

基于 GA - BP 神经网络的塑料 X 射线 吸收光谱的辨识

方正, 王仁彬, 陈思媛

(厦门大学 航空航天学院 福建 厦门 361101)

摘要: 采集 15 种塑料样本的 X 射线吸收光谱 (XAS), 对光谱数据进行预处理和主成分分析, 建立误差反向传播 (BP) 神经网络和遗传算法优化的误差反向传播 (GA-BP) 神经网络模型, 利用训练集进行网络训练, 并通过测试集进行验证。结果表明, GA-BP 神经网络相比于 BP 神经网络可以更好更稳定的对塑料样本的 XAS 进行识别, 这对塑料的回收具有重要的指导意义。

关键词: 塑料分类; X 射线吸收光谱; 主成分分析; 神经网络; 遗传算法

中图分类号: TQ 034; TQ 320.77; O 657.3 文献标识码: B 文章编号: 1671 - 3206(2019) 01 - 0238 - 04

DOI:10.16581/j.cnki.issn1671-3206.20181101.014

Identification of X-ray absorption spectroscopy of plastics based on GA-BP neural network

FANG Zheng, WANG Ren-bin, CHEN Si-yuan

(School of Aerospace Engineering, Xiamen University, Xiamen 361101, China)

Abstract: This paper collects the X-ray absorption spectra of 15 kinds of plastic samples, carries on the data preprocessing, and then extracts principal component as the input of the subsequent model. The back propagation (BP) neural network model is established by using the training set to modify the weights and threshold values of network and obtains corresponding model. Finally, the neural network model is optimized by genetic algorithm, the optimal matrix of weights and threshold values are obtained. The experimental results show that BP neural network based on genetic algorithm optimization (GA-BP) can identify X-ray absorption spectra of plastic samples better and more stable than BP neural network, which has important guiding significance for the recycling of plastic.

Key words: plastic classification; X-ray absorption spectroscopy; principal component analysis; neural network model; genetic algorithm

目前对废旧塑料的回收常常是很多种类混合在一起, 而混合塑料难以满足再生产需求^[1]。因此, 对废旧塑料进行识别分类, 有利于实现资源再利用, 并解决废旧塑料污染问题^[2-3]。

传统的塑料识别方法分为物理识别法和化学鉴别法。物理识别法准确度较差, 化学鉴别法操作复杂, 且易造成污染^[4]。新兴的塑料识别方法为光谱分析法, 包括近红外光谱、荧光光谱、激光诱导击穿光谱等^[5-10]。X 射线吸收光谱由于其谱线简单、分

析含量范围广、灵敏度及准确度高的特点, 在环保、催化、医学和药学等领域均获得发展^[11-12]。

本文采集了多种常见塑料及工程塑料样本的 X 射线吸收光谱, 并结合主成分分析和基于遗传算法优化的误差反向传播 (GA-BP) 神经网络实现对塑料的自动分类识别。

1 实验部分

1.1 材料与仪器

15 种常见塑料和工程塑料, 见表 1。样本为直

收稿日期: 2018-04-20 修改稿日期: 2018-06-16

基金项目: 国家自然科学基金项目 (61571381)

作者简介: 方正 (1976 -), 男, 湖北武汉人, 教授, 博士, 主要从事 X 射线检测及光谱分析方面的研究。电话: 0592 - 2183216, E-mail: fangzheng@xmu.edu.cn

通讯联系人: 陈思媛, 工程师, 硕士, 主要从事科学仪器方向的研究。E-mail: chensiyuan@xmu.edu.cn

径 30 mm、长度 50 mm 的圆柱体。

X 射线光谱检测系统^[13], 自建, 主要组成为 X 射线管、CdTe 探测器、高压电源等基本元件, 其整体结构见图 1; KYW800 型 X 射线管(阳极靶材料为钨(⁷⁴W)); X-123 型 CdTe 探测器(能量分辨率为 850 eV(FWHM) @ 122 keV, ⁵⁷Co); XRB 100 W 高压电源(工控主机 IPC-610 机型)。实验相关的参数设置: X 射线管电压 60 kV, 管电流 10 μA, 灯丝电流 1 000 mA, 探测器通道数设置为 512, 采集时间 60 s。

