

基于激光诱导击穿光谱技术的可回收垃圾自动识别分类传感器

杨蕾¹, 刘奥, 向勇

(合肥工业大学, 合肥 230000)

摘要: 资源的可持续发展和再利用是实现绿色、低碳、循环经济体系及生态可持续发展的重要环节, 垃圾分类是其中必不可少的一部分。可回收垃圾作为绿色低碳循环经济体系的重要组成部分, 其识别分类是实现资源循环利用和节能的前提。目前基于物理特性的方法准确率低, 检测样品种类有限; 基于图像的方法易受环境影响, 检测结果不稳定; 现有的光谱方法需要对检测的样品进行预处理, 不能实现快速、在线检测; 且现有的方法不能满足精细识别分类的需求。

本作品利用激光诱导击穿光谱(LIBS)技术实现可回收垃圾识别分类, 在消费者层面能准确可靠地识别分类可回收垃圾, 将其分为纸张、塑料、玻璃、金属、纺织品和木制品六类。在回收加工工厂层面, 对具有特定再利用用途的某类可回收垃圾实现精细识别分类, 针对金属和塑料的循环再利用需求, 将金属细分为铁、不锈钢、铜和铝, 将塑料细分为聚氯乙烯、聚甲醛、丙烯腈-丁二烯-苯乙烯、聚酰胺、聚乙烯和聚四氟乙烯。本作品搭建了 LIBS 光谱采集系统, 利用主成分分析(PCA)和线性判别分析(LDA)分别对垃圾样本 LIBS 光谱进行光谱特征提取, 消除噪声和冗余信息, 分析其聚类效果, 选择合适的聚类维度。结合随机森林(RF)和反向传播神经网络(BPNN), 建立并比较了四个分类模型: PCA + RF、PCA + BPNN、LDA + RF 和 LDA + BPNN。利用 QT 实现人机交互与通信, 基于 QT 设计的界面可以实现检测样品光谱采集、光谱特征提取、分类结果展示, 按照需求分别实现消费者层次的垃圾识别分类和回收加工工厂层面的精细识别分类。

关键词: 可回收垃圾识别分类; 激光诱导击穿光谱; PCA; LDA; RF; BP 神经网络

1 传感器设计背景和应用价值

1.1 设计背景

节约资源是我国的基本国策, 是维护国家资源安全、推进生态文明建设、推动高质量发

¹**第一作者信息:** (杨蕾, 女, 副教授, 物质成分分析的光谱技术、基于机器视觉、光谱的表面形貌检测、缺陷检测、及相关仪器设备的研发, yanglei@hfut.edu.cn)

通讯作者信息: (杨蕾, 女, 副教授, 物质成分分析的光谱技术、基于机器视觉、光谱的表面形貌检测、缺陷检测、及相关仪器设备的研发, yanglei@hfut.edu.cn)

展的重大任务。资源的可持续发展和再利用是实现绿色、低碳、循环经济体系的重要环节，垃圾分类是其中必不可少的一部分。随着经济的发展，垃圾总量逐年增长，可回收垃圾的识别和分类是将垃圾变废为宝，实现垃圾资源化、回收再利用、节约资源和助力双碳发展的重要环节。

大多数垃圾的识别和分类方法是基于其物理性质的差异，如重力分选、磁选、静电分离等，这些方法简单，检测类别有限，分类结果不准确，不能用于可回收垃圾资源再利用。随着图像处理技术和光谱技术的发展，可以识别和分类的垃圾种类越来越多，但由于受背景、光线、摄像机角度、垃圾样品的几何形状、颜色等因素的影响，图像处理的识别分类结果不稳定；光谱技术利用光谱信息对可回收垃圾样品进行识别和分类，不受环境和样品几何形状的影响。目前有近红外光谱技术、高光谱技术和荧光光谱技术，但近红外光谱、高光谱法需要对样品进行清洗、剪裁等预处理，荧光光谱技术需对样品研磨等预处理操作，且检测结果受光源变化、样品颜色、样品表面污染等影响，不能实现在线实时检测分类。

1.2 应用价值

该传感器基于 LIBS 发射光谱检测样品元素组分，根据可回收垃圾的物质成分实现识别分类，不受环境、光线、样品形状和颜色的影响，无需样品预处理，操作简单，具有快速、实时检测能力。针对可回收垃圾的复杂性和精确分类的重要性，该传感器能实现两种层面的分类，面对消费者层面的可回收垃圾识别分类，及面对回收加工工厂层面，对具有特定再利用用途的某类可回收垃圾进行精细识别分类。由于不同垃圾具有独特的物质组分特性，该传感器能准确、高效实现可回收垃圾的识别分类，六种可回收垃圾的识别分类准确率为 100%，针对金属和塑料精细分类的需求，最优模型准确率分别可达到 98.92%和 99.52%。

该传感器可解决现有可回收垃圾识别分类方法易受环境影响、分类准确率低、不能实现自动、在线识别分类和不能实现精细识别分类等问题，对生活工业垃圾分类、资源回收与加工工业，推进绿色生态建设，具有重要的应用价值。

2 创新点与优势

(1) 目前基于非光谱技术的可回收垃圾识别分类传感器研究主要有两类，一是传统的基于物理特性差异，如重力分选、磁选、静电分选等，该类传感器适用对象种类有限，识别分类结果不准确；二是基于图像处理技术，但检测结果受环境背景、光照、拍摄角度、垃圾形状、颜色等影响，识别分类结果不稳定。本作品的传感器系统基于 LIBS 技术，根据可回收垃圾的物质成分进行识别分类，不受环境背景、光照、垃圾形状、颜色等影响，识别分类速度快、

准确度高。

(2) 基于光谱技术的可回收垃圾识别分类传感器不受环境和样品几何形状影响，目前有近红外光谱、高光谱和荧光光谱技术，但近红外和高光谱需要对样品进行清洗、剪裁等预处理，荧光光谱需对样品进行研磨处理，不能实现快速、自动及在线的垃圾识别分类。本项目的传感器不需对垃圾样品进行预处理，可以实现快速、在线、远程和自动识别分类。

