

文章编号 1004-924X(2026)04-0548-11

LIBS 结合最大相关最小冗余特征选择的 镁合金快速分类识别

陈明方¹, 官宇^{2,3}, 徐向君^{2*}, 冯磊², 王鑫浩², 邱选兵², 李传亮²

(1. 上海交通大学 电子信息与电气工程学院, 上海 200240;

2. 太原科技大学 应用科学学院, 山西省精密测量与

在线检测装备工程研究中心, 山西 太原 030024;

3. 太原科技大学 材料科学与工程学院, 山西 太原 030024)

摘要: 镁合金因其低密度、高比强度和优异的耐腐蚀性能, 在航空航天、汽车及电子工业中得到广泛应用。激光诱导击穿光谱(LIBS)具有分析速度快、无需复杂样品制备等优势, 因此在镁合金检测领域具有良好应用前景。由于 LIBS 光谱在不同次测量中存在较大波动, 同时不同类型镁合金的光谱相似度较高, 数据中还包含冗余信息, 直接分类往往效果有限。本文提出基于特征选择的镁合金快速分类方法, 系统对比了最大相关最小冗余(mRMR)、随机森林(RF)和光谱指数三种特征选择方法, 并结合支持向量机(Support Vector Machine, SVM)、反向传播神经网络(BPNN)和K近邻(KNN)三种分类模型, 构建了多种镁合金分类模型。实验结果表明: mRMR-BPNN在仅使用180个特征的情况下, 在首日和次日的测试数据中分别达到99.4%和92.5%的准确率, 显著优于其他特征选择-分类器组合方法以及原始光谱直接分类方法。该方法在无需复杂前处理的条件下有效提升了模型的分类准确率与泛化能力, 为镁铝合金材料的快速在线检测与质量控制提供了一种可靠分析手段, 对推动 LIBS 技术在工业现场中的实际应用具有积极意义。

关键词: 激光诱导击穿光谱; 镁合金; 特征选择; 机器学习

中图分类号: O433.4; TF521 **文献标识码:** A

doi: 10.37188/OPE.20263404.0548

CSTR: 32169.14.OPE.20263404.0548

Feature selection enhances classification accuracy of magnesium alloys in LIBS spectra

CHEN Mingfang¹, GONG Yu^{2,3}, XU Xiangjun^{2*}, FENG Lei²,

WANG Xinhao², QIU Xuanbing², LI Chuanliang²

(1. School of Electronic Information and Electrical Engineering, Shanghai Jiao Tong University,
Shanghai 200240, China;

2. School of Applied Science, Taiyuan University of Science and Technology, Shanxi Precision
Measurement and Online Testing Equipment Engineering Research Center, Taiyuan 030024, China;

收稿日期: 2025-09-30; **修订日期:** 2025-10-30.

基金项目: 国家自然科学基金(No. 12504482, No. 62475182, No. 52076145, No. 12304403); 国家重点研发计划(No. 2023YFF0718100); 山西省科技创新人才团队专项资助(No. 202304051001034); 山西省重点研发计划项目(No. 202302150101006, No. 202402150301012, No. 202402130501005); 太原科技大学博士启动金资助项目(No. 20252097)

3. School of Materials Science and Engineering, Taiyuan University of Science and Technology,
Taiyuan 030024, China)

* Corresponding author, E-mail: 2025053@tyust.edu.cn

Abstract: Magnesium alloys, owing to their low density, high specific strength, and excellent corrosion resistance, are widely applied in aerospace, automotive, and electronics industries. Laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) offers advantages such as rapid analysis and minimal sample preparation, making it highly promising for magnesium alloy detection. However, LIBS spectra exhibit significant fluctuations across repeated measurements, while the spectral similarity among different types of magnesium alloys is high. In addition, the data contain redundant information, which limits the performance of direct classification. In this work, a rapid classification method for magnesium alloys based on feature selection was proposed. Three feature selection strategies maximum relevance minimum redundancy (mRMR), random forest (RF), and spectral indices were systematically compared and combined with three classifiers, including support vector machine (SVM), back propagation neural network (BPNN), and k-nearest neighbor (KNN), to construct multiple classification models for magnesium alloys. Experimental results demonstrate that the mRMR-BPNN model achieved accuracies of 99.4% and 92.5% on the first-day and second-day test datasets, respectively, using only 180 selected features. This performance significantly outperforms other feature selection classifier combinations as well as direct classification using raw spectra. The proposed method effectively improves both classification accuracy and generalization capability without requiring complex preprocessing, providing a reliable approach for rapid online detection and quality control of magnesium-aluminum alloys. This work highlights the practical potential of LIBS technology for industrial on-site applications.

