

<https://doi.org/10.3799/dqkx.2020.360>



基于机器学习的矿物智能识别方法研究进展与展望

郝慧珍^{1,2}, 顾庆^{1,3}, 胡修棉^{4*}

1. 南京大学软件学院, 江苏南京 210023
2. 南京工程学院信息与通信工程学院, 江苏南京 211167
3. 南京大学计算机科学与技术系, 江苏南京 210023
4. 南京大学地球科学与工程学院, 江苏南京 210023

摘要: 矿物智能识别是地球科学与信息科学的重要交叉方向, 显示出强大的生命力. 本文在调研国内外研究动态的基础上, 把矿物智能识别划分为 4 个阶段, 即矿物采集、数据获取、模型构建、分类判别; 根据测试方法和获得的数据类型, 把矿物智能识别分为基于化学成分、显微光学图片、光谱分析的 3 条基本路线; 总结了应用于矿物智能识别的机器学习方法和技术, 包括统计学习、线性回归模型、距离度量模型、树结构模型、神经网络模型及其与样本问题相关的新技术. 在此基础上, 提出消除地质学与人工智能的鸿沟、建设可用于学习的高质量矿物数据集、完善适合矿物智能识别的机器学习方法、增进模型可解释性、加强工业推广的实践是该领域未来的重点发展方向.

关键词: 机器学习; 矿物智能识别; 矿物学; 人工智能; 地质学.

中图分类号: P575

文章编号: 1000-2383(2021)09-3091-16

收稿日期: 2020-09-16

Research Advances and Prospective in Mineral Intelligent Identification Based on Machine Learning

Hao Huizhen^{1,2}, Gu Qing^{1,3}, Hu Xiumian^{4*}

1. *Software Institute, Nanjing University, Nanjing 210023, China*
2. *School of Information and Communication Engineering, Nanjing Institute of Technology, Nanjing 211167, China*
3. *Department of Computer Science and Technology, Nanjing University, Nanjing 210023, China*
4. *School of Earth Sciences and Engineering, Nanjing University, Nanjing 210023, China*

Abstract: Mineral intelligent identification is a developing interdisciplinary research field between earth science and information science, where machine learning shows great vitality. This paper divides the procedure of mineral intelligent identification into four stages, including mineral collection, data acquisition, model building and category discriminant. Based on the test methods and data types, the mineral intelligent identification can be achieved by three different research routes, namely, chemical-composition-based, microscopic-optical-image-based and spectral-image-based. Various methods of machine learning for mineral intelligent recognition are reviewed in detail including statistical learning, similarity measurement, decision tree, artificial neural network and few new technologies related to testing sample. We suggest that the future directions in this field are to eliminate the gap between geology and artificial intelligence, to build high-quality mineral datasets that can be learned by the machine, to explore and consummate machine learning methods suitable for mineral intelligence identification, to increase the ability of model explanation,

基金项目: 国家自然科学基金项目(No. 41972111); 科学技术部第二次青藏高原科学考察研究计划项目(No. STEP 2019QZKK020405).

作者简介: 郝慧珍(1974—), 女, 讲师, 博士研究生, 研究方向为人工智能与地球科学交叉. ORCID: 0000-0002-4910-763X. E-mail: haohuizhen@njit.edu.cn

*** 通讯作者:** 胡修棉, E-mail: huxm@nju.edu.cn

引用格式: 郝慧珍, 顾庆, 胡修棉, 2021. 基于机器学习的矿物智能识别方法研究进展与展望. 地球科学, 46(9):3091-3106.

and to strengthen the practice of industrial application.

Key words: machine learning; mineral identification; mineralogy; artificial intelligence; geology.

0 引言

矿物是岩石和矿石的基本单元,是天然的、无机的、固态的、具有一定的化学成分和有序的内部结构.不同的矿物种类可以根据其特定的化学成分和晶体结构来进行区分.在实际工作中,地质人员一般通过矿物的物理、化学属性,与已知矿物进行对比来获知矿物的种类.最传统的矿物识别方法是根据矿物的外形和物理性质进行手标本鉴定.这种方法的优点是简单、易行、成本低,缺点是准确度低,同一种矿物因成分、结构及集合状态等因素会导致物性(如颜色等)变化,对鉴定者专业知识要求高.因此,矿物肉眼鉴定只适用于较常见的、结晶较大、特征明显的矿物(郭艳军等, 2020).更常见的方法是通过岩石显微薄片进行矿物的观察,如通过干涉色、凸起、多色性等进行识别,对专业知识要求更高.如果想要获得矿物的准确类别,则需要借助更先进的实验仪器,如 X 射线衍射、电子探针、拉曼光谱等.

早在 20 世纪 60~70 年代,随着扫描电镜和电子探针等仪器的发展,一些学者开始尝试开发矿物自动鉴定系统(Sandmann, 2015),如英国皇家矿业学院的 Geoscan-Minic 系统、美国宾州州立大学的 CE-SEMI 系统、法国地质调查局的 JEOL JSM U3 SEM 自动系统、澳大利亚联邦科学与工业研究组织 CSIRO 的 MINSCAN 系统等.这些早期研究仅停留在探索性的开发阶段,并没有研发出成熟的商用产品.该领域的重大突破来自澳大利亚 CSIRO 的持续努力,20 世纪 80 年代前人开发出基于扫描电镜和 X 射线能谱的矿物鉴定系统(QEM*SEM, Reid *et al.*, 1985),1995 年研发的扫描电镜和能谱器的矿物鉴定系统被命名为 QEMSCAN.在矿物自动鉴定系统开发方面另外一个成熟的系统是澳大利亚昆士兰大学的 MLA(Gu, 2003).无论是 QEMSCAN 还是 MLA,其矿物自动鉴定系统的主要原理和特点类似:(1)利用扫描电镜强大的空间分辨率,实现矿物微区观察和分析;(2)利用 X 射线能谱定性-半定量获得矿物测试点的元素组成;(3)通过背散射电子图像区分物相;(4)通过包含矿物能谱成分数据库的软件进行矿物分类和鉴定.

矿物自动鉴定的核心是矿物的类别判定,目前有两类方法:(1)标准鉴定法.这种方法是目前商用系统中主要的判别方法.标准鉴定法中,事先存储一个标准矿物测试数据集合,在矿物识别时,将所测矿物数据与已有的标准矿物测试数据进行对比,设置一定的判别标准,以实现矿物类别的判定.这种方法的优点是实现简单,容易理解;缺点是需要事先确定标准矿物数量、类别和判别标准,数据集合中没有的矿物无法识别,而且识别的准确性较差.Nie and Peng (2014)通过比较黄土样品中 QEMSCAN 和传统光学鉴定获得的重矿物组成,发现 QEMSCAN 获得的重矿物比例存在明显的偏差,其中角闪石的误差达到 3 倍,金红石的误差超过 2 倍,而电气石、石榴子石、锆石、绿帘石的误差率分别为 96%~97%、54%、46%~51%、34%~35%.产生较大误差的原因在于矿物组分的不均一性,实际测试的矿物能谱数据与矿物能谱标准成分相差较大.(2)模型判定法.模型判定是采用大量的经验数据,用机器学习方法构建出矿物的识别模型,在矿物识别时,将数据输入模型,由模型来判别该数据对应的矿物类别.模型判定法使用机器学习方法直接从数据中“学习”信息,而不依赖于预定方程模型,有效地提高了识别准确率.该技术的发展大大增强了矿物识别的扩展性.模型判定法也成为近年来矿物智能识别多数人采用的方法.