(3) 目前可回收垃圾识别和分类方法只能实现垃圾类别的识别分类，不能满足精细识别分类的需求。该传感器将 LIBS 光谱特征提取与机器学习结合，构建 4 个分类模型，基于 LIBS 技术特性，针对可回收垃圾成分的复杂性和精确分类的重要性，实现了面对消费者层面垃圾类别的识别分类，和面对回收加工工厂层面的精细识别分类。

3 实现方法简介

3.1 设计原理

基于 LIBS 技术的可回收垃圾自动识别分类传感器系统包括三个部分：样品 LIBS 光谱数据采集模块、数据处理及分类模块和人机交互与通讯模块三部分。

3.1.1 数据采集模块

LIBS 光谱数据采集模块由 ND:YAG 固体脉冲激光器、光谱仪 (Avaspec-ULS2048)、数字延迟发生器 (DG645) 构成，激光器发出的高能激光经全反射镜和聚光镜 (焦距为 100mm)，聚焦于垃圾样品表面，样品表面物质与激光互作用发生电离产生等离子体，等离子体膨胀辐射出光谱，经收集透镜 (焦距为 100mm) 通过光纤收集传输至光谱仪，光谱仪采集光谱信息将光信号转化为电信号，并传输至计算机。样品光谱信号采集过程中，等离子体形成初期会产生大量连续谱线，干扰特征谱线的提取与分析，数字延时发生器 DG645 控制激光器与光谱仪的工作延时，避免采集到连续光谱，以获得高信噪比的特征谱，延迟时间设为 2 μ s。

3.1.2 数据处理及分类模块

数据处理及分类模块包括原始 LIBS 光谱数据预处理、光谱数据特征提取和分类模型建立。光谱仪采集到的 LIBS 光谱数据存储在计算机里，首先利用有放回随机平均化方法 (bootstrap) 对原始光谱数据进行预处理，使光谱样本能最大程度地反映原始光谱信息，并减小光谱随机波动的影响；然后对预处理后的光谱数据进行特征提取，消除数据中噪声和冗余信息，提取特征参量，根据评估参数选择特征提取维数并评价特征提取结果；最后为提高识别分类准确度，将特征提取与机器学习结合建立分类模型，建立了四个分类模型，采用

AR、precision、recall 和 F-measure 指标评价对比这些模型的识别分类性能，实现各类方法的优缺点互补，并根据垃圾识别分类的需求选择最优模型。

3.1.3 人机交互与通讯模块

人机交互与通讯模块，利用 QT 实现人机交互与通信，基于 QT 设计的界面实现检测样品光谱采集、光谱特征提取、分类结果展示，按照需求分别实现消费者层次的垃圾类别识别分类和回收加工工厂层面的精细识别分类；通信功能实现上位机通信，对远程采集光谱信号进行识别分类，并将结果传送给上位机，实现远程识别分类。

3.2 设计方法

3.2.1 系统总体结构设计图

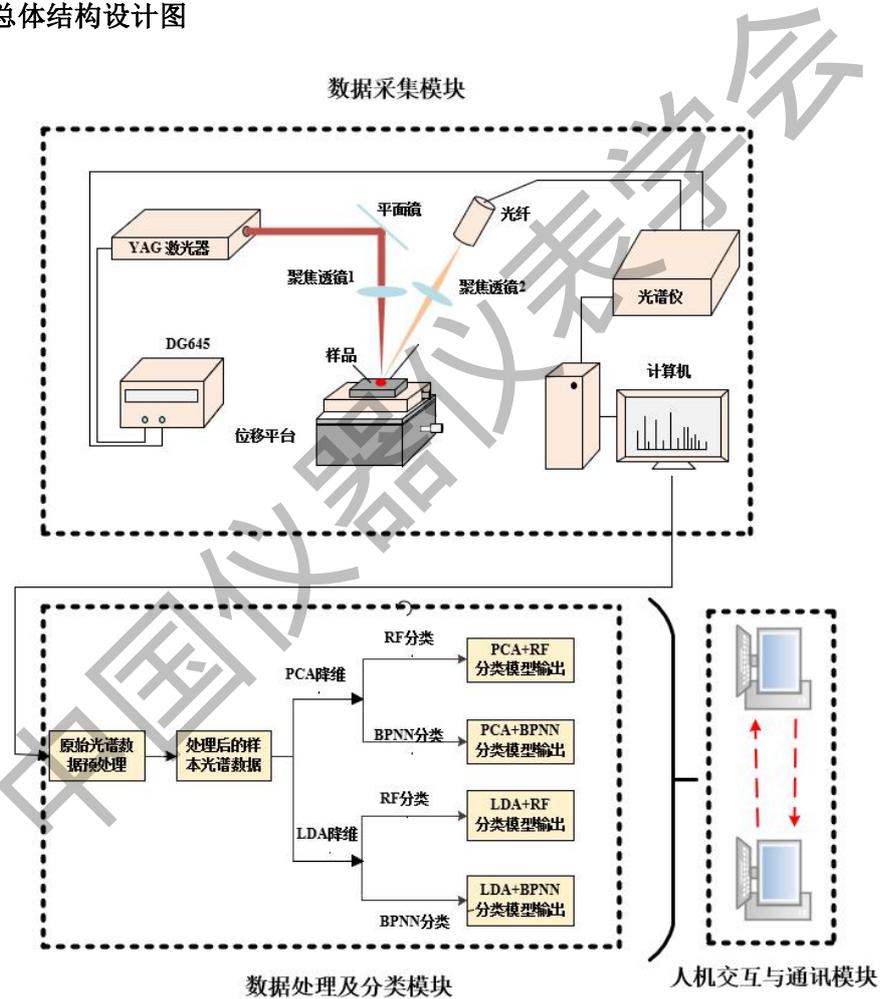


图 1 可回收垃圾自动识别分类传感器系统总体结构示意图

3.2.2 数据采集模块

如图 2 所示的 LIBS 系统由 1064 nm 脉冲 Nd: YAG 激光器(脉冲能量为 50 mJ，重复频率为 20 Hz，脉宽为 5 ns)、Avaspec-ULS2048 光谱仪(波长范围为 200-1100 nm，光谱分辨率约为 0.11 nm)和数字延迟发生器(DG645)组成。高能激光经过全反射镜，通过 100 mm 焦