Key words: laser-induced breakdown spectroscopy; magnesium alloy; feature selection; machine learning

1 引言

镁合金被认为是21世纪最具开发前景和应用潜力的“绿色”工程材料之一^[1],是一种物理和化学性能优异的轻质金属材料^[2]。其高比强度和比刚度能够满足轻量化结构的要求,优良的铸造性和可加工性使其适合复杂零件的制造。同时,丰富的镁矿资源使得镁合金在成本和可持续性方面也展现出巨大优势。不同类型的镁合金因铝及其他合金元素含量的差异,在强度、耐腐蚀性和耐磨性等方面表现出显著差别,从而适应多样化的工业需求。镁合金在工业领域具有广泛的应用,实现对不同类型镁合金的快速、准确识别与分类,对于材料合理选型、性能保障以及工业质量控制具有重要意义。

目前,镁铝合金的分类主要依赖化学分析、机械性能测试或传统光谱分析等方法。化学分析技术,如电感耦合等离子体发射光谱、X射线

荧光和原子吸收光谱,以上技术虽然能够提供精确的元素定量信息,但通常需要复杂的样品前处理,检测周期较长,且设备成本高,无法实现工业现场的快速检测。机械性能或物理方法,如硬度测试、拉伸试验和冲击试验,虽然操作相对简便,但检测效率低,分类结果易受经验影响,对于成分与性能相近的镁合金难以实现准确区分。总体而言,传统方法在检测速度、便捷性、现场适用性及分类准确性等方面均存在明显局限。因此,亟需一种能够快速、无损且可靠地对镁合金进行分类的技术。激光诱导击穿光谱(Laser Induced Breakdown Spectroscopy, LIBS)技术是一种原子发射光谱技术^[3-6],通过高能激光脉冲激发样品表面形成等离子体,并采集其发射的特征光谱,实现多元素的同时检测。与传统分析方法相比,LIBS具有无需复杂样品预处理、分析速度快、对样品损伤小以及可实现在线检测等优势。近年来,凭借其原位、在

线、快速、全元素分析的特点^[7-9],LIBS在快速分类分析领域受到广泛关注,为镁铝合金快速分类提供了可行方案。

基于LIBS技术的多元素检测优势,近年来其在金属及其他材料快速分类领域得到了广泛关注和应用。Aberkane等^[10]通过人工神经网络(Artificial Neural Network, ANN)、K近邻(K-Nearest Neighbors, KNN)及支持向量机(Support Vector Machine, SVM)实现了对不同锌合金的分类,结果显示SVM在锌合金LIBS光谱分类中表现优异。Liang等^[11]将LIBS与SVM相结合,实现了不同牌号钢材的快速识别,通过改进SVM模型算法,在满足多分类目的的同时,避免了冗余信息对识别的干扰,提高了分类准确率。刘可等^[12]应用偏最小二乘(Partial Least Squares, PLS)算法,对20个脉冲累计LIBS信号实现11种塑料样品分类,准确率达到100%。以上研究表明,现有工作主要集中于分类模型的选择和优化,对LIBS光谱特征本身的分析与提取关注较少。LIBS光谱数据本身具有高维、高冗余的特性,每个光谱包含数千个波长通道,其中大量是背景噪声或冗余特征。直接将全谱数据输入分类模型,不仅会显著增加计算复杂度,更可能导致模型过拟合,从而影响分类的精度和稳定性。因此,一些学者利用特征选择方法结合机器学习提升LIBS性能。杨海燕等^[13]提出一种将相关系数法与经典特征波长筛选技术相结合的特征选择方法,并利用机器学习模型对铜合金样品进行分类识别。结果表明,该方法能够快速、精准地提取光谱特征信息,显著提升分类模型的准确率与运行效率。Sheng等^[14]将LIBS技术与PCA-SVM模型结合,实现了对10个等级铁矿石的高精度识别,识别率达96%。YAN等^[15]将变量约简方法(Variable-reduction Wootton Sergeant Phan-Tan-Luu's, V-WSP)与粒子群优化算法结合用于特征选择,不仅有效剔除了冗余特征,还显著降低了特征筛选的计算时间。Zhang等^[16]采用独立分量分析(Independent Component Analysis, ICA)提取光谱有效特征,并将其作为小波神经网络(Wavelet Neural Network, WNN)的输入,建立的ICA-WNN模型对三类煤灰样品的分

类准确率达到98.89%。综上所述,对高维、高冗余的LIBS原始光谱进行特征提取与降维处理,不仅有助于消除噪声与冗余信息,还能提升模型的运行效率、泛化能力及可解释性。这对于从光谱细微差异中实现镁合金的高精度分类具有重要意义。此外,目前针对镁合金的分类研究仍相对有限,尤其是针对AE44, AM, AZ31, AZ91和ZK61等典型镁铝合金的高效、稳定分类尚缺乏系统性研究。

特征选择作为一种常规的数据降维手段,能够有效剔除冗余变量、降低模型复杂度,并提升模型的鲁棒性。本研究系统比较了光谱指数法、随机森林(Random Forest, RF)法和最大相关最小冗余(Maximum Relevance Minimum Redundancy, mRMR)法三种特征选择算法在镁合金LIBS分类中的适用性。将各方法筛选得到的特征子集分别输入SVM, BPNN和KNN等机器学习模型,构建并评估多种典型镁铝合金的分类模型,从而验证所提出方法的有效性与稳定性。

2 实验和方法

2.1 LIBS实验装置

实验装置如图1所示。实验采用调Q Nd:YAG激光器($\lambda=1\,064\,\text{nm}$, 脉冲频率 $f=1\,\text{Hz}$, 脉冲宽度 $\tau=8\,\text{ns}$, 脉冲能量 $E=22.2\,\text{mJ/pulse}$)产生激光脉冲。使用一个反射镜(M_1)来改变激光束的传播方向,然后使用一个50 mm焦距的凸透镜将激光束聚焦在样品表面上,光斑直径为 $100\,\mu\text{m}$ 。将镁合金样品放置在三维电动平台上,其中电动平台步长为 $100\,\mu\text{m}$,运动速度50

