平均分类错误率最小化, 适应度评估过程中固定孪生网络权重参数, 避免重复训练带来的计算开销。粒子种群规模设为 20, 惯性权重线性递减, 认知系数与社会系数分别取 2.0 与 2.5, 迭代 50 次后收敛。

优化结果表明(图 4), 当 KPCA 分量数为 111、核参数  $\gamma = 0.0001$ 、KNN 近邻数 = 100、KPCA-KNN 权重 = 0.317 时, 系统在独立测试集上达到最高准确率 0.7647, 较初始经验参数配置提升 6.3 个百分点, 且 F1-score 提升更为显著。相较于传统网格搜索, PSO 策略以不足其 1/10 的计算代价探索了更广阔的参数空间, 有效规避了维度灾难问题。



**Figure 4.** Parameter analysis diagram

**图 4.** 参数分析图

通过融合两阶段得分, 可以有效弥补单一算法在处理矿物同质异构现象时的局限性。基于该融合得分初步筛选出的 10 种候选矿物, 将进一步通过基团存在性检验进行排除。最终效果图如图 5。

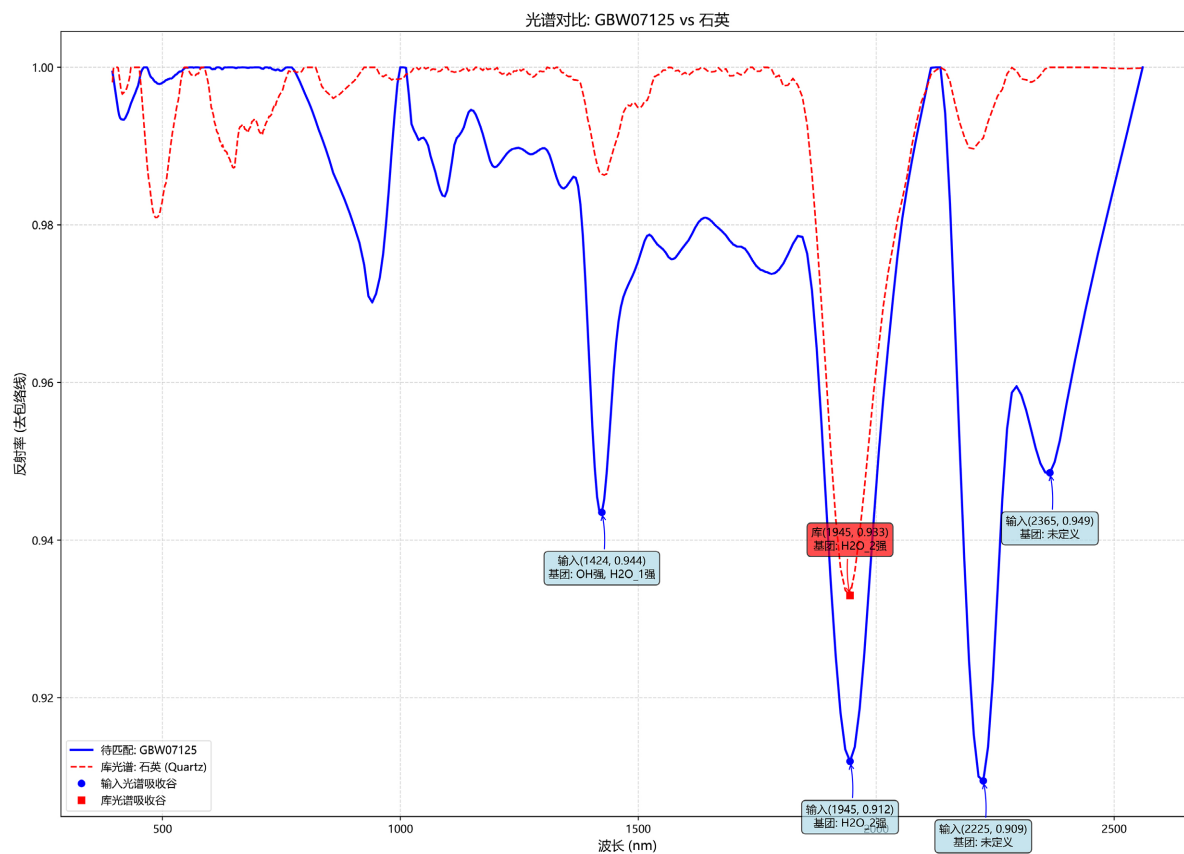


Figure 5. Schematic diagram of the comparison between test samples and the USGS mineral spectral library

图 5. 测试样品与 USGS 矿物库比对的示意图

#### 4.5. 基团识别辅助纠偏

矿物在可见 - 短波红外区间的光谱诊断性特征本质上是晶体场理论与分子振动理论的表现体现。400~1100 nm 波段的强吸收主要归因于  $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$  在八面体/四面体配位场中的电子跃迁，而 1100~2500 nm 区间的特征结构则源于  $\text{CO}_3^{2-}$  的组合频、Al-OH 的伸缩振动及结构水的弯曲振动等基频与倍频。本文构建基于矿物晶体化学先验知识的规则引擎，对候选矿物进行基团存在性布尔检验：若待测光谱在 2200~2300 nm 未检测到符合深度  $> 0.05$ 、显著性  $> 0.005$ 、半高宽  $< 3$  的羟基吸收特征，则自动排除绿泥石、伊利石等层状硅酸盐矿物；同理，缺失 2330~2350 nm 处  $\text{CO}_3^{2-}$  强吸收的样本可剔除方解石、白云石等碳酸盐矿物。该机制显著降低了因光谱形态相似导致的误判，尤其适用于蚀变岩等复杂矿相集合体的识别。