近年来,随着人工智能技术的快速发展,许多学者运用机器学习方法开展了地质学研究的探索性工作,如铜矿预测(徐永洋等, 2020)、找矿信息的挖掘与集成(左仁广等, 2021)、多尺度地质建模(张夏林等, 2020)、化石智能鉴定(Liu and Song, 2020)、沉积岩岩相判别(如煤, Tiwary *et al.*, 2020; 粉砂岩和页岩, Anderson *et al.*, 2020; Pires de Lima *et al.*, 2020; 砂岩, Tang *et al.*, 2020).利用机器学习开展矿物智能识别受到越来越多研究人员的重视与关注,也取得了快速的进步.本文试图对这一领域国内外研究动态进行介绍,分析基于机器学习的矿物智能鉴定的研究方法和基本路线,展示现有的具体研究工作,

并对这些工作进行总结,对该领域研究进行展望,试图为我国学者开展相关研究提供借鉴。

1 矿物智能识别的基本过程

开展矿物智能识别的研究方法尽管多种多样,但其基本过程大体是一致的,可归纳为4个阶段(图1):(1)获取矿物.主要途径有岩石手标本矿物、单颗粒矿物、钻探标本矿物等.相比较而言,薄片下单矿物颗粒的标本由于更贴近地质人员的鉴定对象而受到广泛重视,成为智能识别的主要探索对象;(2)采集数据.使用仪器获取对矿物的描述数据,包括图像、图形、化学和物理数据.矿物的多角度拍摄图片、薄片的显微图像、矿物的元素地球化学数据、矿物的光谱图像等都成为智能识别的重要数据集;(3)建立模型.采用机器学习方法学习矿物识别的判别模型.尽管机器学习发展时间短,但已被广泛地运用到矿物智能识别探索中,并取得了重要的阶段性进展(参见后面的章节);(4)判定类别.采用模型对待识别数据进行判别,获得矿物的类别.根据不同的矿物数据集,采用不同的判别方法,目前判别的模型也多种多样,准确率也相差很大。

2 矿物智能识别的研究路线

矿物鉴定可以从矿物的多个属性来进行,比如外表形态、物理性质、化学成分、内部结构等.从机器学习方法的角度,归纳起来,根据矿物数据集的差异可分为3条基本路线,即分别基于化学成分、显微光学图片、光谱分析进行矿物智能识别(表1).下面分别进行介绍。

2.1 基于化学成分进行矿物智能识别

矿物的化学成分是识别矿物的重要依据,一般通过光谱分析获得矿物化学成分的含量,进而判别矿物的类别.归纳起来,目前运用机器学习方法进行矿物智能鉴定涉及的矿物成分分析测试方法与数据类型有(Lou *et al.*, 2020):能量散射光谱(EDS),结构数据;电子探针(EPMA),结构数据;激光诱导击穿光谱(LIBS),谱图数据.由于矿物的光谱数据范围广泛(可以测试的元素有几十个之多),加上一些矿物主量元素组成类似,人工通过化学测试的数据(如SEM-EDS)来判别矿物具有很大的挑战性,因此,需要通过计算机辅助识别技术来实现(Akkaş *et al.*, 2015; Itano *et al.*, 2020),这也成为近年来该研究领域的一个前沿方向。

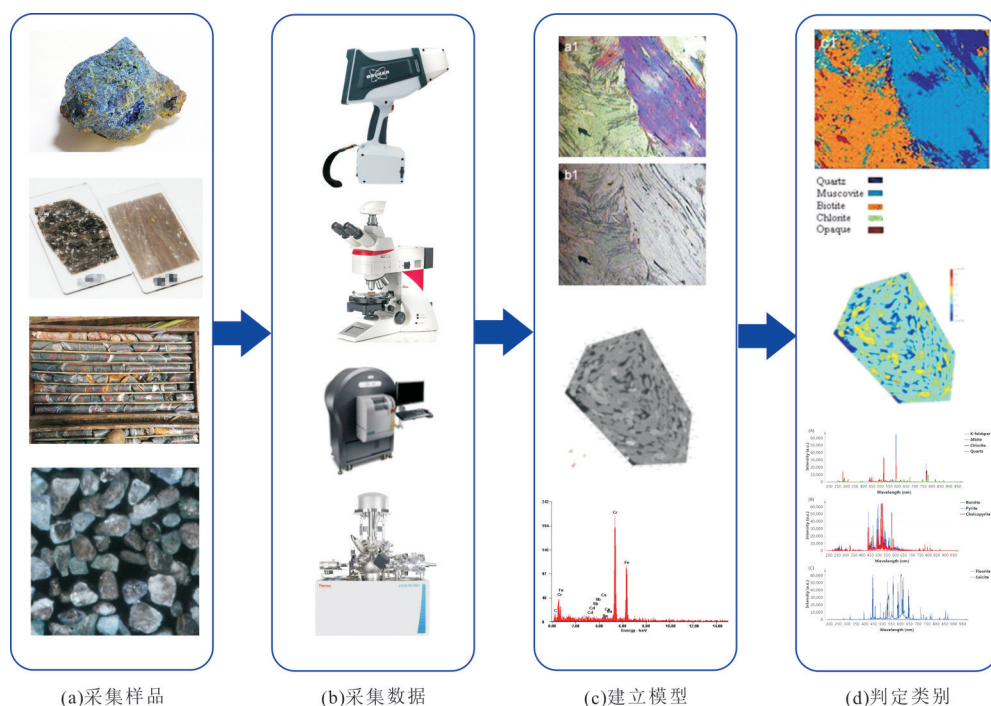


图1 智能矿物鉴定的阶段示意

Fig.1 A simplified cartoon showing four research stages of the mineral intelligent identification

a. 阶段1,获取矿物标本,主要途径有岩石手标本的矿物、单颗粒矿物、钻探标本的矿物等;b. 阶段2,使用仪器获取对矿物的描述数据,包括图像、图形、化学和物理数据;c. 阶段3,采用机器学习方法学习矿物识别的判别模型;d. 阶段4,采用模型对待识别数据进行判别获得矿物的类别

表 1 基于不同矿物数据集的矿物智能识别研究路线

Table 1 Summary of three research routes based on different datasets for the mineral intelligent identification

