

非均相复杂固体光谱测量分类识别技术研究

袁静^{1,2}, 周兴林¹, 朱攀¹

(1.武汉科技大学机械自动化学院, 湖北 武汉 430081; 2.湖北工程学院机械工程学院, 湖北 孝感 432000)

摘要: 非均相复杂固体材料在光谱测量的时候, 因样本细观结构空间分布不均匀及微观成分分布不均匀而产生的光谱不确定性, 必然会降低模型预测结果的准确性和稳健性, 如何在少样本的前提下, 提高非均相复杂固体的分类识别准确率具有重要的研究价值。本文以沥青混合料马歇尔试件为光谱测量对象, 创新性的使用一款便携式的近红外光谱仪对4类不同老化状态的沥青混合料进行原位无损光谱数据采集; 将264个原始光谱数据先取对数然后再使用Savitzky-Golay滤波器进行平滑除噪, 并建立随机森林分类识别模型; 四类不同老化状态的沥青混合料的分类识别率依次是88%、87%、80%和100%。研究表明, 便携式的近红外光谱由于大光斑测量在一定程度上改善了非均相复杂固体材料的光谱不确定性, 可用于非均相复杂固体材料的原位无损测量。

关键词: 非均相; 近红外; 随机森林; 分类识别

Research on Classification and recognition of heterogeneous complex solids by spectral measurement

YUAN Jing^{1,2}, ZHOU Xinglin¹, ZHU Pan¹

(1.College of Mechanical Automation, Wuhan University of Science and Technology, Wuhan 430081, China; 2. College of Mechanical Engineering, Hubei Engineering University, Xiaogan 432000, China)

Abstract: During the spectral measurement of heterogeneous complex solid materials, the spectral uncertainty caused by the uneven distribution of sample both in mesostructure and microstructure will inevitably reduce the accuracy and robustness of model prediction results. Therefore, how to improve the classification and recognition accuracy of heterogeneous complex solid under the premise of fewer samples has important research value. In this paper, a portable near infrared spectrometer was used to collect in situ nondestructive spectral data of four kinds of asphalt mixtures with different aging states. The logarithm of 268 original spectral data was first taken and then the Savitzky-Golay filter was used for smooth and de-noising, and the random forest classification recognition model was established. The classification and recognition rates of four kinds of asphalt mixtures with different aging states are 88%, 87%, 80% and 100% respectively. The results show that portable near infrared spectroscopy can improve

the spectral uncertainty of heterogeneous complex solid materials to some extent because of the large spot measurement, and can be used in situ nondestructive measurement of heterogeneous complex solid materials.

Keywords: Heterogeneous; Near infrared; Random forest; Classification recognition

1 研究背景

光谱测量技术作为一种快速的检测技术被认为是最有前景的物质技术之一^[1], 光谱测量方法是近年来比较常用针对有机物(食品、农产品、石油制品等)的鉴别方法, 快速和非破坏性光学测量技术, 包括紫外和可见光(UV/Vis)、近红外(NIR)、红外、拉曼和荧光光谱^[2]。近些年, 近红外光谱分析技术由于可直接对固体、液体和气体等各种复杂混合物进行定性、定量分析, 在科学研究和实际的工农业生产中发挥着越来越重要的作用^[3]。由于复杂体系的光谱信号谱峰严重重叠, 且非均匀物质同一样品试件不同点位原位测量的光谱差异性大, 往往需要采用针对性的化学计量学手段才能进行定性、定量分析^[4]。沥青混合料作为一种非均匀复杂体系, 既包含有机高分子混合材料又包含无机材料, 组分多结构复杂, 空间分布不均, 表面形貌多样且含有杂质成分, 各组分的不同官能团特征谱带之间有严重重叠, 难以直接将比尔定律用于光谱定量分析, 这是沥青混合料老化定性、定量光谱检测的难点之一^[5]。