距透镜聚焦于垃圾样品表面。

LIBS 技术是基于激光脉冲与样品的相互作用，产生介质击穿，即等离子体的形成。等离子体发射光由焦距为 100 mm 的收集透镜采集，通过光纤耦合到光谱仪进行光谱分析。在等离子体形成初期，会产生连续光谱，干扰特征光谱的提取和分析。利用 DG645 控制激光器与光谱仪之间的工作延迟时间，避免采集连续光谱，获得高信噪比的特征光谱。在 LIBS 实验中，对于大部分的垃圾样品，最优工作延迟时间为 2us。在实际检测中，被检测对象是未知的，工作延迟时间不能随着被检测对象的变化而改变。因此，考虑到该方法的通用性，本实验中所有样本的延迟时间均设置为 2us。为了避免涂层和污染物对样品表面的影响，在样品的同一位置多次采集，直到光谱强度的变化在 100-200 次范围内，光谱是稳定的。然后，在同一位置采集 5 个单脉冲光谱，每个样品采集 20 个位置，通过位移平台移动样品，使激光打到新的位置。本实验针对每个样品采集 100 个单脉冲光谱进行分析。

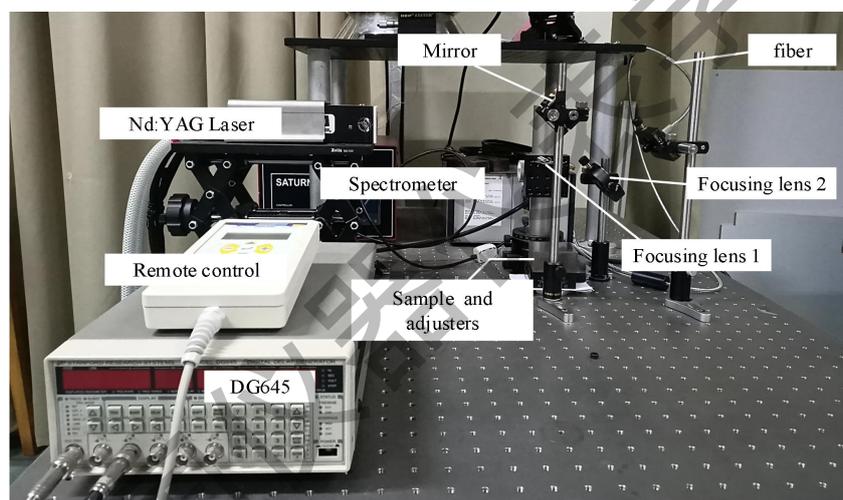


图 2 LIBS 光谱信号采集装置

样品数据来自 6 类生活中可回收的垃圾，共 80 种。它们分别是 12 种不同的纸张，包括书籍、纸盒等；31 种塑料包括塑料瓶、塑料梳、塑料盒等；9 种玻璃，包括饭盒、玻璃瓶等；12 种金属包括易拉罐、铜、铝、不锈钢等标准样品等；8 种纺织品包括服装帆布包、床单等；8 种木制品，包括废家具碎片、冰淇淋棒、木梳子等，每类样品数及其所占百分比如图 3 所示。

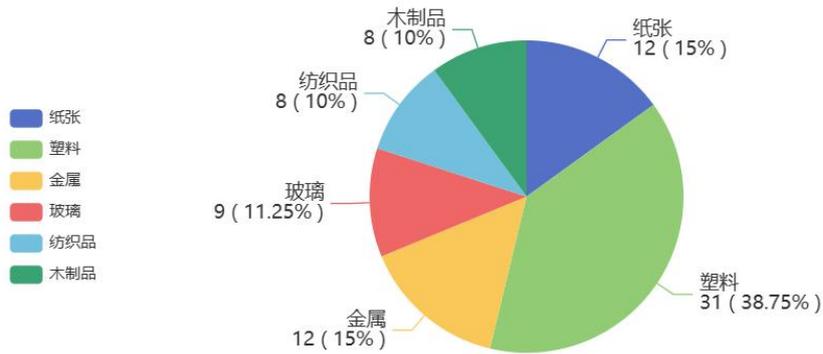


图3 可回收垃圾样本百分比

3.2.3 数据处理及分类模块

(1) 原始光谱数据预处理

LIBS 光谱采集过程中，不可避免的受仪器、能量、温度等实验条件波动的影响，使得光谱分析精度降低。常规方法为对同一个位置采集多次光谱求平均。为了使得最终的光谱样本能最大程度地反映原始光谱信息，减小光谱随机波动的影响，同时增大样本量，本文利用有放回随机平均化方法 (bootstrap) 对原始光谱数据进行预处理：每个样品从其 100 组光谱数据中随机抽取 5 组数据取均值作为该样品的一个待分析光谱数据，重复抽取 50 次，即每个样品有 50 个光谱数据。

全光谱积分面积的波动情况 (相对标准偏差, RSD) 作为衡量实验误差的标准, RSD 的值越小, 样本的光谱精度越高。对比分别利用常规平均预处理(Average)与 bootstrap 平均化后的 RSD, 如图 4, 利用 bootstrap 法处理后垃圾样品全谱积分面积的 RSD 明显减小。

(2) 数据特征提取

LIBS 光谱数据波长范围大, 原始光谱数据特征维度高 (4000×7250), 且含有大量的噪声和冗余信息, 若直接利用原始光谱数据会影响处理速度和分类判别的准确率。故在建立分类模型前需对输入的光谱数据进行特征提取, 特征提取后的数据需保留原始光谱数据的特征。常用的线性降维方法为主成分分析 PCA (principal component analysis) 和线性判别分析 LDA (linear discriminant analysis)。本作品采用这两种光谱特征提取方法提取光谱数据特征, 作为分类模型的输入。