研究路线	数据类型	数据集优缺点	涉及的机器学习方法	主要参考文献
化学成分分析	EDS 数据	数据获取快;化学元素数据 数据准确性不高	查找表,最大似然法;	Ruisanchez <i>et al.</i> , 1996
	SEM/ EDS	空间分辨率高;数据获取快; 元素准确性不高	神经网络,统计方法,多层感知神经网络技术, 无监督神经网络 Kohonen,决策树	Nielsen <i>et al.</i> , 1998; Larsen <i>et al.</i> , 2000; Flesche <i>et al.</i> , 2000; Gallagher and Deacon, 2002; Akkas <i>et al.</i> , 2015
	EMPA 数据	化学元素准确率高,数据获取 费时费力,不能满足大规模 模测试需求	无监督神经网络 Kohonen	Tsuji <i>et al.</i> , 2010
	LIBS 数据	数据获取快,要求测试矿 物颗粒大(>350 μm);不适 合自然界多数自然产出的 矿物颗粒.	偏最小二乘回归(PLS),多变量曲线分辨率-交 互最小二乘法(MCR-ALS),最小绝对收缩和 选择算子(Lasso),判别函数分析(DFA),多元 曲线分辨-交替最小二乘法(MCR-ALS)	Harmon <i>et al.</i> , 2009; Clegg <i>et al.</i> , 2009; Alvey <i>et al.</i> , 2010; Dyar <i>et al.</i> , 2012; Remus <i>et al.</i> , 2012; Ali <i>et al.</i> , 2016; Khajehzadeh <i>et al.</i> , 2016; El Haddad <i>et al.</i> , 2019
显微 光学 图片 分析	显微 图像	地质学最常见矿物判别的数 据类型.目前数据集有限.最 有前景的研究路线.	平行管道法,最大似然法和模糊分类技术,阈 值法,决策树,神经网络,多层感知神经网络, 多尺度分割算法,统计方法	Launeau <i>et al.</i> , 1994; Marschallinger, 1997; Marschallinger and Hofmann, 2010; Ross <i>et al.</i> , 2001; Thompson <i>et al.</i> , 2001; Holden <i>et al.</i> , 2009; Baykan and Yilmaz, 2010; 叶润青等, 2011; Gomes <i>et al.</i> , 2010, 2013; Aligholi <i>et al.</i> , 2015, 2017; 赵启明等, 2015; Izadi <i>et al.</i> , 2013, 2017; Ramil <i>et al.</i> , 2018; Zhang <i>et al.</i> , 2019; Borges and de Aguiar, 2019; Maitre <i>et al.</i> , 2019
光谱 分析	Raman	这是矿物种类鉴定最可靠 的方法,也有国际数据集, 但测试仪器昂贵,大面积推 广存在困难	神经网络,主成分分析,偏最小二乘,加权邻居 分类器,随机森林,卷积神经网络,深度神经网 络,Siamese 网络等	Ishikawa and Gulick, 2013a, 2013b; Lopez-Reyes <i>et al.</i> , 2014; Carey <i>et al.</i> , 2015; Liu <i>et al.</i> , 2017, 2019; Sevetlidis and Pavlidis, 2019; Zhang <i>et al.</i> , 2019

能量散射光谱(EDS)在矿物智能识别方面因其测试速度快、测试元素多得到了极大的关注.单个测试点获得的数据是矿物的化学元素的相对含量,基于不同矿物化学元素含量的差异,可以对测试点进行类型判别(Ruisanchez, 1996).扫描电镜/能量散射光谱(SEM/EDS)因放大倍数高(可达十几万倍)、分辨率好、可以观察到超细矿物,能够更准确、定量地识别出岩石中的矿物类别与含量,加之制样方便不需要抹平和抛光,因此成为矿物智能识别的重要研究手段.在利用 SEM/EDS 数据进行矿物分类方面,早期工作是采用扫描电子显微镜对每个像素进行能量分散光谱分析,使用查找表或者最大似然分类法来识别每一个像素中的矿物(Tovey and Krinsley, 1991; Clelland and Fens, 1991).随后,一些学者尝试用人工智能方法对矿物的 SEM/EDS 数据进行分类,从而识别矿物.Nielsen *et al.* (1998)提出从一系列种子点生成一组

训练类,采用统计学习中的简单二次、上下文二次、层次和扩展层次二次分类实现沉积岩中常见矿物的半自动分类.Larsen *et al.* (2000)进一步对 Nielsen *et al.* (1998)所提出方法中输入到种子生长算法的参数变化的边际效应进行了评估,包括种子点、训练集的增长、操作者在多个潜在种子点中选择种子的效果.Flesche *et al.* (2000)采用扫描电子显微镜能量色散光谱扫描岩石薄片,映射出 12 个化学元素,通过一系列种子点生成训练数据集,计算频谱相似度和空间相似度,采用朴素贝叶斯、包含空间特征的上下文分类器、层次分类器分类硅酸盐和碳酸盐岩常见的 29 种矿物类别.Gallagher and Deacon (2002)采用扫描电子显微镜获得 10 种矿物样品的 X 射线光谱数据,采用反向传播、拟牛顿法、Quick-prop 法训练的多层感知神经网络技术和无监督神经网络 Kohonen 自组织网络(SOM)对这些矿物进行分类.他们的实验结果表明,反向传播和拟牛顿

算法正确率达100%,SOM网络在10次训练中产生平均误差为0.518,标准偏差为0.008.Akkaş *et al.* (2015)利用SEM/EDS测试分析了来自不同火成岩的10种矿物组(橄榄石、直角辉石、斜辉石、磷灰石、角闪石、斜长石、钾长石、锆石、磁铁矿、黑云母),获得了4 601个元素X射线强度数据,其中2 400个元素数据被用于训练,对其余的2 201个数据进行测试,发现采用C5.0决策树分类算法可以准确分类绝大多数测试数据;对于具有类似化学成分的矿物,如橄榄石 $[(Mg, Fe)_2(SiO_4)]$ 和直角闪石 $[(Mg, Fe)_2(SiO_6)]$ 也能成功识别.此外,决策树算法准确地区分了两个来自角闪石组(镁橄榄石)和两个来自斜辉石组(透辉石)的矿物成员.

另外,一些学者基于电子探针数据开展矿物智能识别的探索性工作.Tsuji *et al.* (2010)采用电子探针获得几种元素的X射线强度,使用无监督神经网络Kohonen自组织图对玄武岩多个X射线强度图分类,同时根据薄片每种矿物的含量确定分类边界,成功地获得玄武岩的矿物组成.

激光诱导击穿光谱(LIBS)是一种近年来得到快速发展并在多个领域得到应用的原子发射光谱分析方法,具备样品预处理简单、破坏性小、分析时间短、可实时在线及远程监测等强大优势(Singh and Thakur, 2007).激光诱导击穿光谱提供了一种现场进行定量识别矿物的新方法.Harmon *et al.* (2009)使用商用台式LIBS获得了多个单束光谱,通过与光谱库对比,计算测试光谱与同组内其他光谱的相关系数,采用最近邻分类法对7个样本组的矿物类别进行了高置信度的识别.Clegg *et al.* (2009)采用3种多元分析技术(主成分分析、偏最小二乘方法和簇类独立软模式法)对18个不同火成岩和高级变质岩的激光诱导击穿光谱生成模型,预测元素丰度.Alvey *et al.* (2010)将统计信号处理和分类技术应用于来自世界92个地方157个石榴子石的单束、宽带LIBS光谱,采用偏最小二乘法对每个石榴子石样品的25个LIBS光谱进行分类,交叉验证过程后的结果表明,宽带LIBS分析可用于样品的组成和地理来源的分类,具有可识别地理来源的潜力.Dyar *et al.* (2012)用LIBS测定了100个火成岩和高级变质岩的元素组成,拟合两种偏最小二乘回归方法:PLS-1方法将6 144个分光通道的光谱强度作为观测变量回归单个响应变量(元素浓度),PLS-2方法利用这些观察变量同时回归多个响应变

量(岩石中的10种元素的浓度).回归结果与最小绝对收缩和选择算子(Lasso)多元回归技术进行对比,结果表明,PLS-1和PLS-2在该数据集的准确性方面都产生了与Lasso可比较的结果.Remus *et al.* (2012)使用偏最小二乘判别分析(PLSDA)对样本LIBS数据集进行分类,在美国加利福尼亚中北部的Coso火山岩带、Bodie丘陵和其他地区黑曜岩中,以90%以上的准确率识别出黑曜岩产地.Ali *et al.* (2016)采用激光诱导击穿光谱(LIBS)和判别函数分析(DFA)对5种不同类型的石英样品进行了分类.Khajehzadeh *et al.* (2016)通过LIBS分析获取10种矿物成分数据,训练3种包含不同数量的隐变量偏最小二乘回归(PLS)模型,预测铁矿浮选浆中矿物的浓度.测试实验表明石英和铁氧化物浓度与预测结果基本一致,而黑云母、海绿石和铁铬铁矿浓度的相对误差较大.El Haddad *et al.* (2019)使用SEM/EDS仪器对岩石中10种矿物进行测试,应用多元曲线分辨-交替最小二乘法(MCR-ALS)对所得LIBS数据用于训练并建立预测模型,通过对测试数据预测,并与定量矿物分析(QMA)进行对比,表明主量矿物的均方根误差小于10%,与QMA结果吻合良好.