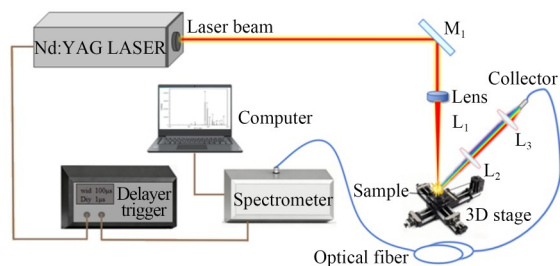


图1 LIBS实验装置示意图

Fig. 1 Schematic diagram of the LIBS experimental setup

mm/s,定位精度为 $\pm 5\text{ }\mu\text{m}$ 。使用焦距为 100 mm 的笼式系统将激光与样品相互作用时产生的等离子辐射收集,并通过直径为 $600\text{ }\mu\text{m}$ 的光纤输入到单通道光谱仪。光谱仪的分辨率为 $0.2\sim 0.3\text{ nm}$ 。波长范围为 $230\sim 500\text{ nm}$ 。使用延时发生器分别触发激光器与光谱仪,光谱采集延时时间设置为 $1\text{ }\mu\text{s}$ 。积分时间为 1.05 ms 。光谱仪由 Avasoft 8.11 软件进行数据采集与控制。

2.2 镁合金样品的制备与实验方法

本研究使用的五种常见的镁铝合金样品如

图 2 所示,均从市面购买。图 2(a)为 AE44,主要含镁(Mg)和铝(Al),辅以少量稀土元素铈(Re);图(b)为 ZK61,主要含 Mg 和 Zn,另含少量锆(Zr);图(c)为 AZ91,主要含 Mg 和 Al,同时含少量锌(Zn);图(d)为 AZ31,主要成分为 Mg 和 Al,含少量 Zn;图(e)为 AM,主要含 Mg 和 Al,同时加入少量锰(Mn)。这五种镁铝合金都以镁为基体、铝为主要合金元素,其次都含有微量的强化元素(如 Zn,Re,Mn 或 Zr),从而改善其力学性能和耐腐蚀性。五种镁合金的元素含量如表 1 所示。

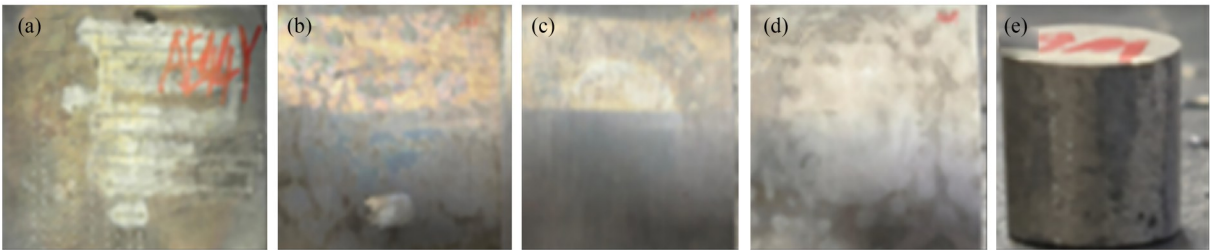


图 2 五种镁铝合金样品图
Fig. 2 Images of five magnesium alloy samples

表 1 镁合金样品元素含量		
Tab. 1 Magnesium alloy element content		
合金	主要元素(Mg)	强化元素
AE44	92%	Al(4%)Re(4%)
ZK61	93%	Zn(6%)Zr(1%)
AZ31	96%	Al(3%)Zn(1%)
AZ91	90%	Al(9%)Zn(1%)
AM	90%	Al(5%)Mn(5%)

实验前,样品表面用无水乙醇清洗,去除杂质和氧化层。随后将样品固定在三维电动位移平台上进行 LIBS 光谱采集。采集过程中,每完成三次激光烧蚀,平台会自动移动到下一个位置,以保证测试点分布均匀并避免局部烧蚀对结果的影响。每个样品在不同位置共采集 600 组光谱数据。为了保证数据的可靠性,每种合金制备了两份平行样品,总共获得 1 200 组光谱数据(2×600)。一份样本采集的光谱用于模型训练,另一份样本用于测试。此外,为进一步验证模型的鲁棒性,第二天又在相同条件下额外采集了 500 组光谱数据作为独立测试集。

2.3 分类模型的建立

在传统的 LIBS 光谱分类研究中,直接使用全光谱建模因高维冗余特征的存在而导致模型精度和性能下降,因此需要对特征数量进行优化,筛选出合适的特征子集。本研究采用特征选择方法提升镁铝合金 LIBS 光谱分类精度。首先,考虑到 LIBS 光谱数据波动较大,对原始数据进行预处理,包括剔除饱和和异常光谱,以保证数据质量。随后采用 z -score 标准化方法对光谱进行归一化处理,以消除量纲差异和强度波动带来的影响。鉴于 LIBS 光谱具有高维和高冗余的特点,在建模前采用特征选择作为常规降维步骤,以减少无关变量带来的干扰并提升模型的整体稳定性。最终,通过将特征选择与分类模型相结合,实现对镁铝合金的高效、准确识别。整体流程详见图 3 所示。