表 1 15 种常见塑料和工程塑料的编号与名称
Table 1 The number and name of the 15 kinds of common plastics and engineering plastics

| 编号 | 名称 | 编号 | 名称 | 编号 | 名称 |
|----|-----|----|------|----|------|
| 1 | ABS | 6 | PET | 11 | PSU |
| 2 | PA6 | 7 | PMMA | 12 | PTFE |
| 3 | PBT | 8 | POM | 13 | PU |
| 4 | PC | 9 | PP | 14 | PVC |
| 5 | PE | 10 | PPR | 15 | PVDF |

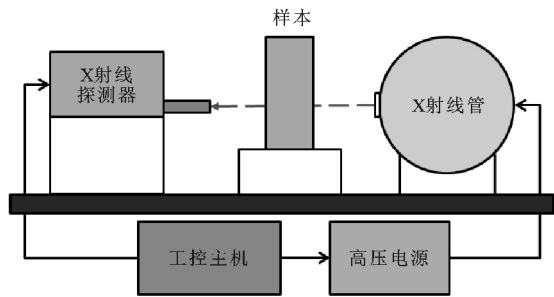


图 1 X 射线吸收光谱仪示意图

Fig. 1 Schematic diagram of X-ray absorption spectrometer

1.2 实验方法

X 射线吸收光谱(XAS)的产生原理是 X 射线穿过一定厚度的物质时,会发生散射和吸收现象,从而使得光谱的强度减弱,具体减弱的程度是由所含原子的种类和数目即物质的性质所决定。其穿过样本前后的强度变化情况满足下式^[14]:

$$I = I_0 e^{-\mu d} \quad (1)$$

其中 I_0 表示 X 射线入射光谱的强度, I 表示 X 射线出射光谱的强度,由 X 射线探测器直接采集得到, μ 表示吸收系数, d 为样品厚度。

X 射线吸收光谱即指在不同能量 X 射线下的吸收系数的变化趋势,由式(1)可得 X 射线吸收光谱的计算公式:

$$\mu = \frac{1}{d} \ln \frac{I_0}{I} \quad (2)$$

因此在实验过程中,首先在不放置样本的情况下采集 X 射线管的发射光谱,即 X 射线入射光谱。然后将样本放置在 X 射线管与探测器中间,采集得

到 X 射线出射光谱。通过公式(2)的计算便得到对应 X 射线吸收光谱,对每种样本采集 100 组数据。每次采集过程中样本被 X 射线穿透的位置都不相同。

对计算得到的 X 射线吸收光谱进行 0-1 归一化处理。0-1 归一化处理作为一种常见的数据处理方法,可以消除仪器误差,并可以使神经网络算法更快的运行。

2 结果与讨论

2.1 光谱展示

X 射线探测器采集到的谱线经过预处理之后的光谱见图 2,图中横坐标为 X 射线能量,纵坐标为 X 射线吸收系数。图中 8~12 keV 内的三个波峰皆是由于 X 射线管阳极靶材料的特征 X 射线被样本吸收引起,三个波峰的能量值分别为 8.396, 11.333, 13.111 keV。

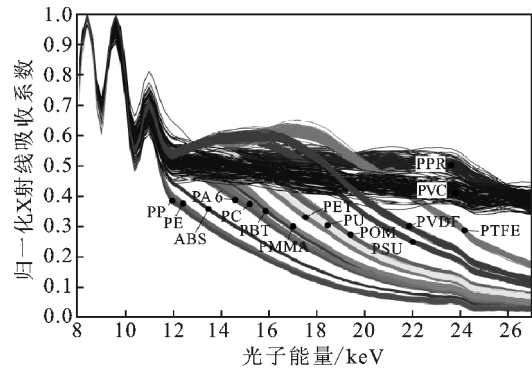


图 2 预处理后的各样本 X 射线吸收光谱

Fig. 2 X-ray absorption spectra of samples after pretreatment

由图 2 可知,塑料样品的光谱之间的差异明显,对于 PPR、PVC、PTFE、PVDF、PSU、ABS 这 6 种塑料样品,可以比较明显的和其它样品区分。对于另外 9 种塑料,则无法直接准确的识别。