还有一些研究人员聚焦于采用不同的分析数据进行矿物智能识别方法的研究.Gibbons (2020)针对黏土矿物的化学成分变化大、富结构缺陷导致分类鉴定困难的特点,提出了一种基于化学成分和光谱分析的黏土矿物鉴定方法;采用拉曼光谱和激光诱导击穿光谱(LIBS)分析提供关于被查询目标的分子结构和元素组成的补充信息,这两类数据连接成一个单一的数据矩阵,采用主成分分析(PCA)、线性判别分析(LDA)、主成分-线性判别分析(PC-LDA)确定矿物组.该工作表明数据融合在正确区分地质标本方面具有优势.

总体来看,化学分析法在矿物智能识别方面具有一定的优势:测试方式比较丰富;能够比较准确地、定量地进行矿物分析;化学分析法与矿物的化学组成相关,不受矿物的含量与粒度的影响.同时也存在一些困难:矿物的光谱数据范围广泛(可以测试的元素有几十个之多);一些矿物主量元素组成类似,单独通过化学测试的数据来判别矿物存在困难;由于数据类型较多,对数据处理的要求较高.

2.2 基于显微光学图片进行矿物智能识别

显微光学观察是地质人员相对快速可靠地进

行矿物识别的方法.一些学者试图通过计算机视觉的方法来模拟地质人员开展矿物智能识别(Ander-son *et al.*, 2020; Iyas *et al.*, 2020; 李明超等, 2020; Liu and Song, 2020).基于岩石显微图像开展矿物识别的研究一直是重要的探索方向,前人尽管开展了很多探索性的工作,但无论是方法还是技术仍不成熟(Hao *et al.*, 2019; 彭伟航等, 2019; 李明超等, 2020).现把代表性的工作简述如下:Launeau *et al.* (1994)获取岩石薄片的显微图像,基于颜色特征,采用平行管道法识别花岗岩中的 6 种矿物; Marschallinger(1997)以花岗岩和石英正长岩、变辉长岩的显微薄片为样本,基于像素颜色特征,采用无监督和监督分类技术识别其中的矿物类别,结果显示最大似然算法是最有效的方法; Holden *et al.* (2009)检测像素的颜色、亮度、局部纹理等特征,对其加权平均后采用最大似然法和阈值法确定橄榄石,并进行矿物参数(大小和形状)定量分析; Ross *et al.* (2001)采用遗传算法,结合决策树分类器,基于颜色和纹理特征识别矿物类型; Thompson *et al.* (2001)综合多角度薄片图像,采用神经网络尝试识别石英、斜长石和黑云母等 10 类矿物; Baykan *et al.* (2010)采用多层感知器神经网络来识别石英、白云母、黑云母和绿泥石等矿物; 叶润青等(2011)采用多尺度分割算法分割图像,提取颗粒的光谱和纹理特征,训练 6 种分类方法来识别矿物颗粒; 赵启明等(2015)采用 Sobel 算子获取显微正交偏光图像的梯度图像,获取表示纹理特征的灰度共生矩阵,计算能量和相关性并构建石英、长石特征参数样本库,应用人工神经网络分类方法进行训练,计算待识别颗粒的特征参数并分类; Aligholi *et al.* (2015)选择 CIELab 颜色空间进行处理,利用基于颜色的色差引入 7 种基本光学特性,包括颜色、多色性、干涉色、双折射、透明度、均质性、消光角,采用统计学习方法识别矿物显微图像的均质区域类别; Aligholi (2017)在 CIELab 颜色空间中,跟踪矿物在单偏光和正交偏光下 CIELab 颜色空间中的颜色变化,计算其与已知矿物的 Hausdorff 距离来识别特定矿物; Ramil *et al.* (2018)采用多层感知神经网络,识别了 3 种不同类型花岗岩的石英、钾长石、斜长石和黑云母矿物; Borges and de Aguiar (2019)使用了两个薄片数据集,一个是 Mashhad 数据库的 17 种矿物,另一个是 Pelotas 数据库的 4 种矿物,提取出颜色和纹理的光学属性,使用最近邻和决策树

方法,结果显示 Pelotas 数据库平均准确率达 97%,而 Mashhad 数据库的平均准确率为 93%; Maitre *et al.* (2019)提出基于机器学习和计算机视觉进行自动识别光学显微图像中的矿物颗粒,有效地识别出沙子中的矿物颗粒类别.还有少量的工作是关注于某个特定矿物的识别.例如, Zhang *et al.* (2019)在显微图像中判别树脂与石英; Gomes *et al.* (2010, 2013)提出了一种根据赤铁矿晶体的亮度和颜色,采用阈值法对巴西铁矿石中的赤铁矿进行自动识别、测量和分类的方法.

通过以上调研,不难看出,基于显微图像的矿物智能识别优势为:图像数据主要反映矿物的光学属性,如颜色、多色性、解理等,观测直观,易于理解;测试方法比较普遍、成本低、容易理解;数据分析基于晶体光学与物理特征,具有丰厚的技术基础.该方法最大的困难是:矿物特征为定性描述的图像数据,数据分析需要较强的专业背景知识;同类矿物的显微图像数据变化较大,对数据处理的要求较高;带有标注的标准图像数据主要为实例描述,而完整的数据集较少,这限制了机器学习方法的应用范围.

2.3 基于光谱分析进行矿物智能识别

第三种思路是采用光谱分析获取矿物的结构特征和成分,进行矿物智能识别.激光拉曼光谱分析是以拉曼散射为理论基础的一种非破坏性微区分析手段,在微区分析上具有高精度、原位、无损和方便快捷等特点,可以快速、方便地确定固体、液体、粉末及气态物质等的分子组成、结构及相对含量,实现对物质的鉴别和定性. RRUFF 数据集是矿物的拉曼光谱、X 射线衍射和矿物化学数据的综合数据库,近年来该领域的工作主要是基于 RRUFF 数据集开展的矿物智能识别探索(Stefaniak *et al.*, 2006).