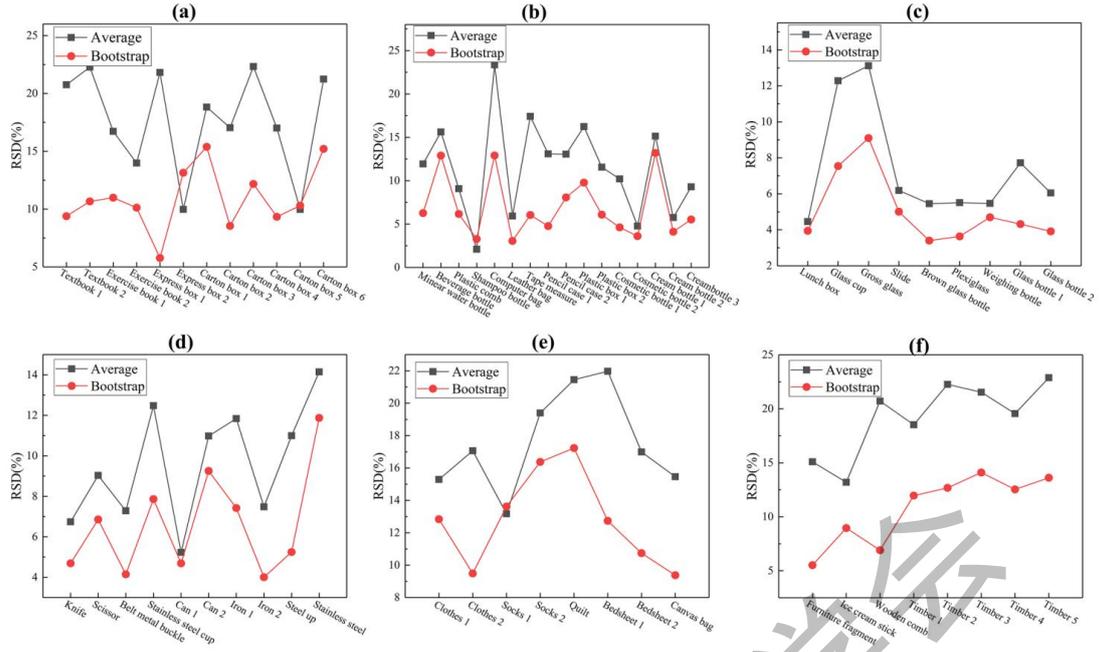


图 4 分别利用常规平均法和 bootstrap 法后全光谱积分面积的波动情况

PCA 采用特征分解方法提取光谱数据矩阵的主要成分来替换整个光谱数据矩阵，以消除数据的冗余性。LDA 与 PCA 相似，但它是一种有监督的降维方法，基于分类的思想对数据进行降维，使得不同类别的样本数据在降维后间距尽可能的大。LDA 算法利用样本集 X_i 的判别信息，构建同类数据的类内散度矩阵 S_w 和异类数据的类间散度矩阵 S_b ，分别表示同类样本和异类样本到投影点之间的距离，寻求一个最佳的投影方向 W_{opt} ，使异类数据的类间散度极大化、同类数据的类内散度极小化，实现样本最佳可区分性。

$$S_w = \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^{l_i} (x_j^i - x_i)(x_j^i - x_i)^T \quad (1)$$

$$S_b = \sum_{i=1}^L P(i)(x_j^i - \bar{x}_i)(x_j^i - \bar{x}_i)^T \quad (2)$$

$$W_{opt} = \arg \max_W \frac{Tr(W^T S_b W)}{Tr(W^T S_w W)} \quad (3)$$

其中 $P(i)$ 是第 i 类样本的先验概率；表示第 i 类的第 j 个样本， \bar{x}_i 是第 i 类的均值， L 代表类别个数， $W \in R^{d \times r}$ 代表投影矩阵。

Silhouette Score（轮廓系数），Calinski-Harabaz（CH 分数）和 Davies Bouldin（DBI 指数）能够衡量降维效果，其中轮廓系数评价不同降维方法对聚类效果的影响，取值范围为 $[-1, 1]$ ，同类样本越近，不同类样本越远，轮廓系数值越高，即数值越接近 1，降维分类效果越好；CH 分数为类间离散与类内离散的比率，CH 分数越高表明聚类效果越好，即类别间

样本协方差越大，类别内样本协方差越小；。DBI 分数为任意两类别的类内距离平均距离之和除以两聚类中心距离的最大值，DBI 分数越小表示类内距离越小同时类间距离越大，即聚类效果越好。三种评价指标公式分别如如式（4）~（6）：

$$S(i) = \frac{b(i) - a(i)}{\max\{a(i), b(i)\}} \quad (4)$$

$$S(k) = \frac{Tr(B_k)}{Tr(W_k)} \times \frac{N - k}{k - 1} \quad (5)$$

$$DBI = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^N \max_{j \neq i} \left(\frac{\bar{S}_i + \bar{S}_j}{\|w_i - w_j\|^2} \right) \quad (6)$$

其中， $S(i)$ 为轮廓系数， $a(i)$ 表示样本 i 到同类其他样本的平均距离， $b(i)$ 表示样本 i 到其他某类的所有样本的平均距离的最小值； $S(k)$ 表示 CH 分数， N 为数据集中的样本量， k 为即类别的个数， B_k 表示类别间离散矩阵，即不同类之间的协方差矩阵， W_k 表示类内离散矩阵，即一个类内数据的协方差矩阵，而 $Tr()$ 表示矩阵的迹； \bar{S}_i 、 \bar{S}_j 为类内数据到两类别质心的平均距离， $\|w_i - w_j\|^2$ 为两类别中心的距离。

（3）分类模型建立

光谱数据特征提取之后，基于随机森林（RF）和 BP 神经网络（BPNN）分别建立可回收垃圾分类模型。随机森林（RF）结合“Bootstrap aggregating”思想和“random subspace”方法，其实质是一个分类器包含多个决策树，每棵决策树处理一个训练样本子集，根据投票机制，所有决策树中投票数最多的分类结果为最终分类的结果。

误差反向传播(Back-Propagation, BP)神经网络是一种误差逆向传播的多层前馈网络。利用数据集不断对 BP 神经网络进行训练，使得网络中的权值和阈值达到最佳，网络误差达到最小。