2.2 特征提取

主成分分析(PCA)是一种常见的降低信息维度的方法,可以将多个变量进行线性变换从而提取特征向量,也就是将具有一定相关性的多个向量重新组合,构成一组线性无关的特征向量,且这组特征向量可以尽可能地保留原始变量的信息,成为新的综合指标作为后续神经网络模型的输入^[15-16]。因此采用 PCA 方法提取塑料样品光谱的特征。

首先对图 2 中的光谱进行 PCA 计算,得到的各主成分的贡献率见表 2,其中前三个主成分的贡献率累计达到 99.38%,可以代表原光谱绝大部分的信息。因此采用这三个主成分作为特征向量代替原有的光谱数据作为后续神经网络模型的输入。

表 2 利用 PCA 提取特征后各主成分的贡献率
Table 2 Contribution of principal components obtained by using PCA to extract features

| 主成分 | 贡献率/% |
|-----|-------|
| 1 | 83.58 |
| 2 | 14.02 |
| 3 | 1.78 |
| 4 | 0.33 |
| 5 | 0.16 |
| 6 | 0.05 |

2.3 基于 BP 神经网络的特征识别

误差反向传播 (BP) 神经网络是由一层输入层、一层或多层隐含层、一层输出层构成的一种典型的多层前向型神经网络。BP 神经网络模拟人脑神经网络,具有生物神经系统的基本特征,具有非线性映射能力、自学习、学习速度快、分类精度高等优点^[17]。因此首先采用 BP 神经网络塑料样品光谱的特征进行识别。

BP 神经网络结构设置为 3-8-15-12-1 三隐含层的结构,输入层神经元个数为 3,输出层神经元个数为 1,三个隐含层的神经元个数分别为 8、15、12。神经网络中的每个神经元都有 N 个权值参数 (N 为上一层神经元的个数) 和 1 个阈值参数,权值和阈值皆采用随机初始化。实验共采集 15 种塑料的 1 500 组数据,其中 1 200 组为训练集,作为网络的训练,另外 300 组作为测试集,用于对模型准确率进行校验。在 1 200 组训练集中,有 20 组作为验证集用于模型训练过程中的模型评估。因为神经网络的

初始权值和初始阈值是随机产生的,为避免该随机因素导致的误差,本实验进行 10 次分类测试,并对网络的初始权值、初始阈值和分类正确率进行记录,分类正确率见图 3。

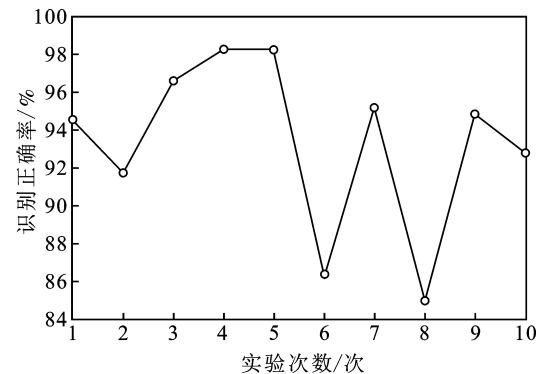


图 3 利用 BP 神经网络进行塑料分类的正确率
Fig. 3 Accuracy of plastic classification using BP neural network

由图 3 可知,由于 BP 神经网络的随机性,导致训练可能收敛于局部极小值,从而分类正确率的波动较大,最高达到 98.29%,最低达到 84.98%,稳定性较差。

2.4 基于 GA-BP 神经网络的光谱识别

为了解决 BP 神经网络存在的识别稳定性较差的问题,本实验将利用遗传算法 (GA) 对 BP 神经网络的权值和阈值进行选择、交叉和变异并代入原网络中,建立基于遗传算法优化的误差反向传播 (GA-BP) 神经网络模型,提高分类准确性。遗传算法的基本步骤见图 4,过程主要包括编码、适应度函数的计算、选择、交叉和变异^[18]。