Ishikawa and Gulick (2013a)利用多层感知神经元对火成岩矿物包括橄榄石、石英、斜长石、钾长石、云母、辉石等的拉曼光谱进行了训练,矿物识别平均准确率 83%,橄榄石、石英、辉石矿物的准确率达 100%. Ishikawa and Gulick (2013b)针对长英质和镁铁质火成岩中一些矿物组虽然化学式相同但结构不同的特点,如斜长石组中的钠长石、钙长石、拉长石,钾长石组中的微斜长石、正长石,辉石组中的普通辉石、透辉石、钙铁辉石、角闪石等,采用 RRUFF 拉曼光谱数据和自有数据训练神经网络分类器,自有数据集分类正确率达 83%, RRUFF 数据

分类正确率达80.4%。Lopez-Reyes *et al.* (2014)建立了基于主成分分析(PCA)、偏最小二乘(PLS)和人工神经网络(ANNs)的3种多元分析数学模型,利用激光拉曼光谱数据检测出火星岩石样品中的硫酸盐矿物。Carey *et al.* (2015)使用了来自RRUFF数据库的光谱子集,使用随机收集的3 950个无定向样本、代表1 215种不同矿物的光谱数据,基于向量相似度和轨迹相似度,采用加权邻居分类器实现矿物的拉曼光谱分类,取得了比Ishikawa and Gulick (2013a)更好的效果。Liu *et al.* (2017)训练卷积神经网络,自动识别了矿物的RRUFF拉曼光谱数据。Liu *et al.* (2019)为了解决RRUFF拉曼光谱数据集中的类不平衡问题,训练Siamese网络,实现了使用一个参考样就能够有效地对未见类别进行分类。Sevetlidis and Pavlidis (2019)使用RRUFF拉曼光谱数据集,通过数据增强和预处理数据集,能够在不牺牲计算速度或增加计算复杂度的情况下,提高随机森林和极度随机树分类矿物的性能,取得了很好的分类效果。张旭等(2020)构建全光衍射深度神经网络分类系统,采用RRUFF数据库中5类矿物(钾长石、云母、橄榄石、斜长石、辉石)的拉曼光谱数据作为训练数据集并进行测试,结果表明基于光学衍射神经网络的拉曼矿物分类精度达到94%。吴承炜等(2020)基于1 375种矿物、3 788个标本的高质量拉曼光谱数据,提出一种基于Siamese网络的相似性学习方法,取得了较好的实验结果。

光谱分析结构矿物智能识别的优势体现在:拉曼光谱对分子振动很敏感,提供了分子的化学组成和结构信息;高横向分辨率和共焦性允许测量小于10 mm的颗粒,可以量化粉砂级矿物的组成;通常被光学分析忽略的不透明矿物,用拉曼光谱可以很容易地识别出来。光谱分析开展矿物智能识别的困难在于:测试方法容易受光学系统参数等因素的影响;矿物描述为信号数据,数据处理要求较高。

3 矿物智能识别的机器学习方法

人工智能技术的发展将引领新一轮的工业和科技变革,其核心技术为机器学习。机器学习从经验数据中学习和识别复杂的模式和关系,提取隐含的知识和推断能力。几十年来,科学家一直在用机器学习方法试图解决岩石与矿物智能识别的问题。早期实验结果验证了机器学习在矿物识别中具有一定的前景,但是在更广泛地采用机器学习方法进

行矿物智能识别方面进展缓慢。随着机器学习方法在多方面的突破,这种情况正在迅速改变,包括深度学习方法的巨大进展和更多、更易于使用的工具箱的出现,使地球科学家重新燃起了对机器学习的兴趣,出现了越来越多的矿物智能识别方法的探索性研究。本文对应用于矿物智能识别中的机器学习方法进行了总结,期望矿物研究工作者可以快速确定可供采用的判别路线和方法,为解决不同场景的问题找到最有效的途径。同样,希望机器学习领域的研究人员可以了解现有方法的使用场景,发现该领域技术发展有可能出现的问题和挑战。

矿物智能识别中的机器学习技术主要是监督学习,训练数据类标签(分类)或目标预测值(回归)是可用的,开发模型为预测新观察类或值。应用于矿物智能识别的机器学习方法包含了几种主流方法,包括统计学习、线性回归模型、距离度量模型、树结构模型、神经网络模型等方法,也涌现出一些解决小样本和样本不平衡问题的新技术(图2,表2)。下面分别予以简单介绍。

3.1 统计学习

统计学习是通过计算所测矿物的概率大小来判别矿物的类别。主要采用的方法包括最大似然估计(MLE)、朴素贝叶斯(NB),其优点是过程简单、速度快;对于多分类问题也同样有效,复杂度也不会有明显上升;独立分布情况下效果较好;需要的样本量也较少。Nielsen *et al.* (1998)提出从一系列种子点生成一组训练类,采用统计学习中的简单二次、上下文二次、层次和扩展层次二次分类实现沉积岩中的最常见矿物的半自动分类。Flesche *et al.* (2000)采用扫描电子显微镜能量色散光谱扫描岩石薄片,映射出12个化学元素,通过计算频谱相似度和空间相似度,采用朴素贝叶斯、包含空间特征的上下文分类器、层次分类器分类硅酸盐和碳酸盐岩石中常见的29种矿物类别。Marschallinger (1997)基于像素的光谱统计特征,采用基于欧氏距离的六面体、矩心法和最大似然法技术识别岩石中的矿物类别。Holden *et al.* (2009)通过检测样本图像像素的颜色、亮度、局部纹理等特征,对其加权平均后采用最大似然法和阈值法确定橄榄石,并进行矿物参数(大小和形状)定量分析。Aligholi *et al.* (2015)选择CIELab颜色空间的7种矿物光学特性,计算测试样本是特定类别的概率,采用多数表决方案确定矿物的类别。

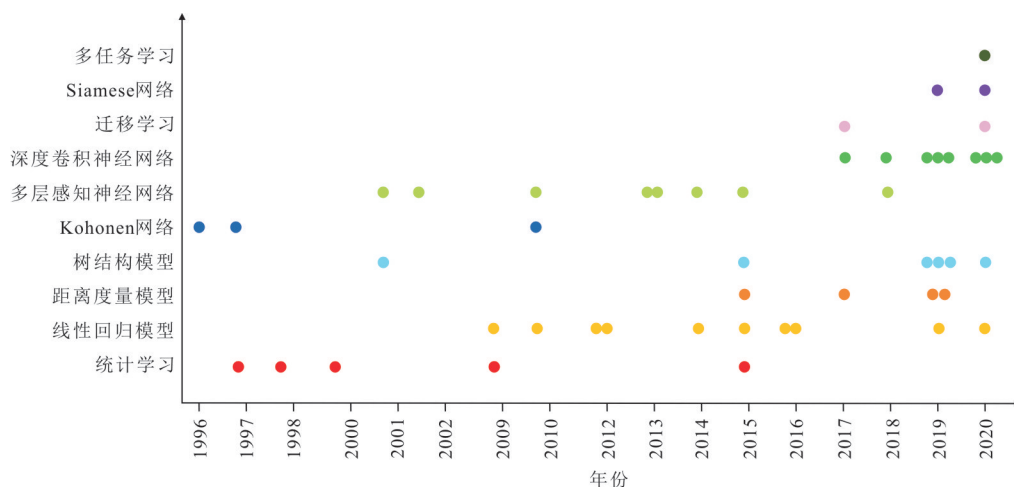


图2 矿物智能识别的机器学习方法发展趋势

Fig.2 The development trend of the various methods of machine learning applied in the mineral intelligent identification
各方法的参考文献见表2和正文描述

表2 矿物智能识别的不同机器学习方法对比表

Table 2 Summary of various methods of machine learning applied in the mineral intelligent identification