本研究采用三种特征选择方法以提升特征筛选的有效性与合理性。

(1)光谱指数法基于光谱学先验知识,通过构建与材料元素特征相关的归一化差异指数(Normalized Difference Index, NDI)来压缩维度,

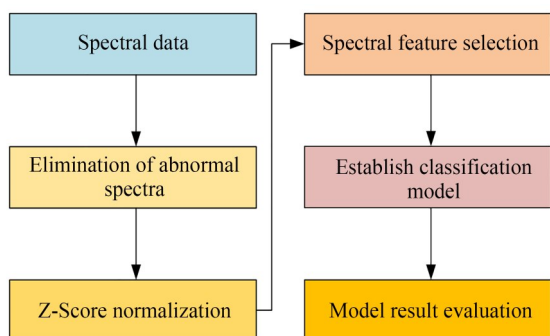


图3 光谱数据处理流程图

Fig. 3 Flowchart of spectral data processing

从而快速筛选与目标分类任务高度相关的特征。

(2)mRMR特征选择算法基于互信息理论,通过最大化特征与类别之间的相关性(Max-Relevance)并最小化特征间冗余(Min-Redundancy),从而获得较优的判别性特征子集^[17]。

(3)随机森林(RF)方法通过构建多个决策树并输出特征重要性指标,对特征进行排序和筛选,有效去除无关与冗余信息,同时为模型优化提供依据。其特征重要性通常通过节点分裂时的基尼指数下降量来度量^[18]。

对于分类模型,本文采用多种常用方法进行对比与验证。SVM^[19]通过径向基函数核有效处理非线性数据,其关键参数(包括惩罚系数 c 和核系数 γ)通过贝叶斯优化算法进行全局寻优,以提升分类准确性与鲁棒性。KNN算法^[20]基于邻近样本的类别进行分类,其最优近邻数 k 同样通过贝叶斯优化确定,在保证操作简便性的同时提升这一基准模型的性能。人工神经网络(ANN)^[21]通过模拟生物神经系统构建非线性映射模型。本研究采用反向传播神经网络(Back-propagation Neural Network, BPNN)模型,网络结构包含两层隐藏层,激活函数为Tanh,优化器选用Adam,最大迭代次数设为1 000。通过贝叶斯优化对网络的关键超参数进行寻优,使模型性能达到最优。

3 结果分析与讨论

3.1 LIBS光谱

镁铝合金样本LIBS光谱经过孤立森林算法

筛选后,获得了高质量的LIBS光谱数据,并计算了各类别的平均光谱进行对比分析。如图4展示了ZK61, AZ91, AZ31, AM及AE44五种镁铝合金在250~500 nm波长范围内的平均光谱。从图中可以直观观察到不同合金的光谱在谱线强度与波长上均存在显著差异,这反映了其元素成分的不同。通过与美国国家标准与技术研究院(National Institute of Standards and Technology, NIST)的原子发射光谱数据库进行比对,对图中的主要特征谱线进行标定。在所分析的波段内,不仅包含了基体元素Mg的一系列特征谱线,还包含其他关键元素Al, Ca和Mn等。这些元素所对应的谱线列于表2中。

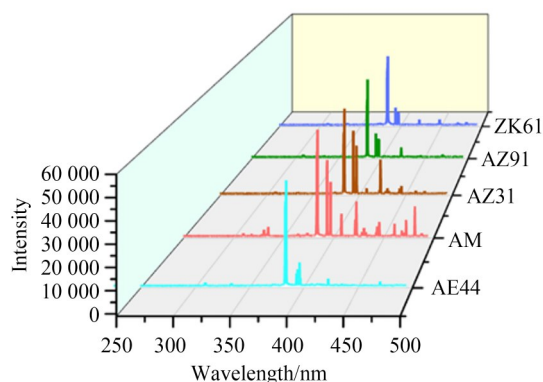


图4 镁合金LIBS光谱图

Fig. 4 LIBS spectra of magnesium alloys

表2 镁合金LIBS光谱中元素对应的波长

Tab. 2 Elemental wavelengths corresponding to magnesium alloy LIBS spectra

元素	波长/nm
Mg	383.28, 383.80, 383.94
Al	394.20, 394.50, 395.59
Ca	393.42, 396.14, 396.27, 396.52, 422.67
Mn	407.83, 481.09
Zn	481.09
Y	407.44, 408.97

3.2 主成分分析

镁铝合金LIBS光谱数据进行z-score归一化处理,为分析不同合金的光谱分布特征,采用

主成分分析(Principal Component Analysis, PCA)对五类样品光谱进行降维。如图5所示,展示了前两个主成分得分的二维散点分布以及前三个主成分得分的三维散点分布,可直观反映不同样品 LIBS 光谱在特征空间中的聚类情况。图5(a)中PC1作为最主要的区分维度,解释了样本间绝大部分方差,成功将AE44与ZK61(分布于负值区域)同AM,AZ31及AZ91(分布于正值区域)区分开;而PC2作为次要区分维度,进一步将AM,AZ31与AZ91在纵向上分离,使AZ91集中于左上部,AM位于中上部,AZ31呈右上部带状分布。整体上二维投影在保留主要判别信息的基础上,清晰呈现出样本在主成分空间中的分布规律。在相同实验条件下进行了重复性

实验,次日PCA结果如图5(b)所示,AE44与ZK61分布于PC1负向区域,AM集中于正向区域,且PC2将AZ91,AM与ZK61在纵向上分离。ZK61与AE44,AZ31与AZ91的类别簇边界相互重叠。造成上述现象主要由于实验过程中多个因素的综合影响。首先,第二天的实验是在重新启动所有仪器后进行的,仪器的初始状态可能导致激光器的能量输出和光学系统的稳定性有所波动。除上述因素外,样品自身的基体效应也是关键原因:激光脉冲作用于样品表面的不同位置时,因微观成分与结构的差异,其烧蚀效率、等离子体特性及最终光谱信号均会有所不同。此外,环境中的温湿度变化也产生微小影响。