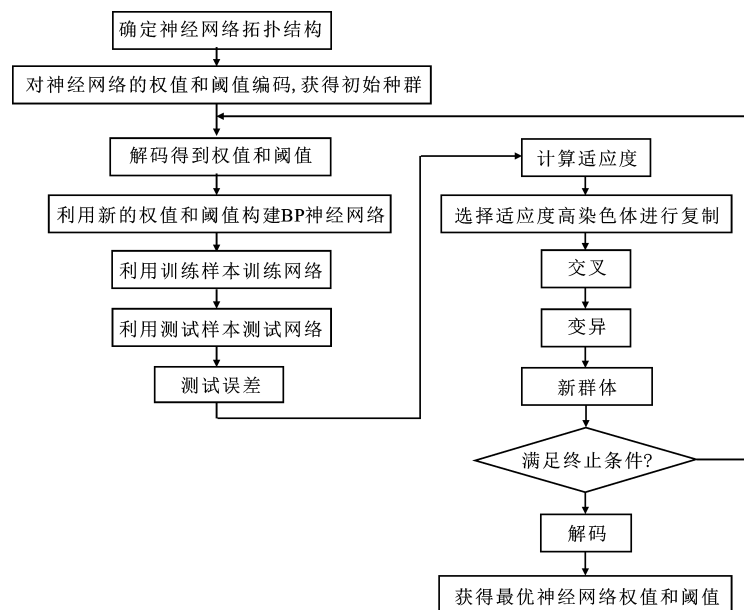


图 4 遗传算法优化 BP 神经网络的步骤

Fig. 4 The step of using genetic algorithm to optimize BP neural network

在上述设置的 BP 神经网络结构中,权值和阈值的个数总数为 372 个,因此使用遗传算法对这 372 个参数的初始值进行优化。遗传算法的参数设

置见表 3。

在保持同上述 10 次分类时网络结构与初始权值和初始阈值相同的情况下,再利用 GA-BP 神经网

络进行 10 次分类识别计算, 计算结果见图 5。

表 3 优化过程中遗传算法的参数设置
Table 3 Parameters setting of genetic algorithm in optimization process

| 种群大小 | 最大遗传代数 | 编码位数 | 交叉遗传概率 | 变异概率 | 代沟 |
|------|--------|------|--------|------|------|
| 40 | 50 | 10 | 0.7 | 0.01 | 0.95 |

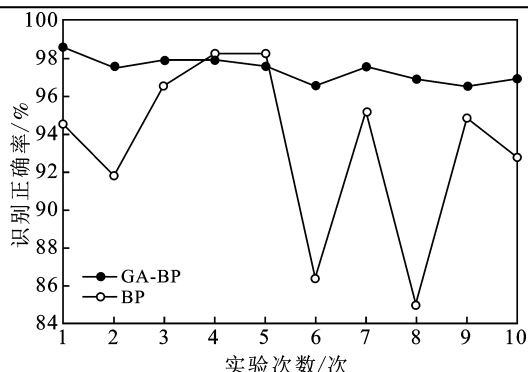


图 5 利用 BP 和 GA-BP 神经网络进行塑料分类的正确率对比图

Fig. 5 Comparison of accuracies of plastic classification by using BP and GA-BP neural networks

由图 5 可知, 优化后的 GA-BP 神经网络分类正确率基本保持在 95% 以上, 且无明显波动, 可更好地实现样本分类。结果表明 GA-BP 神经网络收敛性较好, 具有更加稳定的性能, 可更好地应用于塑料样本的分类识别中。

目前实验的缺陷在于所选用的样本均为标准的均匀材质的塑料, 没有对混合型塑料进行实验。因此在后续的实验中, 计划针对混合塑料样本使用计算机断层扫描(CT)的方法^[19]对光谱进行重建, 以达到更加全面的塑料分类效果。