分类模型	算法类型	主要优缺点	主要参考文献
统计判别方法	MLE, NB	简单迅速,适用于多分类,独立分布效果较好,需要的样本量也较少.	Marschallinger, 1997; Nielsen <i>et al.</i> , 1998; Flesche <i>et al.</i> 2000; Holden <i>et al.</i> , 2009; Aligholi <i>et al.</i> , 2015
线性回归模型	PLS, PLS-DA, LASSO, ElasticNet	去除多重相关性,易于实现,只有很少的调优参数	Clegg <i>et al.</i> , 2009; Alvey <i>et al.</i> , 2010; Dyar <i>et al.</i> 2012; Remus <i>et al.</i> , 2012; Lopez-Reyes <i>et al.</i> , 2014; Ali <i>et al.</i> , 2016; Cochrane and Blacksborg, 2015; Khajehzadeh <i>et al.</i> , 2016; El Haddad <i>et al.</i> , 2019; Gibbons, 2020
距离度量模型	KNN	简洁,可扩展	Carey <i>et al.</i> , 2015;Aligholi <i>et al.</i> , 2017; Borges <i>et al.</i> , 2019; Maitre <i>et al.</i> , 2019
树结构模型	C4.5, CART, ID3, RF, ET	易于理解,要求与数据量少,可以处理数值型和类别型数据,具有较强的鲁棒性.	Ross <i>et al.</i> , 2001; Ishikawa and Gulick, 2013b; Akkaş <i>et al.</i> , 2015; Borges and de Aguiar, 2019; Maitre <i>et al.</i> , 2019; Sevetlidis and Pavlidis, 2019; 赵永翼等, 2020
神经网络模型	SOM	结果容易理解,实现简单	Ruisanchez <i>et al.</i> , 1996; Zupan <i>et al.</i> , 1997; Tsuji <i>et al.</i> , 2010
	MLPNN	可以拟合复杂模式,解决线性不可分问题	Thompson <i>et al.</i> , 2001; Gallagher and Deacon, 2002; Baykan and Yilmaz, 2010; Ishikawa <i>et al.</i> , 2013b; Izadi <i>et al.</i> , 2013, 2017; Lopez-Reyes <i>et al.</i> , 2014; 赵启明, 2015; Ramil <i>et al.</i> , 2018
	DCNN, Net Inception-v3, Unet, ONN	可以表示复杂结构数据,实现端到端的学习	Liu <i>et al.</i> , 2017; 徐述腾和周永章, 2018; Iglesias <i>et al.</i> , 2019; Zhang <i>et al.</i> , 2019; 彭伟航等, 2019; 郭艳军等, 2020; Li <i>et al.</i> , 2020; 张旭等, 2020
样本问题	迁移学习, 多任务学习	解决两个分类任务相互隔离的问题	Li <i>et al.</i> , 2017; 李明超等, 2020; Li <i>et al.</i> , 2020
新技术	Siamese网络	解决类不平衡和标注样本数量少的问题	Liu <i>et al.</i> , 2019; 吴承炜等, 2020

3.2 线性回归模型

线性回归模型是利用线性回归方程的最小二乘函数对一个或多个自变量和因变量之

间关系进行建模的一种方法.主要有主成分分析、偏最小二乘、最小绝对收缩和选择算子.主成分分析(PCA)是通过一个线性变换

把数据转换到一个新的坐标系统中,变换后具有最大方差的数据称为第一主成分.主成分分析经常用于数据集的降维,同时保持数据集对方差贡献最大的特征.偏最小二乘回归(PLS)是一种两步多元线性回归方法,它使用PCA将输入变量和因变量投影到一个新的空间,提取对因变量解释性最强的综合变量,然后对其进行线性回归.PLS既能克服系统建模中变量多重相关的不良作用,又能考虑输入和输出之间的相关性.Clegg *et al.* (2009)采用3种多元分析技术:主成分分析、偏最小二乘方法和簇类独立软模式法对18种火成岩和变质岩的激光诱导击穿光谱生成模型,预测元素浓度.Dyar *et al.* (2012)利用两种PLS进行线性回归:PLS-1采用观测变量(6144个光谱强度)回归单个响应变量(元素浓度);PLS-2利用自然元素之间的相关性,采用观察变量同时回归多个岩石中10种矿物的浓度.Remus *et al.* (2012)使用偏最小二乘判别分析(PLSDA)对样本LIBS数据集进行分类,在美国加利福尼亚中北部的Coso火山岩带、Bodie丘陵和其他黑曜岩产区,以90%以上的准确率识别出黑曜岩产地.Lopez-Reyes *et al.* (2014)选择激光拉曼光谱特定光谱位置,建立分别基于PCA、PLS和人工神经网络(ANNs)的多元分析数学模型,检测了火星岩石样品中的17种硫酸盐矿物;在这些方法中,ANNs取得了最精确的定性和定量结果.Khajehzadeh *et al.* (2016)通过LIBS测量泥浆矿物含量数据训练PLS模型,预测铁矿浮选浆中矿物的浓度.弹性网络(ElasticNet)是一种使用L1和L2正则化的线性回归模型,保留了Lasso回归稀疏特点,又能保持岭回归的正则化属性.Cochrane and Blacksborg (2015)利用RRUFF拉曼光谱数据库,使用弹性网络约束回归技术快速识别矿物混合物.

3.3 距离度量模型

距离度量模型是根据集合中元素之间距离函数(度量)来确定测试数据与其他矿物的相似性.度量模型具有简洁性和可扩展性,但分类特征需要具备较强的区分性.k-NN分类中,对象的类别是由 k 个邻居的多数表决确定,若 k 为1,则为最近邻分类法.Alig-

holi *et al.* (2017)跟踪矿物在单偏光和正交偏光图像中CIELab颜色空间中的颜色变化,计算与已知矿物的Hausdorff距离,根据设定阈值确定矿物类别.Borges and de Aguiar (2019)基于岩石显微薄片图像的光学属性,采用ID3算法和最近邻分类法识别出17种矿物.

3.4 树结构模型

决策树是一个预测模型,代表的是对象属性与对象值之间的一种映射关系.决策树根据属性的区分性从上到下对数据进行分类识别,叶节点表示具体的类别,从根节点到该叶节点所经历的路径,形成具体的分类规则.决策树有许多优点:易于理解和解释;只需很少的数据准备;既可以处理数值型数据也可以处理类别型数据;在大型或有噪声的数据集中具有较强的鲁棒性.常用算法有二元决策图、CART、ID3算法、C4.5算法.Ross *et al.* (2001)采用遗传算法结合决策树分类器,基于颗粒的颜色和纹理特征识别矿物类型.Ishikawa *et al.* (2013b)采用具有6个隐藏节点的三层前馈神经网络和决策树,对RRUFF和自建的数据集上分类识别化学组成相同但结构不同的矿物.Akkaş *et al.* (2015)对来自不同火成岩的矿物组,采用C5.0算法识别出10种不同的矿物组.Borges and de Aguiar (2019)基于薄片显微图像的光学属性,采用ID3算法和最近邻分类法识别出17种矿物.赵永翼等(2020)采用地球化学数据训练CART分类器,对GEOROC(海洋和大陆岩石的地球化学数据库)中的4000条岩石矿物数据进行分类识别.