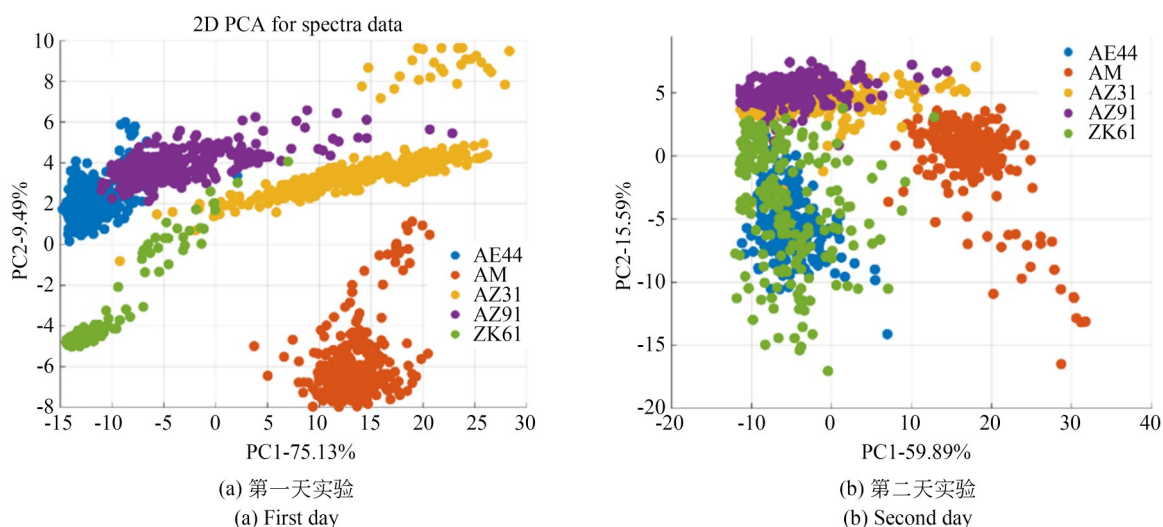


图5 LIBS光谱数据二维和三维主成分的分散点图

Fig. 5 2D and 3D PCA scatter plots of the LIBS spectral data

从PCA的结果图可知,第一天实验中不同类别样品光谱存在明显聚类效果,每个类别有较为清晰边界。而第二天实验数据点有明显的重叠,各个类别没有明显的边界。以上结果表明直接利用全波段光谱数据难以实现精准的分类与预测。因为PCA旨在保留数据的最大方差,而这些方差可能主要来源于基体效应、等离子体波动等物理背景,而非与合金成分直接相关的特征信息。因此,需要从高维、高冗余的LIBS光谱中筛选出与目标合金类别最相关、最具判别性的特征变量(即特征波长),以构建更稳健、更高效的

判别模型,从而提高模型的分类准确率和鲁棒性。

3.3 镁合金LIBS光谱的分类结果

3.3.1 LIBS光谱的特征选择

镁铝合金LIBS光谱数据维度较高,并非所有特征都与样品类别的差异密切相关,部分变量甚至可能掩盖有效信息。本研究采用光谱指数法、随机森林和mRMR算法对镁铝合金的LIBS光谱进行特征评估。依据各方法得到的特征重要性排序结果,对所有光谱特征进行降序重排,形成由高到低的重要性序列。三种方法

筛选出的前五个特征,如表3所示。最后,通过逐步增加排序后的特征数量并依次输入分类模型,系统评估特征数量及特征重要性对模型性能的影响。

表 3 不同方法特征权重排序			
Tab. 3 Feature weight ranking of different methods			
特征选择方法	特征权重排序	特征波段/nm	对应元素
光谱指数	1	393.42	Ca
	2	394.20	Al
	3	383.94	Mg
	4	396.27	Ca
	5	383.28	Mg
随机森林	1	396.27	Ca
	2	394.59	Al
	3	481.09	Zn
	4	408.97	Y
	5	394.33	Al
mRMR	1	396.27	Ca
	2	396.52	Ca
	3	407.44	Y
	4	481.09	Zn
	5	396.14	Ca

3.3.2 镁合金分类结果

基于 mRMR 的特征选择方法测试集准确率随不同数目特征谱线之间的关系如图 6 所示,三种分类模型在次日测试中展现出明显的差异。首日实验中,当特征数量达到 70 时,三种模型均呈现优异性能(准确率约 99%),其中 SVM 模型准确率最高。但是在次日未知数据测试中,模型预测能力出现明显差异:mRMR-BPNN 在特征数量为 180 时仍保持 92.5% 的准确率,首日分类准确率为 99.4%,展现出较强的鲁棒性;mRMR-SVM 表现稳定但精度有限,最终维持在 86% 左右;而 mRMR-KNN 则出现明显下降趋势,准确率下降至约 77%,表明其鲁棒性不足。结果表明 mRMR-BPNN 在处理新批次数据时具有较好的鲁棒性,虽存在轻微波动,其整体稳定性与准确率优于另外两种模型。