准确率（ACC）、平均耗时、查准率（Precision）、查全率（Recall）、F-Measure 能够评估分类模型性能。准确率（ACC）是指所有正确分类样本的百分比，计算公式如式（7），可以评判所建分类模型预测能力；平均耗时衡量分类模型的分速率；查准率即精确度，是正确分类结果与所有实际分类结果的比值；查全率，也称召回率，即正确分类结果与应该正确分类结果的比值；F-Measure 是查准率与查全率的调和平均值。三项指标取值范围为 0~1，取值越接近于 1，说明分类模型性能越好，式（7）~（10）所示。

$$ACC = \frac{\sum_{i=1}^n T_i}{\sum_{i=1}^n T_i + \sum_{i=1}^n F_i} \quad (7)$$

$$Precision = \frac{TP}{TP + FP} \quad (8)$$

$$Recall = \frac{TP}{TP + FN} \quad (9)$$

$$F - Measure = \frac{2 \times Recall \times Precision}{Recall + Precision} \quad (10)$$

T_i 表示第 i 类数据中正确分类的数量， F_i 表示第 i 类数据中错误分类的数量。TP 为被考察标签被成功预测的数量，FP 为非被考察标签被预测为被考察标签的数量，FN 为被考察标签未命中的数量。

K 折交叉验证 (k-fold cross-validation) 用来评估分类模型的泛化能力，本文 K 取 10，将训练集分为 10 组，每个子集分别作为一次验证集，剩余的 9 组子集数据作为训练集，从而得到 10 个模型，具体过程如图 5。利用这 10 个模型的准确率、查准率、查全率和 F-Measure 来评估分类模型的预测能力。

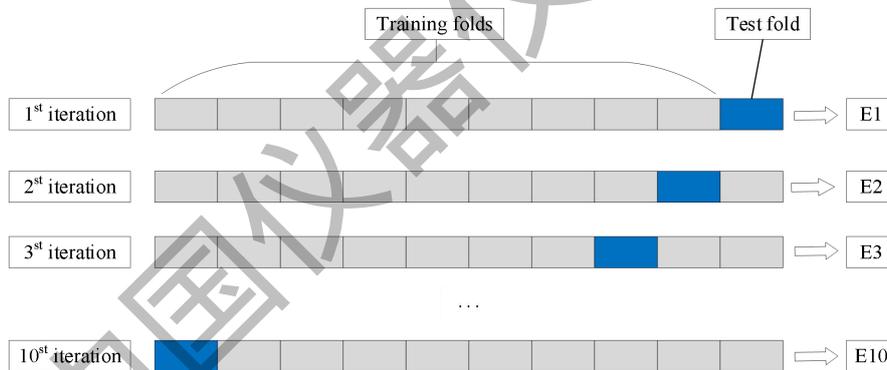


图 5 10 折交叉验证

3.2.4 人机交互与通讯模块

该部分旨在为操作员提供一个高度优化的界面，以实现垃圾识别和分类传感器系统的有效操作和数据传输。该模块的设计注重了用户体验的关键性，以确保操作员能够轻松、直观地与系统互动。以下是该模块的关键特点和功能的详细描述：

(1) 图形用户界面 (GUI)：我们采用了现代化的 GUI 技术，以确保用户界面既直观又具有高度可定制性。操作员通过该界面与系统进行交互，实时监控传感器状态、数据输入和处理过程。

(2) 光谱数据采集界面：通过接口连接到 AvaSoft 光谱仪，该界面负责接收、解析和显示

传感器采集的光谱数据。光谱数据以 Excel 格式存储，这种格式的选择是为了便于操作员查看和验证数据的完整性。

(3) 机器学习界面：在该界面中，操作员可以根据实际需求选择不同的光谱降维和机器学习算法的组合。此处采用 QT 与 MATLAB 的通信，以实现对各种分类模型的动态评估。这种方式使操作员能够在分类任务中选择最佳算法，并根据数据的特性进行参数调整。

(4) 算法选择界面：该界面允许操作员从已经评估过的最佳算法列表中进行选择。操作员可以根据分类任务的复杂性和数据特性选择适当的算法。这种灵活性有助于提高系统的分类性能。

(5) 计算结果界面：一旦算法被选定，系统将自动进行分类操作，并将分类结果清晰地呈现给操作员。对于特定材料（如金属或塑料）的识别，系统还能够进行亚分类，提供更详细的材料信息。

3.3 实验验证过程

3.3.1 光谱数据特征提取结果

主成分分析(PCA)对光谱数据的主成分进行提取，根据主成分的贡献率提取特征。PCA 的贡献率如图 6 所示。前 4 个主成分贡献率依此为 76.84%，10.64%，5.72%和 2.20%，前 3 个主成分累积贡献率为 93.20%，前 4 个主成分累积贡献率达到 95.40%，可认为含了原始光谱的有效信息。LDA 特征提取后数据的最大维数为 $k-1$ ，其中 k 为类别数。在我们的实验中有六类废弃样品，所以 LDA 对光谱数据的降维分别为 1、2、3、4、5 (1D-5D)。PCA 和 LDA 将废弃样品原始全光谱数据的维数降为三维(3D)和三维可视化图，如图 7(a)和 7(b)所示。在图 7(a)中，经过 PCA 处理后，纸张、塑料和玻璃的大部分样品都有明显的分离。金属、木材和玻璃在三维空间中相对接近，有一些重叠。纺织品样品与其他品类有重叠，无法区分。在图 7(b)中，经过 LDA 处理后，同一类别的样本紧密聚在一起，不同类别的样本分离明显。虽然塑料和纺织品在三维空间上是完全分离的，但它们是相对接近的。可以看出，大多数不同类别的样本在三维空间中都可以通过降维来区分。将降维光谱数据作为机器学习模型的输入，分类结果会更加准确。

计算 PCA 在 3D~8D 和 LDA 在 1D~5D 的评价指标 SCS、DBI 和 CHS，如表 1、表 2 所示。表 1 中原始光谱经 PCA 降至 3~8 维时，轮廓系数均为负，表明各类样品未全部区分开，随着维数的增加，CH 分数无明显变化，轮廓系数逐渐增大，DBI 指数缓慢减小，降至 6 维时，轮廓系数为-1.21，CH 分数和 DBI 指数均达到最优，分别为 499.656 和 1.895；6~8 维时，各项参数相接近变化不明显，认为 PCA 降维至 6~8 维时，聚类效果已较好。表 3