3 结论

针对包括 ABS、PA6、PE、PVDF 等共 15 种塑料的 X 射线吸收光谱建立自动识别方法。利用 X 射线吸收光谱无损检测装置对 15 种塑料样本的 X 射线吸收光谱进行采集。然后对光谱数据进行预处理、主成分分析计算, 提取原始光谱数据的 3 个特征, 并分别利用 BP 神经网络和 GA-BP 神经网络进行分类。实验结果表明, 利用遗传算法可以缓和 BP 神经网络在训练过程中出现的局部极小值问题, 使分类性能更加稳定。这对进一步的提升塑料分类效果具有重要的指导意义。

参考文献:

[1] 张效林, 王汝敏, 王志彤, 等. 废旧塑料在复合材料领域中回用技术的研究进展[J]. 材料导报 A: 综述篇, 2011, 25(8): 92-95.
[2] 郑阳, 李宗佩, 廖传华. 废旧塑料循环利用技术研究进展[J]. 塑料助剂, 2014, 2(3): 11-16.
[3] 熊秋亮, 黄兴元, 陈丹. 废旧塑料回用技术的研究进展[J]. 工程塑料应用, 2013, 11(41): 111-115.

[4] 汤桂兰, 胡彪, 康在龙, 等. 废旧塑料回用利用现状及问题[J]. 再生利用, 2013, 6(1): 31-35.
[5] Roh S B, Oh S K. Identification of plastic wastes by using fuzzy radial basis function neural networks classifier with conditional fuzzy C-means clustering [J]. J Electr Eng Technol 2016, 11(6): 1872-1879.
[6] Sangobtip P, Napatr K, Somsak D. Combination of three-stage sink-float method and selective flotation technique for separation of mixed post-consumer plastic waste [J]. Waste Manage 2009(1): 129-131.
[7] Boueri M, Motto-Ros V, Lei W, Q, et al. Identification of polymer materials using laser-induced breakdown spectroscopy combined with artificial neural networks [J]. Appl Spectrosc 2011, 65(3): 307-314.
[8] 刘凯, 王茜蓓, 赵华, 等. 激光诱导击穿光谱在塑料分类中的应用[J]. 光谱学与光谱分析, 2011, 31(5): 1171-1174.
[9] 张吉华, 赵志敏, 张文杰, 等. 基于荧光光谱的茶汤中拟除虫菊酯类农药的智能识别[J]. 发光学报, 2016, 37(8): 1023-1030.
[10] 于洋, 郝中骐, 李常茂, 等. 支持向量机算法在激光诱导击穿光谱技术塑料识别中的应用研究[J]. 物理学报, 2013, 62(21): 213-216.
[11] Savin S L P, Berko A, Blacklocks A N, et al. The applications of X-ray absorption spectroscopy in the study of nanocrystalline materials and electrochemical systems [J]. C R Chim 2009, 40(47): 948-963.
[12] Wende H. Recent advances in X-ray absorption spectroscopy [J]. Rep Prog Phys 2004, 67(12): 2105-2181.
[13] Hu B, Zhang X L, Ouyang Q N, et al. A prototype system to measure X-ray absorption spectra for diagnosis in vivo [J]. Measurement 2016, 93: 252-257.
[14] Yano J, Yachandra V K. X-ray absorption spectroscopy [J]. Photosynth Res 2009, 102: 241-254.
[15] Arias-Castro E, Lerman G, Zhang T. Spectral clustering based on local PCA [J]. J Mach Learn Res, 2017, 18: 1-57.
[16] Jolliffe I T, Cadima J. Principal component analysis: a review and recent developments [J]. Philos T R Soc A, 2016, 374(2065): 1-16.
[17] Tanabe K, Tamura T, Uesaka H. Neural network system for the identification of infrared spectra [J]. Appl Spectrosc, 1992, 46(5): 807-810.
[18] Gu J, Yin G H, Huang P F, et al. An improved back propagation neural network prediction model for subsurface drip irrigation system [J]. Comput Electr Eng, 2017, 60: 58-65.
[19] Zhang Z, Ye J, Chen B, et al. Investigation of optimization-based reconstruction with an image-total-variation constraint in PET [J]. Phy Med Biol, 2016, 61(16): 6055-6084.