本研究采取硬阈值判定规则，选取吸收深度大于 0.05 时表示在波段范围内有矿物吸收，若在基团指定波段范围内不存在吸收深度大于 0.05 的基团，则该基团不存在，由此推出该基团对应的矿物不存在。

### 5. 岩矿识别

基于 LIBS 光谱定量获取的 Si、Al、Fe、Ca、Mg、Na、K、C、S、Ti、O 等元素含量，本研究依据地球化学判别规则建立岩性大类识别模型。岩浆岩  $\text{SiO}_2$  含量高于 45%，且 Al、K、Na 等长石元素总含量高于 Fe、Mg 总含量；变质岩元素组成呈现原岩残留特征与变质重结晶特征叠加，无显著单一元素富集模式；沉积岩 Ca 与 C 含量之和高于 15% (指示碳酸盐岩)，或 Si 含量高于 60% (指示硅质碎屑岩)；金属矿石 Fe、Ti、Cu、Pb、Zn 等金属元素含量之和高于 10%；非金属矿石 S、P、C 等非金属元素含量之和

高于 8%，且金属元素总含量低于 5%。识别结果见表 3。

**Table 3.** Confusion matrix for lithology classification based on LIBS elemental quantification

**表 3.** 基于 LIBS 元素定量的岩性大类识别混淆矩阵

真实\预测	岩浆岩	变质岩	沉积岩	金属矿石	非金属矿石	合计	准确率
岩浆岩大类	8	1	0	0	0	9	88.9%
变质岩大类	2	0	0	0	0	2	0.00%
沉积岩大类	1	0	0	1	7	9	0.00%
金属矿石大类	2	3	4	14	1	24	58.33%
非金属矿石大类	2	0	1	0	3	6	50.00%
合计	16	3	5	15	11	50	

岩浆岩识别准确率最高(88.9%)，金属矿石次之(58.3%)；变质岩与沉积岩因样品数量少(各 2 个和 9 个)且判别阈值边界模糊，未能正确识别。总体分类准确率为 52.0% (26/50)，Kappa 系数 0.35，表明基于元素含量的规则判别一致性一般，需结合光谱结构特征进一步优化。