中，原始光谱经 LDA 降至 1 维时，虽然 CH 分数较高，但轮廓系数和 DBI 指数较差，分别为 0.273 和 1.494，说明此时聚类效果不好；2~4 维时，轮廓系数在 0.85 以上，表明各类样品大致区分开；4 维时，CH 分数，为 103420.051，比 3 维稍有下降，轮廓系数为 0.904，比 3 维增加，接近 1；DBI 指数比 3 维下降，综合考虑，LDA 降维至 4 维时，表现出最好的聚类效果。对比 PCA 和 LDA 降维后聚类效果的三项参数，LDA 降至 2~4 维时聚类效果明显优于 PCA 降至 3~8 维时的聚类效果。

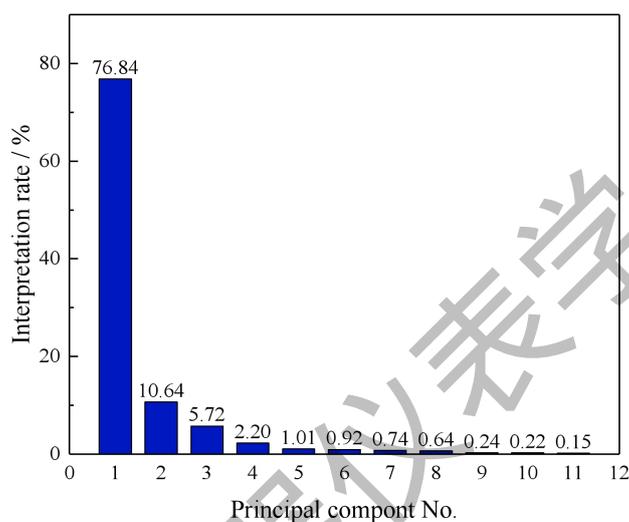


图 6 前 10 个主成分贡献率

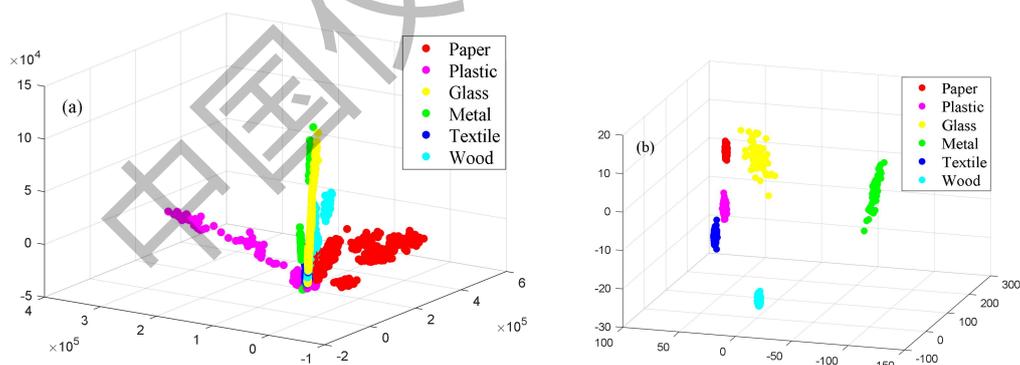


图 7 (a) PCA 降维结果；(b) LDA 降维结果

表 1 PCA 降至 3~8 维时聚类效果

维数	Silhouette Coefficient	Calinski-Harbasz	Davies-Boulding
3	-0.163	523.745	2.596
4	-0.156	505.005	2.644

5	-0.142	497.285	2.693
6	-0.121	499.656	1.895
7	-0.120	496.857	1.907
8	-0.118	492.901	1.933

表 2 LDA 降至 1~5 维时聚类效果

维数	Silhouette Coefficient	Calinski-Harbasz	Davies-Boulding
1	0.273	303346.124	1.494
2	0.850	178714.806	0.196
3	0.868	130601.163	0.205
4	0.904	103420.051	0.135

3.3.2 分类模型预测结果

LIBS 光谱经 PCA、LDA 降维后作为分类模型的输入变量，按 8: 2 随机分为训练集和测试集，其中 PCA 降维后的数据取 4~8 维，LDA 降维后的数据取 2~4 维，输出为 6 类可回收垃圾，利用 RF 和 BPNN 建立分类模型。

影响随机森林分类性能的参数主要有决策树数目、每个决策树选择的特征数和树的深度，每棵决策树随机选择的特征数为输入变量个数的二次方根，且每棵决策树不做剪枝。本文通过调整决策树的数量，优化随机森林分类模型的预测性能，理论上决策树棵树越多，预测性能越好，但建模时间则越久。决策树数目对决策性能的影响如图 8 所示，图 8(a)为 PCA 降至 3~8 维数据作为输入变量时模型（决策树数目设置为 5, 10, ..., 100）预测性能，由图可见，随着决策树数目增加，模型性能增加，4 维、6 维和 8 维时会有短暂减小，然后再增加，决策树数目达到 50 时，RF 模型分类准确率趋于稳定，故将随机森林决策树数量设为 50；同时还可以看出，PCA 降至 7 维 作为 RF 模型的输入时，预测准确率最高为 99.8%；图 8(b)为 LDA 降至 2~4 维数据作为 RF 输入时模型预测性能（决策树数目设置为 2, 4, ..., 20），可见基于 2~4 维的输入数据，决策树数目达到 4 时，RF 预测准确率均可以达到 100%，并且趋于稳定，因此为减小建模时间，提高模型的泛化能力，将决策树设置 10 棵。