2 研究内容

2.1 仪器与试剂

SCiO 便携式近红外光谱仪(Consumer Physics 公司); 101-3A 电热恒温鼓风干燥箱(上海路达实验仪器有限公司); 沥青混合料马歇尔试件所用沥青为 GS-70 基质沥青, AC10 密集配, 马歇尔试件成型击实次数上下各 50 次。

2.2 样品制备

本实验所用四种老化程度的沥青混合料马歇尔试件, 老化时长分别为 0 小时(热拌后立即成型-未老化)、4 小时(热拌后 135℃老化 4 小时成型-短期老化)、44h(短期老化后再进行 85℃老化 44h-长期老化)和 68h(短期老化后再进行 85℃老化 44h-长期老化), 4 种不同老化程度的沥青混合料马歇尔试件依次记为 L0、L4、L44 和 L68。

2.3 光谱采集

使用 SCiO 便携式近红外光谱仪进行原位测量, 采用特制的测量辅具如图 1 白色部分所示, 以保证针对同一个沥青混合料试件测量的点位不重复, 且测量点位分布均匀。针对一个沥青混合料马歇尔试件, 使用测量辅具可以测量 6 个不同点位的光谱。L0 和 L4 分别采集了 72 个光谱, L44 和 L68 分别采集了 60 个光

谱，共计 264 个光谱。



图 1 原位无损测量

Fig.1 In situ nondestructive measurement

2.4 数据处理

数据处理在 Scio 自带的软件平台上进行处理，首先使用 \log 进行吸光度转换，得到反射率光谱，然后分别采用平台自带的多种预处理方法，通过比较分类模型的识别率最终优选 Savitzky-Golay 滤波器进行光谱预处理，其中 Savitzky-Golay 滤波器设置为二次多项式，一阶导数，窗口点数为 35；最后采用随机森林建立分类模型，分类结果如下图 2 所示。

Classified \ Actual Class	L88	L44	L4	L0
L88	100%	0%	0%	0%
L44	0%	100%	0%	0%
L4	0%	0%	100%	0%
L0	0%	0%	0%	100%

图 2 4 种沥青混合料分类识别结果

Fig.2 Classification results of four kinds of asphalt mixture

3 结论

本文提出的便携式近红外光谱仪直接用于非均相复杂固体的测量，不用制样，不破坏样品，由于大光斑测量在一定程度上改善了非均相复杂固体材料的光谱不确定性，对在线无损原位测量具有很好的实际应用价值；本文提出的光谱预处理方法，能够很好的去除光谱噪声还有杂质的干扰，使便携式红外光谱仪能够直接用于不同老化程度的沥青混合料的分类识别；建立的随机森林分类模型可以很好的用于不同老化状态的沥青混合料的分类识别。如何在增加样本数量的前提下，降低背景干扰和样本差异带来的测量误差，还需要针对性的发展新型的化学计量学方法进一步提高模型的分类识别率；此外，复杂体系的光谱谱峰重叠将对定量分析时提取目标组分光谱信息产生严重的影响，需要进一步的深入研究。

参考文献

- [1] Zofka A , Chrysochoou M , Shaw M , et al. Evaluating Applications of Field Spectroscopy Devices to Fingerprint Commonly Used Construction Materials. Sharp Report (2013), pp.6-8.
- [2] Bogomolov A. Developing Multisensory Approach to the Optical Spectral Analysis. Sensors, 2021, 21(10): 3541.
- [3] 霍学松, 陈瀑, 戴嘉伟等. 微小型近红外光谱仪的应用进展与展望[J]. 分析测试学报, 2022, 41(09): 1301-1313.
- [4] 韩汐. 基于数据驱动的复杂体系光谱检测新方法及应用研究[D]. 天津大学, 2017.
- [5] 郭猛, 任鑫, 焦峪波等. 沥青及沥青混合料老化与抗老化研究综述[J]. 中国公路学报, 2022, 35(04): 41-59.

中国仪器仪表表学