若仅仅根据 VIS-SWIR 的基团与候选矿物列表来识别岩矿类型，核心思想是优先识别光谱响应最强烈、矿物学指向最明确的特征基团，根据排名先后唯一化候选矿物合集，以此锁定样品的大类归属。将识别到的基团按照其矿物学指示性分为三个优先级，从左往右以此降低：金属基团指定的金属矿石、碳酸根强指的沉积岩、羟基和水指出的粘土矿物。在识别大类后与真实岩性进行对比，若一致则说明识别成功。识别结果见表 4。

**Table 4.** Confusion matrix for lithology classification based on VIS-SWIR candidate mineral set and groups

**表 4.** 基于 VIS-SWIR 候选矿物集及基团的岩性大类识别混淆矩阵

真实\预测	岩浆岩	变质岩	沉积岩	金属矿石	非金属矿石	合计	准确率
岩浆岩大类	4	1	1	2	1	9	57.1%
变质岩大类	0	0	1	1	0	2	0%
沉积岩大类	0	0	7	2	0	9	80%
金属矿石大类	0	0	0	21	3	24	87.5%
非金属矿石大类	0	0	0	0	6	6	100%
合计	4	0	10	26	10	50	-

该方法的总体分类准确率达 76.0%，Kappa 系数提升至 0.68，表明光谱形态学特征对岩性判别具有更强的特异性。非金属矿石实现完全正确识别(100%)，金属矿石与沉积岩准确率亦达 87.5%和 77.8%，验证了金属基团( $\text{Fe}^{3+}$ 、 $\text{Fe}^{2+}$ )、碳酸根( $\text{CO}_3^{2-}$ )及羟基/水( $\text{Al-OH}$ 、 $\text{Mg-OH}$ 、 $\text{H}_2\text{O}$ )作为大类指示性标志的可靠性。然而，岩浆岩识别准确率降至 44.4%，主要归因于硅酸盐矿物基团(如 Si-O 键振动)在可见-短波红外波段响应较弱，且长石类矿物缺乏诊断性吸收特征；变质岩则因矿物组合复杂、变质程度差异导致光谱变异大，加之样本量过少( $n=2$ )，未能建立有效判别规则。

本研究构建“元素-基团-谱形”三元联动的约束满足型矿物识别框架。约束排除机制采用“硬约束优先、软匹配校验”的层级决策逻辑：基团刚性排除通过诊断光谱中 2200~2300 nm 羟基吸收特征(深度 > 0.05、信噪比 > 3)的布尔检验，强制剔除白云母、绿泥石等层状硅酸盐矿物，无论其谱形相似度高低；化学式软性约束则依据元素反演结果，按质量守恒与电价平衡原则筛选矿物，显著缩减候选空间。经双重约束筛选后，剩余矿物的主体矿物组合和含量可确定，进而推断岩矿类别。

传统“谱线-矿物”经验对照法依赖专家知识，难以实现自动化大规模处理。本研究构建“元素定量-化学式反演-主量矿物锁定”递进式解析框架，突破传统“谱线-矿物”经验对照局限。以 WMT-CNN 预测的元素摩尔分数[14]为基础，对接国家岩矿化石标本资源共享平台晶体化学数据库，构建矿物-元素摩尔质量矩阵。采用双层匹配策略：首先按绝对误差快速筛选；其次引入综合评分函数  $\text{Score} = 0.6 \times \text{摩尔误差} + 0.4 \times \text{含量偏差}$ ，权重经网格搜索与五折交叉验证确定，抑制高背景元素假阳性。经双阈值筛选(匹配误差  $< 1$  且含量占比  $\geq 70\%$ )后，综合光谱匹配结果与基团排除规则，最终锁定主量矿物并判断岩矿类型。该方法融合晶体化学约束与深度学习定量结果，提升识别效率、鲁棒性与可解释性。