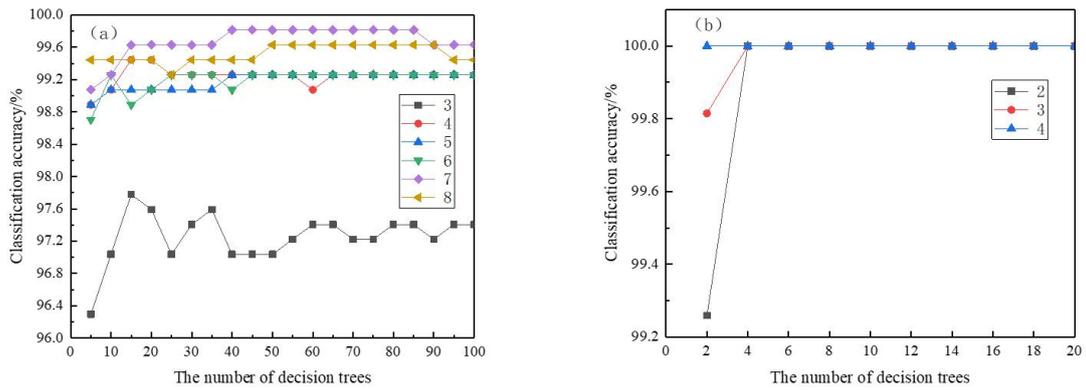


图8 决策树棵树对分类准确率的影响, (a) PCA降维后3~8维作为RF输入; (b) LDA降维后2~4维作为RF输入

BP神经网络模型包含输入层、隐含层和输出层三层结构, 隐含层包含10个神经元, 输出层包含5个神经元, 隐含层激活函数为tansig, 训练函数为trainscg, 迭代次数最大为10000次, 训练目标误差最小为0.01, 学习速率为0.1。通过训练集对网络进行训练, 直到神经网络收敛, 再利用训练好的神经网络模型对预测集进行分类。图9(a)、(b)为原始光谱经PCA降至3~8维数据、LDA降至2~4维数据作为BPNN模型的输入时模型训练步数与精度, 图9(a)中, 随着输入变量维数的增多, 模型收敛时精度逐渐提升, 8维时, 模型训练至84000步时开始收敛, 此时精度为0.011, 与实际设置的误差接近; 图9(b)中, 随着输入维数的增多, 模型MSE达到实际误差时所需训练步数越少, 4维时, 模型训练43步MSE即达到目标误差, 此时精度为0.0095; 对比PCA降至8维、LDA降至4维分别作为BPNN的输入时模型性能, 后者作为输入时模型预测精度更高, 训练时间更少。

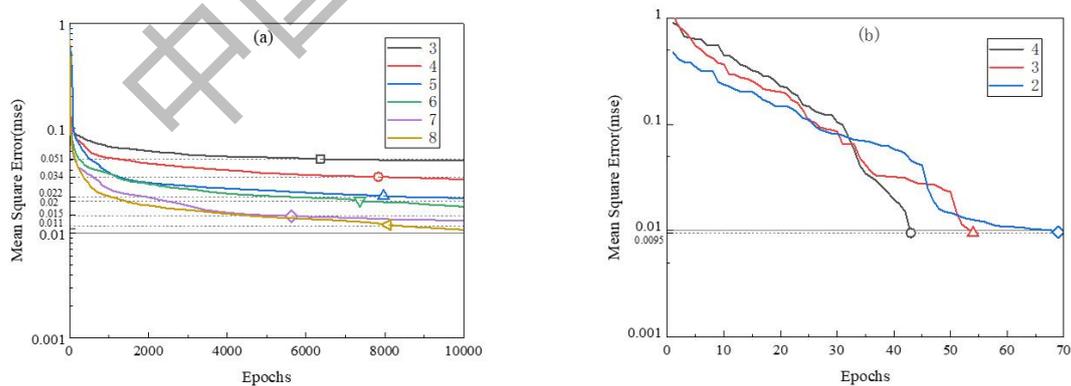


图9 BPNN训练步数, (a)PCA降至3~8维数据作为BPNN输入; (b)LDA降至2~4维数据作为BPNN输入

基于上述结果, 分别以3D-8D PCA和2D-4D LDA的降维谱作为RF和BPNN模型的输入变量, 以可回收垃圾的类别作为输出。使我们建立了4个分类模型:PCA + RF、PCA +

BPNN、LDA + RF 和 LDA + BPNN。对训练集进行训练建模，利用预测集进行分类准确率验证，预测结果分别如表 3、表 4 所示，表中判别准确率和平均耗时为输入变量维数不变时，将数据按 8: 2 随机分为训练集和测试集，共进行 5 次分类预测，取这 5 次训练集准确度和测试集准确度的均值作为结果。

利用 PCA 降维后光谱作为机器学习模型输入的分类结果如表 3 所示，PCA+RF 模型随着 PCA 维数的增加，训练集回代准确率在 4 维时达到 100%，预测集准确率逐渐上升，当输入变量维数为 8 时，预测准确率达到最高为 99.59%，此时耗时时间也最少，为 0.14s；PCA+BPNN 模型随着维数的增加，训练集与测试集的准确率逐渐增大，但都略低于 PCA+RF 模型，当维数为 8 时，测试集判别准确率达到最好为 98.42%，此时分类耗时时间为 30.44s。总之，两种模型随着输入变量维数的增大，预测准确率逐渐上升，耗时时间逐渐减少。

表 3 PCA+RF、PCA+BPNN 分类结果

方法	PCA+RF			PCA+BPNN		
	训练集	预测集	平均耗时	训练集	预测集	平均耗时
维数	ACC/%	ACC/%	/s	ACC/%	ACC/%	/s
3	99.69	97.22	0.18	86.20	85.43	34.68
4	100.00	99.04	0.17	94.18	94.20	34.42
5	100.00	99.30	0.16	96.29	95.86	34.21
6	100.00	99.33	0.17	96.87	96.85	34.16
7	100.00	99.37	0.16	97.93	98.21	32.70
8	100.00	99.59	0.14	98.30	98.42	30.44

表 4 LDA+RF、LDA+BPNN 分类结果

方法	LDA+RF			LDA+BPNN		
	训练集	预测集	平均耗时	训练集	预测集	平均耗时
维数	ACC/%	ACC/%	时/s	ACC/%	ACC/%	时/s
2	100.00	100.00	0.04	99.77	99.82	1.21
3	100.00	100.00	0.04	99.86	99.88	1.11
4	100.00	100.00	0.04	100.00	100.00	0.80