基于 RF 的特征选择方法测试集准确率随不同数目特征谱线之间的关系如图 7 所示,在首日实验数据上三种模型都可达到 98% 的准

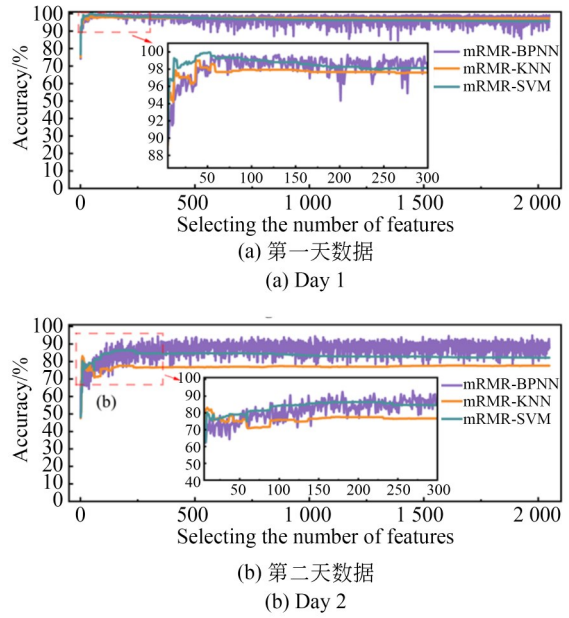


图 6 mRMR 方法测试集准确率随不同数目特征谱线之间的关系
Fig. 6 Test set accuracy versus number of selected features with the mRMR method

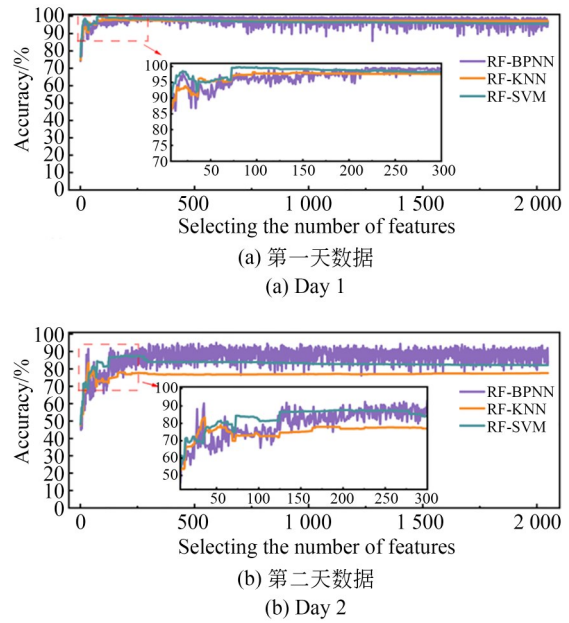


图 7 RF 方法测试集准确率随不同数目特征谱线之间的关系
Fig. 7 Test set accuracy versus number of selected features with the RF method

确率。但是在次日实验数据上三种模型表现出不同的性能,其中KNN准确率显著低于其他两种模型,SVM模型在特征数量达到125时准确率可以达到86%,BPNN当特征数量为226时准确率高达92.4%,显著优于KNN和SVM模型。

基于光谱指数的特征选择方法测试集准确率随不同数目特征谱线之间的关系如图8所示,在准确率表现上明显逊于mRMR和RF特征选择方法。光谱指数结合KNN/BPNN/SVM模型的最高准确率仅能达到93%左右,且在第二天验证中表现均比较差。

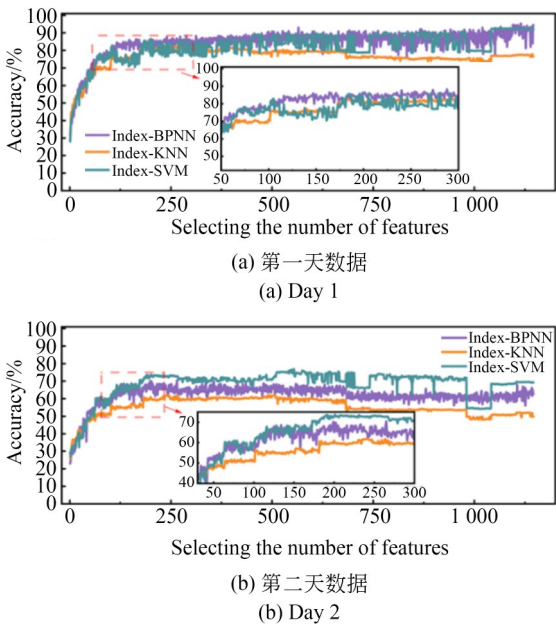


图8 光谱指数方法测试集准确率随不同数目特征谱线之间的关系

Fig.8 Test set accuracy versus number of selected features with the spectral index method

3.3.3 分类结果分析

为直观比较不同特征选择方法与分类器组合的性能,表4列出三种特征选择方法在最优特征数量下与不同分类模型结合时的分类准确率。

mRMR特征选择与BPNN分类器的组合在本研究中分类精度最高。该方法仅需180个特征,即在首日与次日实验中分别达到99.4%和92.5%的准确率,而完整训练(包含贝叶斯超参

表4 不同方法预测准确率对比				
Tab.4 Prediction accuracy of different methods				
特征选择方法	分类模型	特征数量	首日准确率/%	次日准确率/%
光谱指数	SVM	459	89	71
	BPNN	564	93	66.9
	KNN	183	83	60.7
随机森林	SVM	125	99.1	86.6
	BPNN	226	99.5	92.4
	KNN	169	97.8	78
mRMR	SVM	188	98.2	86.4
	BPNN	180	99.4	92.5
	KNN	37	97.6	78.6