随机森林(RF)是一个包含多个决策树的分类器,在学习过程中选择候选特征的随机子集训练决策树,输出类别由多个决策树输出类别的众数确定.RF可以处理大量的输入变量,增加了随机性,产生高准确度的分类器;可以降低类别不平衡数据集的分类误差.极限树(极端随机树,extra-trees,简称ET)算法与随机森林算法相似,都是由多个决策树构成.极限树与随机森林的主要区别在于RF采用随机样本子集生成树,ET使用所有样本;ET是随机选取特征得到分叉值,从而实现对决策树进行分叉.因为ET分裂是随机的,所以在某种程度上ET算法比随机森林算法得到的结果更好.Sevetlidis and

Pavlidis (2019) 采用随机森林和极端随机树识别两个角闪石组和两个斜辉石组的拉曼光谱,探索矿物智能识别的有效方法。

3.5 神经网络模型

人工神经网络通过提取数据中的特征,模仿生物神经网络的结构和功能识别矿物类别。矿物智能识别中涉及到的人工神经网络的模型有 Kohonen (也叫 SOM) 网络、多层感知神经网络 (MLP)、前馈网络结构 (ANN)、深度卷积神经网络 (DCNN)。下面分别进行介绍。

3.5.1 Kohonen 网络 Kohonen 网络(也称之为自组织映射, SOM)是无监督学习网络,根据输入数据之间的相似程度进行聚类。Kohonen 网络由两层前馈神经网络组成,包括输入层和输出层。神经元通过无监督竞争学习使不同的神经元对不同的输入模式敏感,网络训练后神经元被划分为不同区域,各区域对输入模型具有不同的特征,特定的神经元充当某一输入模式的检测器。该技术的优点是结果容易理解,实现起来比较简单。Ruisanchez *et al.* (1996) 基于不同矿物中化学元素的类别含量不同,采用 Kohonen 网络将矿物的能谱数据分为 12 种矿物。Zupan *et al.* (1997) 选择 94 个 EDXs 光谱数据训练 (15×15×15) Kohonen 网络,分类 94 个未知样本。Tsuji *et al.* (2010) 使用无监督神经网络 Kohonen 自组织图,对电子探针分析图 (EP-MA) 分析得到 6 种元素的 X 射线强度图。

3.5.2 前馈神经网络 前馈神经网络是一种简单的神经网络,各神经元分层排列。每个神经元只与前一层的神经元相连。每层神经元接收前一层的输出,并输出给下一层,各层间没有反馈。多层感知神经网络 (MLP) 是前馈神经网络的一种,由输入层、一个或多个隐藏层和输出层组成。每一层都连接到下一层,在隐藏层和输出层中每个节点都是一个带有非线性激活函数的神经元。MLP 具有拟合复杂模式并进行分类的能力,可解决简单感知不能解决的线性不可分问题。

Thompson *et al.* (2001) 通过遗传算法从 100 个网络中找到一个接近最优的网络,每一个网络包含随机选择的 35 个输入、15 个输出参数,能识别石英、斜长石和黑云母等 10 种矿物。Galagher and Deacon (2002) 采用反向传播、拟牛顿法、Quickprop 法训练多层感知神经网络技术和

无监督神经网络 Kohonen 自组织网络对 10 种矿物的 X 射线光谱数据进行了分类。Baykan *et al.* (2010) 采用 MLP 来识别石英、白云母、黑云母和绿泥石等矿物。Ishikawa *et al.* (2013a, 2013b) 采用具有 6 个隐藏节点的三层前馈神经网络和决策树,在 RRUFF 和自建的数据集上分类识别化学组成相同但结构不同的矿物。Izadi *et al.* (2013) 提取单偏光和正交偏光薄片图像 12 种特征 (红、绿、蓝、色调、饱和度、强度等),作为两层神经网络的输入,并训练神经网络,成功识别出 14 种矿物。Lopez-Reyes *et al.* (2014) 选择激光拉曼光谱特定光谱位置,训练 3 层人工神经网络 (ANNs),检测了火星地质样品中的 17 种硫酸盐矿物。赵启明等 (2015) 采用 Sobel 算子获取正交偏光图像的梯度图像,获取梯度图像中表示纹理特征的灰度共生矩阵,计算能量和相关性并构建石英、长石特征参数样本库,应用具有两层隐层的前馈神经网络,计算待识别颗粒的特征参数并分类。

Izadi *et al.* (2017) 基于单偏光和正交偏光图像纹理特征训练多层感知机,识别了火成岩中 23 种测试矿物。Ramil *et al.* (2018) 基于图像中每个像素的 RGB 值,采用多层感知神经网络识别 3 种不同类型花岗岩的石英、钾长石、斜长石和黑云母 4 种矿物颗粒。

3.5.3 深度卷积神经网络 深度神经网络是神经网络的扩展,其核心是包含多个隐藏层,分层提取复杂结构数据的特征。深度学习并不代表一种单一的算法,而是一种具有不同网络架构的方法,至今已有多种深度学习框架,如深度卷积神经网络、深度置信网络和深度循环神经网络。卷积神经网络 (CNNs) 由一个或多个卷积层和顶端的全连通层组成,这一结构使得卷积神经网络能够利用输入数据的二维结构,在图像和语音识别方面能够给出更优的结果。Liu *et al.* (2017) 通过训练卷积神经网络,自动识别了矿物的 RRUFF 拉曼光谱数据。Iglesias *et al.* (2019) 基于 1 747 幅树脂图像和 1 745 幅石英图像组成的数据集,训练 CNNs 来区分铁矿石样品中具有类似反射光显微镜 (RLOM) 反射率的石英和树脂。徐述腾和周永章 (2018) 设计出具有针对性的 Unet 卷积神经网络模型,有效提取了矿相显微镜下矿物的深层特征

信息,实现显微镜下4种矿物智能识别与分类.Zhang *et al.* (2019)基于Inception-v3架构提取了钾长石、长石、斜长石和石英4种矿物图像特征,采用机器学习方法中的逻辑回归(LR)、支持向量机(SVM)、随机森林(RF)、 k 近邻(KNN)、多层感知器(MLP)和高斯朴素贝叶斯(GNB)来建立识别模型,结果表明,LR、SVM和MLP是高维特征分析中比较突出的单一模型,在最终的预测中,LR模型也被设置为元分类器,模型叠加有效地提高了模型的性能.彭伟航等(2019)以常见的16类矿物晶体图像为研究对象,构建矿物识别Inception-v3模型,矿物整体准确率在86%左右,top-5准确率达到99%,并在最终结果中表现出很强的鲁棒性.郭艳军等(2020)基于石英、角闪石、黑云母、石榴子石和橄榄石这5种矿物图像,以ResNet-18神经网络模型作为基础,成功训练出了一个较为精准的矿物识别模型,取得了89%的准确率,实现了基于深度学习的矿物智能识别.李明超等(2020)提出了基于深度卷积神经网络(CNN)的LIBS多分量定量分析方法,利用23份国家标准参考材料中1400多个LIBS光谱数据训练CNN,验证中国首次火星探测任务中火星表面成分探测器LIBS分析系统MarSCoDe的预测能力,结果表明在4种方法中CNN方法具有最佳整体精度.张旭等(2020)将光学神经网络的全光衍射神经网络应用于识别矿物拉曼光谱,仿真结果表明基于光学衍射神经网络的拉曼矿物分类精度达到94%.

3.6 样本问题新技术

基于深度学习的方法大多对标注数据的数量有着较高的要求,而现实场景中往往很难满足.在矿物智能识别领域中,考虑到标注数据的时间和昂贵的经济成本,研究人员尝试运用新技术来解决样本不足和类不平衡的问题.