利用 10 折交叉验证研究输入变量维数为 8 时，PCA+RF 和 PCA+BPNN 模型的准确率、查准率、查全率、F-Measure 等参数，计算结果分别见表 5、表 6，结果表明，PCA+BPNN

查准率平均值为 0.981，查全率平均值为 0.984，F-Measure 指数平均值为 0.981，平均准确率为 98.286%，PCA+RF 的查全率、查准率和 F-Measure 指数平均值均为 0.989，而平均准确率达到 99.115%。PCA+RF 的准确率、查准率、查全率、F-Measure 均优于 PCA+BPNN；并且从图中可以看出，PCA+RF 的准确率、查准率等 4 项参数在 10 次交叉验证下，数据波动更小，更稳定，说明 PCA+RF 模型预测性能更好。

表 5 PCA+RF 预测结果

Test number	Precision	Recall	F-Measure	Accauracy/%
1	0.993	0.992	0.993	99.512
2	0.986	0.991	0.988	98.605
3	0.994	0.994	0.994	99.020
4	0.985	0.988	0.986	99.074
5	0.983	0.982	0.982	98.529
6	0.995	0.992	0.993	99.545
7	0.990	0.983	0.986	99.020
8	0.989	0.989	0.989	99.103
9	0.984	0.984	0.984	99.187
10	0.994	0.994	0.994	99.552
Average Value	0.989	0.989	0.989	99.115

表 6 PCA+BPNN 预测结果

Test number	Precision	Recall	F-Measure	Accauracy/%
1	0.994	0.994	0.994	99.487
2	0.962	0.960	0.958	95.814
3	0.988	0.988	0.987	98.598
4	0.982	0.984	0.983	98.462
5	0.988	0.988	0.988	98.643
6	0.981	0.988	0.984	98.760
7	0.959	0.981	0.967	96.774
8	0.984	0.982	0.983	98.673
9	0.985	0.986	0.985	98.374

10	0.985	0.985	0.985	99.091
Average Value	0.981	0.984	0.981	98.268

将 LDA 降至 2~4 维时的数据分别作为 RF 和 BPNN 的输入时,预测结果如表 7, LDA+RF 模型的训练集和预测集准确率均可达到 100%; LDA+BPNN 模型随着输入维数从 2 维增加到 4 维, 预测集准确率从 99.82%逐渐上升到 100%。当维数为 4 时, 两个模型的训练集与测试集判别准确率均可达到 100%, 此时利用 10 折交叉验证, 两个模型的准确率平均值为 100%, 查准率、查全率和 F-Measure 均为 1。由表 7 可知, LDA+RF 分类时间不超过 1s, 综合分析 LDA+RF 模型分类效果更好。

表 7 LDA+RF、LDA+BPNN 分类结果

方法	LDA+RF			LDA+BPNN		
	训练集	预测集	平均耗	训练集	预测集	平均耗
维数	ACC/%	ACC/%	时/s	ACC/%	ACC/%	时/s
2	100.00	100.00	0.04	99.77	99.82	1.21
3	100.00	100.00	0.04	99.86	99.88	1.11
4	100.00	100.00	0.04	100.00	100.00	0.80

以上分析可见, 将原始 LIBS 光谱经 PCA 降维后 8 维数据、LDA 降维后 4 维数据分别作为 RF、BPNN 模型的输入变量时, PCA+RF、PCA+BPNN、LDA+RF 和 LDA+BPNN 四种模型分类准确率均在 98%以上, 其中由 RF 建立的分类模型分类效果较好, PCA+RF 预测集准确率为 99.59%, 分类时间为 0.14s; LDA+RF 预测集准确率为 100%, 分类时间为 0.04s, LDA+RF 模型分类效果更好。

采用上述方法, 可将同一类别的垃圾样本进一步分类回收再利用。在回收行业中, 废旧金属通常分为钢、铝合金、铜和不锈钢, 然后放入不同的生产程序进行再加工和再利用。对于金属的 LIBS 光谱, 不同的金属样品有其独特的特征光谱。例如不锈钢含有镍(Ni)的特征谱, 而罐头含有铝(Al)的特征谱。我们使用 PCA(8D) + RF, 通过 PCA(8D) + BPNN、LDA(4D) + RF、LDA(4D) + BPNN, 将实验中的 10 个金属样本细分为铁、不锈钢、铜、铝 4 类。金属的亚分类结果如表 8 所示, 四种模型分类精度均在 93%以上。PCA 组合模型的亚分类效果优于 LDA 组合模型。我们认为主成分分析更适合于降低金属 LIBS 光谱的尺寸。PCA(8D) + RF、PCA(8D) + BPNN 的结果相似, 其中 PCA(8D) + RF 分类准确率最高, 达到 98.77%, 精密度、召回率和 F-measure 分别为 0.9892、0.9863 和 0.9871。

表 8 金属亚分类各分类模型结果

Test number	AR	Precision	Recall	F-measure
PCA(8D)+RF	98.77	0.9892	0.9863	0.9871
PCA(8D)+BPNN	98.70	0.9870	0.9882	0.9868
LDA(4D)+RF	93.10	0.9627	0.9389	0.9434
LDA(4D)+BPNN	96.19	0.9493	0.9520	0.9465

我们使用 PCA(8D) + RF 、 PCA(8D) + BPNN 、 LDA(4D) + RF 、 LDA(4D) + BPNN 模型将塑料细分为六大类:PVC、POM、ABS、PA、PE 和 PTFE。塑料的亚分类结果如表 9 所示，模型准确率均在 98%以上。PCA(8D) + RF 的分类准确率最高为 99.52%，准确率、召回率和 F 测度分别为 0.9967、0.9910 和 0.9937。

表 9 塑料亚分类各模型分类结果

Test number	AR	Precision	Recall	F-measure
PCA(8D)+RF	99.52	0.9967	0.9910	0.9937
PCA(8D)+BPNN	98.61	0.9762	0.9799	0.9844
LDA(4D)+RF	98.30	0.9889	0.9815	0.9857
LDA(4D)+BPNN	98.25	0.9913	0.9870	0.9885