数搜索和最终模型训练)耗时仅12.36 s。相比之下,直接利用RF特征选择得到的226个特征并结合BPNN模型,在首日与次日的准确率分别为99.5%和92.6%,训练耗时为13.06 s。使用全光谱特征(所有特征)结合BPNN模型的准确率分别为99.1%和87.7%,训练耗时略高。虽然mRMR-BPNN与RF-BPNN在准确率上差异极小(约0.1%),mRMR-BPNN在特征数和训练耗时上更优,且相比全光谱特征方法在次日测试集上的精度提升明显,展现了更高的计算效率和鲁棒性。对LIBS镁合金分类,类别差异往往由少数关键元素相关谱线及其相对强度变化体现,而背景光谱、噪声以及大量无关波段并不提供判别信息。mRMR正是通过相关性筛选结合冗余去除,从而提升了类间可分性并消除过拟合。此外,为了验证模型准确率的稳定性和不确定性,对测试数据进行了误差分析:在每次抽取80%的测试样本的条件下重复50次,得到首日平均准确率为99.39%,95%置信区间为[99.25%,99.58%],次日平均准确率为92.50%,95%置信区间为[91.78%,93.60%],结果表明模型在不同实验日的数据上均表现出高精度且稳定可靠的分类性能。

与国内外相关研究相比,本研究的分类结果也达到了较好水平。Dai等^[22]采用判别式受限玻尔兹曼机(Discriminative Restricted Boltzmann Machine,DRBM)对五种不同的铝合金小样本样

品进行光谱分类,分类准确率达到 100%。李等^[23]利用 XGBoost 算法对六种铝合金样品的 LIBS 光谱数据进行识别,准确率可达 96.67%。潘等^[24]将 PCA 与极限学习机(Extreme Learning Machine, ELM)结合用于铝合金 LIBS 光谱分类,平均识别准确率达到 98.01%。以上文献报道的结果均基于单次实验,虽然预测准确率较高,但难以验证模型的鲁棒性。本文在第一天实验中分类准确率为 99.5%,在第二天独立实验中为 92.50%,表明 mRMR 方法能够有效筛选出冗余度低的关键特征,从而提升分类模型的鲁棒性。

4 结 论

本文研究了镁合金的 LIBS 光谱快速分类方法,通过构建 SVM, KNN 和 BPNN 三种分类模型,系统研究了其在全光谱条件下以及在不同特征选择方法下的分类表现。结果发现,在全光谱

维度下,三种模型在首日实验数据上均取得了较高的分类准确率,但在次日验证中整体性能有所下降。引入光谱指数法、随机森林法和 mRMR 法进行特征选择后,能够显著减少冗余信息并提升模型鲁棒性。mRMR-BPNN 在仅使用 180 个特征的条件,在首日和次日的数据测试中分别达到 99.4% 和 92.5%。研究表明采用特征选择方法对 LIBS 光谱进行降维处理,可以有效减少冗余信息,提高模型在不同批次数据上的预测稳定性。

作者贡献声明:

陈明方:测量方法的提出,论文构思和撰写;
宫宇:测量实验数据分析;
徐向君:测量实验设计及数据整理分析;
冯磊:测量实验数据分析和算法编写;
王鑫浩:论文软件与验证;
邱选兵:论文审核与编辑写作;
李传亮:论文获取资助与指导。

参考文献:

- [1] YANG J R, ZHU Z Q, HAN S J, *et al.* Evolution, limitations, advantages, and future challenges of magnesium alloys as materials for aerospace applications [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2024, 1008: 176707.
- [2] XIE H C, ZHAO H, GUO X, *et al.* Recent progress on cast magnesium alloy and components [J]. *Journal of Materials Science*, 2024, 59(22): 9969-10002.
- [3] CUI M C, XIONG S L, YANG N, *et al.* Applications of laser-induced breakdown spectroscopy in industrial measurement and monitoring: Multi-technology combination [J]. *Applied Spectroscopy Reviews*, 2025, 60(3): 243-291.
- [4] WAN E L, ZHANG Q H, LI L, *et al.* The online *in situ* detection of indoor air pollution via laser induced breakdown spectroscopy and single particle aerosol mass spectrometer technology [J]. *Optics and Lasers in Engineering*, 2024, 174: 107974.
- [5] XIONG S L, YANG N, GUAN H Y, *et al.* Combination of plasma acoustic emission signal and laser-induced breakdown spectroscopy for accurate classification of steel [J]. *Analytica Chimica Acta*, 2025, 1336: 343496.
- [6] 刘瑞斌, 殷允嵩. 激光诱导击穿光谱技术相关物理机制研究进展 [J]. *中国光学(中英文)*, 2024, 17(1): 19-37.
- [7] LIU R B, YIN Y S. Research progress on the related physical mechanism of laser-induced breakdown spectroscopy [J]. *Chinese Optics*, 2024, 17(1): 19-37. (in Chinese)
- [8] HAO Z Q, LIU K, LIAN Q L, *et al.* Machine learning in laser-induced breakdown spectroscopy: a review [J]. *Frontiers of Physics*, 2024, 19(6): 62501.
- [9] 秦云鹏, 隋明达, 魏自浩, 等. 不同延时条件下基于激光诱导击穿光谱的烧结混合料定量检测 [J]. *光学精密工程*, 2024, 32(13): 2052-2060.
- [10] QIN Y P, SUI M D, WEI Z H, *et al.* Quantitative detection of sintered mixed materials using LIBS under different delay conditions [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2024, 32(13): 2052-2060. (in Chinese)
- [11] 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(5): 1139.
- [12] LI A Z, WANG X S, XU X J, *et al.* Fast classifi-