使用 WMT-CNN 预测的样本元素含量，匹配国家标准矿物库中的元素摩尔比例与化学式信息。通过编程实现元素-矿物匹配，并按综合评分排序输出前十名候选矿物。将 50 个样本划分为岩浆岩、变质岩、沉积岩、金属矿石和非金属矿石五类。

基于 50 个涵盖岩浆岩、变质岩、沉积岩、金属矿石及非金属矿石的验证样品，识别结果(表 5)表明，金属矿石识别准确率最高(95.8%)，其次为岩浆岩(88.9%)、沉积岩(77.8%)，变质岩与非金属矿石较低(50.0%、33.3%)。

**Table 5.** Results of dual-modal mineral identification

**表 5.** 双模态矿物识别结果

双模态矿物识别结果表真实\预测	岩浆岩	变质岩	沉积岩	金属矿石	非金属矿石	合计	准确率
岩浆岩大类	8	0	0	1	0	9	88.90%
变质岩大类	1	1	0	0	0	2	50
沉积岩大类	1	0	7	1	0	9	77.8
金属矿石大类	1	0	0	23	0	24	95.8
非金属矿石大类	2	0	1	1	2	6	33.3
合计	13	1	8	26	2	50	

金属矿石大类因具有显著的 Fe、Cu、Pb、Zn 等成矿元素特征，识别准确率最高(95.8%)；岩浆岩大类依赖  $\text{SiO}_2$  含量连续变异与特征  $\text{Fe}^{2+}$  吸收，准确率达 88.9%；沉积岩因碳酸盐、蒸发盐类矿物的诊断性  $\text{CO}_3^{2-}$  与水分子吸收，准确率为 77.8%。变质岩与非金属矿石识别准确率相对较低(50.0%与 33.3%)，其主要制约因素在于：① 区域变质作用下形成的矽卡岩矿物(如透辉石-钙铁辉石)端元光谱高度相似；② 碳酸盐岩基团吸收易受 Fe、Mn 类质同象替代干扰致峰位偏移；③ 黏土矿物主量元素组成相近且关键微量元素信号强度低于检测限。该结果证实，当前框架对岩相学分类明确、矿相组合相对简单的样品具有优异的判别能力，但在处理地球化学与光谱特征双重高度相似的疑难矿物时，需进一步引入微区分析数据或拉曼光谱等辅助手段。

## 6. 结果与讨论

本研究构建的“WMT-CNN 元素定量 + KPCA-KNN 与孪生网络双阶段光谱匹配 + 基团识别纠偏”多模态框架，实现了 LIBS 光谱到元素组成、岩矿类型判别的端到端智能解译。多源信息融合有效弥补了单一模态在复杂矿物体系下的局限：LIBS 提供全元素定量约束，反射光谱提供基团诊断，二者协同显著提升了野外主量矿物识别的效率与鲁棒性。

### 6.1. 实验结论

WMT-CNN 实现 LIBS 全波段 9 元素同步定量预测，整体  $R^2$  均值 0.8933，误差集中且训练收敛稳定，

验证了模型对复杂基体的较强泛化能力,尤其在低信噪比条件下性能保持稳定。KPCA-KNN 粗检索与孪生网络精匹配构成的双阶段光谱匹配策略兼顾检索效率与高相似矿物区分能力,有效解决了黄铁矿与黄铜矿等易混淆矿物判别难题。“元素-光谱-基团”协同约束机制实现岩矿大类识别,其中金属矿石与岩浆岩准确率分别达到 95.8%与 88.9%,误判率降低至 5%以下,显著提升野外自动化识别的可靠性。

## 6.2. 方法优势与应用前景

(1) 方法优势: WMT-CNN 采用全波段自主特征学习,规避人工选线经验依赖,简化野外链路; KPCA-KNN 粗检 + 孪生网络精匹配兼顾检索效率与高相似矿物判别能力; 基团检验提供物理可解释纠偏,提升主量矿物锁定可靠性。