- cation of tobacco based on laser-induced breakdown spectroscopy[J]. *Chinese Optics*, 2019(5): 1139. (in Chinese)
- [10] MESSAOUD ABERKANE S, ABDELHAMID M, MOKDAD F, *et al.* Sorting zamak alloys via chemometric analysis of their LIBS spectra[J]. *Analytical Methods*, 2017, 9(24): 3696-3703.
- [11] LIANG L, ZHANG T L, WANG K, *et al.* Classification of steel materials by laser-induced breakdown spectroscopy coupled with support vector machines [J]. *Applied Optics*, 2014, 53 (4) : 544-552.
- [12] 刘可, 邱春玲, 田地, 等. 一种基于激光诱导击穿光谱的塑料分类方法[J]. *光谱学与光谱分析*, 2017, 37(11): 3600-3605.
- LIU K, QIU C L, TIAN D, *et al.* Laser-induced breakdown spectroscopy for plastic classification [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2017, 37 (11): 3600-3605. (in Chinese)
- [13] 杨海燕, 潘从元, 赵前进, 等. 基于特征波长筛选的激光诱导击穿光谱铜合金分类[J]. *光学学报*, 2025, 45(22): 2230001.
- YANG H Y, PAN C Y, ZHAO Q J, *et al.* Classification of copper alloys based on feature wavelength selection in laser-induced breakdown spectroscopy[J]. *Acta Optica Sinica*, 2025, 45(22) : 2230001. (in Chinese)
- [14] 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.
- [15] YAN C H, LIANG J, ZHAO M J, *et al.* A novel hybrid feature selection strategy in quantitative analysis of laser-induced breakdown spectroscopy [J]. *Analytica Chimica Acta*, 2019, 1080: 35-42.
- [16] ZHANG T L, YAN C H, QI J, *et al.* Classification and discrimination of coal ash by laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) coupled with advanced chemometric methods[J]. *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, 2017, 32(10): 1960-1965.
- [17] 孙林, 徐枫, 李硕, 等. 基于ReliefF和最大相关最小冗余的多标记特征选择[J]. *河南师范大学学报(自然科学版)*, 2023, 51(6): 21-29, 175.
- SUN L, XU F, LI S, *et al.* Multilabel feature selection algorithm using ReliefF and mRMR[J]. *Journal of Henan Normal University (Natural Science Edition)*, 2023, 51(6): 21-29, 175. (in Chinese)
- [18] ZHOU J J, HU S F, REN X D, *et al.* Rapid quantitative analysis of multiple rare earth elements in NdFeB alloys based on laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) and random forest (RF)[J]. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 2024, 217: 106957.
- [19] REHAN I, KHAN S, GONDAL M A, *et al.* Non-invasive diabetes mellitus diagnostics using laser-induced breakdown spectroscopy and support vector machine algorithm[J]. *Arabian Journal for Science and Engineering*, 2024, 49 (1) : 1257-1265.
- [20] CAO Z, CHENG J J, HAN X D, *et al.* Rapid classification of coal by laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) with K-nearest neighbor (KNN) chemometrics[J]. *Instrumentation Science & Technology*, 2023, 51(1): 59-67.
- [21] SAEIDFIROZEH H, MYAKALWAR A K, KUBELÍK P, *et al.* ANN-LIBS analysis of mixture plasmas: detection of xenon [J]. *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, 2022, 37 (9) : 1815-1823.
- [22] DAI Y J, MA Q, ZHANG T S, *et al.* Classification of aluminum alloy using laser-induced breakdown spectroscopy combined with discriminative restricted Boltzmann machine [J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2025, 258: 105342.
- [23] 李晨阳, 陈雄飞, 张勇, 等. 基于XGBoost的铝合金LIBS光谱分类识别方法[J]. *光谱学与光谱分析*, 2021, 41(2): 624-628.
- LI C Y, CHEN X F, ZHANG Y, *et al.* Study on identification method based on XGBoost model for aluminum alloy using laser-induced breakdown spectroscopy[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2021, 41(2): 624-628. (in Chinese)
- [24] 潘立剑, 陈蔚芳, 崔榕芳, 等. 主成分分析结合极限学习机辅助激光诱导击穿光谱用于铝合金分类识别[J]. *冶金分析*, 2020, 40(1): 1-6.
- PAN L J, CHEN W F, CUI R F, *et al.* Application of laser-induced breakdown spectroscopy as-

sisted by principal component analysis and extreme learning machine in the classification recognition of

aluminum alloy [J]. *Metallurgical Analysis*, 2020, 40(1): 1-6. (in Chinese)

作者简介:



陈明方(1980—),男,四川广元人,高级工程师,博士研究生,2003年于重庆大学获学士学位,2015年于西南交通大学获工程硕士学位,现就读于上海交通大学电子信息专业,任职于四川九洲电器集团有限责任公司,主要从事智能制造、产品工程实现等研究。
E-mail:951449069@qq.com

通讯作者:



徐向君(1994—),男,山西忻州人,博士,讲师,2024年于北京理工大学获得工学博士学位,现就职于太原科技大学应用科学学院,主要从事激光诱导击穿光谱、机器学习等方向研究。E-mail: 2025053@tyust.edu.cn