(2) 工程应用前景: LIBS 同步定量 + 反射光谱诊断融合,野外快速编录、异常验证与目标优选,为钻探验证提供实时决策依据,支撑新一轮找矿突破。设备小型化后有望实现“现场获取-即时输出”。

(3) 改进方向: 扩充训练集覆盖度与多场景数据,优化 WMT-CNN 结构与动态加权策略以增强低丰度指示元素辨识,完善匹配权重与阈值自适应机制,提高难例区分能力[15]。未来将进一步融合拉曼光谱与 XRF 数据,构建多维度交叉验证体系。

## 参考文献

- [1] 王登红,代鸿章,刘善宝,等. 中国战略性关键矿产勘查开发进展与新一轮找矿的建议[J]. 科技导报, 2024, 42(5): 7-25.
- [2] 罗立强,沈亚婷,吴晓军. X 射线光谱分析技术发展新趋势与新方向[J]. 冶金分析, 2021, 41(12): 18-26.
- [3] 邵妍,张艳波,高勋,等. 激光诱导击穿光谱技术的研究与应用新进展[J]. 光谱学与光谱分析, 2013, 33(10): 2593-2598.
- [4] 刘志红,贾豫东. 基于特征融合的类火星矿物 LIBS 定量分析[J]. 激光与光电子学进展, 2025, 62(5): 373-379.
- [5] 孙鹏. 基于激光诱导击穿光谱的矿石分类检测技术研究[D]: [硕士学位论文]. 太原: 中北大学, 2023.
- [6] 张博,司庆红,苗培森,等. 基于近红外岩心光谱扫描技术研究鄂尔多斯盆地彭阳钼矿床矿物分布特征[J]. 岩矿测试, 2022, 41(5): 733-743.
- [7] Cai, J., Yu, W., Fang, Q., Zi, R., Fang, F. and Zhao, L. (2023) Extraction of Rocky Desertification Information in the Karst Area Based on the Red-NIR-SWIR Spectral Feature Space. *Remote Sensing*, **15**, Article 3056. <https://doi.org/10.3390/rs15123056>
- [8] Jahoda, P., Drozdovskiy, I., Payler, S.J., Turchi, L., Bessone, L. and Sauro, F. (2021) Machine Learning for Recognizing Minerals from Multispectral Data. *The Analyst*, **146**, 184-195. <https://doi.org/10.1039/d0an01483d>
- [9] 郭连波,牛雪晨,张猛胜,等. 激光诱导击穿光谱技术应用研究进展(特邀) [J]. 光子学报, 2023, 52(3): 67-80.
- [10] Islam, N.U. and Lee, S. (2019) Interpretation of Deep CNN Based on Learning Feature Reconstruction with Feedback Weights. *IEEE Access*, **7**, 25195-25208. <https://doi.org/10.1109/access.2019.2899901>
- [11] 张鹏飞,周婷,夏道华,等. 好奇号火星车 ChemCam-LIBS 光谱数据的定量分析研究[J]. 红外与激光工程, 2022, 51(9): 333-342.
- [12] 舒开强,陈友元,彭郑英,等. 铀矿中多目标元素的激光诱导击穿光谱定量分析方法研究[J]. 分析化学, 2023, 51(7): 1195-1207.
- [13] 国家岩矿化石标本资源共享平台[EB/OL]. 北京: 中国地质大学(北京), 2025. <http://www.nimrf.net.cn/>, 2025-01-18.
- [14] 实体面材产品中钙、铝、硅元素含量的测定化学分析法(中国国家标准,报批稿) [J]. 石材, 2020(9): 35-42.
- [15] Rao, Y., Ren, W., Kong, W., Zeng, L., Wu, M., Wang, X., et al. (2024) Rapid Quantitative Analysis of Raw Rocks by LIBS Coupled with Feature-Based Transfer Learning. *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, **39**, 925-934. <https://doi.org/10.1039/d3ja00341h>