迁移学习是近年来解决小样本问题的一个重要技术,用于解决两个分类任务相互隔离的问题,使用从一个任务获取的知识去解决另一个相关任务.Li *et al.* (2017)利用迁移学习来处理不同区域间砂岩显微图像分类的问题.李明超等(2020)基于强化后的纹理特征,利用深度学习模型和迁移学习方法建立矿物图像的耦合识别模型,提出了一套完整的矿物智能识别分析方法.

多任务学习是一种归纳迁移机制,利用隐含在多个相关任务的共享表示来获得特定领域的相关信息.Li *et al.* (2020)针对不同流域重矿物数据具有相似的主量元素,单个流域还可能存在一些特有的少量元素,将每个流域的河流砂重矿物分类视为一个单独的任务,通过多任务学习捕获流域共享和特有特征,联合训练各任务模型参数,提升河流砂重矿物自动分类预测性能.

Liu *et al.* (2019)为了解决网络训练中的类不平衡问题,采用公开矿物数据库RRUFF中的512种矿物的光谱,训练Siamese网络,实现动态谱匹配系统,使用一个参考样本能够对可见类和不可见类进行准确的分类.吴承炜等(2020)通过构建包含匹配样本和不匹配样本的训练数据集,训练基于相似性学习的Siamese网络,在类别数目大、样本数目相对较小的矿物拉曼光谱数据集中取得了较好的结果.

4 研究展望

矿物的识别是地质学、采矿工程等相关学科的基础性的工作.矿物智能识别反映了科学研究与工业需求的前沿需要.机器学习方法显示出在矿物智能识别方面的强大生命力,代表着未来发展的重要方向,值得深入关注.具体而言,机器学习方法中,卷积神经网络对于矿物的图像识别非常有效,随机森林则对于矿物的化学数据分类非常有效.

矿物智能识别的研究难点归纳起来,主要有4方面:(1)地质学与人工智能学科之间还存在巨大的鸿沟.地质学中矿物的含义是可以定性明确描述的,而机器学习是基于数据的,识别过程与标准往往是难以直接解释的,如何克服这两个方面的不同就成了两组研究人员进行交叉研究的最大障碍;(2)缺乏高质量的、可用于学习的同一种矿物数据集.基准数据集对矿物智能识别的研究和创新起着至关重要的作用.基于高质量的基准数据集能够构建更好的判别模型,并支持严格的性能比较.目前,矿物拉曼光谱RRUFF是非常齐全的数据集,已经有很多开创性的工作是基于这个数据集之上的.其他测试方法相比而言缺乏高质量的数据集;(3)机器学习方法在矿物智能识别中仍然处于探索性的早期阶段,缺乏广泛认可、精确

度高、识别迅速的成熟方法。已有的方法通常用于不同对象、不同方法的零星数据集,作者设置自己的标准来评估缺乏标准答案情况下的性能,这使得很难准确地比较每种方法的检测性能、优点和缺点,从而阻碍了最新检测方法的应用和更迭;(4)矿物智能识别的研究目标局限于可获得数据,因此其推广的有效性还有待进一步检验。地球已知矿物有 5 000 多种,在不同条件下,对同一种矿物进行实验分析获取的数据也不完全相同。根据现有数据训练分类识别模式,是否能推广至其他未见的数据,还有待于进一步的研究实验。

机器学习在矿物智能识别中的使用正在迅速增长,但仍处于早期阶段,还有很多工作要做。未来的工作需要重点关注以下 4 方面:(1)更广泛地采用开放科学原则,如开放合作、开放数据、开放源码。地球科学家和机器学习研究人员之间的密切合作将有助于机器学习与地球科学应用的快速推进,从数据中提取具有最大价值、能够在有限的标签下学习的算法,将会更好地促进机器学习在矿物智能识别方面的快速发展;(2)根据需要采用合适的测试方法获取信息,创建规范、完整的矿物基准数据集,在基准数据集上实现严格的性能比较;(3)进一步探索和完善适合矿物智能识别的方法,针对不同的目标和对象,采取适用于不同场景、不同科学问题、不同数据、不同应用的方法。(4)构建领域知识与机器学习识别方法的桥梁,增进模型可解释性。目前,在智能识别中表现突出的卷积神经网络和随机森林方法,其可解释性还有待增强。

笔者坚信,随着机器学习方法的快速发展和地球科学领域对地学数据的日益重视(Bergen *et al.*, 2019),矿物智能识别将迎来快速发展的新时代。

致谢:感谢姜峰、李娜、蒋智威、郭荣华、赖文、董小龙先后参与本项工作,感谢三位匿名评审人提出的富有建设性的审稿意见,特此一并致谢!

References

Akkaş, E., Akin, L., Evren Çubukçu, H., et al., 2015. Application of Decision Tree Algorithm for Classification and Identification of Natural Minerals Using SEM-EDS. *Computers & Geosciences*, 80: 38–48. <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2015.03.015>

Ali, A., Khan, M. Z., Rehan, I., et al., 2016. Quantitative Classification of Quartz by Laser Induced Breakdown Spectroscopy in Conjunction with Discriminant Function Analysis. *Journal of Spectroscopy*, 2016: 1–7. <https://doi.org/10.1155/2016/1835027>

Aligholi, S., Khajavi, R., Razmara, M., 2015. Automated Mineral Identification Algorithm Using Optical Properties of Crystals. *Computers & Geosciences*, 85: 175–183. <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2015.09.014>

Aligholi, S., Lashkaripour, G. R., Khajavi, R., et al., 2017. Automatic Mineral Identification Using Color Tracking. *Pattern Recognition*, 65: 164–174. <https://doi.org/10.1016/j.patcog.2016.12.012>

Alvey, D. C., Morton, K., Harmon, R. S., et al., 2010. Laser-Induced Breakdown Spectroscopy-Based Geochemical Fingerprinting for the Rapid Analysis and Discrimination of Minerals: The Example of Garnet. *Applied Optics*, 49(13): 168–180. <https://doi.org/10.1364/AO.49.00C168>

Anderson, T. I., Vega, B., Kovscek, A. R., 2020. Multimodal Imaging and Machine Learning to Enhance Microscope Images of Shale. *Computers & Geosciences*, 145: 104593. <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2020.104593>

Baykan, N. A., Yılmaz, N., 2010. Mineral Identification Using Color Spaces and Artificial Neural Networks. *Computers & Geosciences*, 36(1): 91–97. <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2009.04.009>

Bergen, K. J., Johnson, P. A., de Hoop, M. V., et al., 2019. Machine Learning for Data-Driven Discovery in Solid Earth Geoscience. *Science*, 363(6433): eaau0323. <https://doi.org/10.1126/science.aau0323>

Borges, H. P., de Aguiar, M. S., 2019. Mineral Classification Using Machine Learning and Images of Microscopic Rock Thin Section. Mexican International Conference on Artificial Intelligence: Advances in Soft Computing, Cham.

Carey, C., Boucher, T., Mahadevan, S., et al., 2015. Machine Learning Tools For mineral Recognition and Classification from Raman Spectroscopy. *Journal of Raman Spectroscopy*, 46(10): 894–903. <https://doi.org/10.1002/jrs.4757>

Clegg, S. M., Sklute, E., Dyar, M. D., et al., 2009. Multivariate Analysis of Remote Laser-Induced Breakdown Spectroscopy Spectra Using Partial Least Squares, Principal Component Analysis, and Related Techniques. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 64(1): 79–88. <https://doi.org/10.1016/j.sab.2008.10.045>

- Clelland, W. D., Fens, T. W., 1991. Automated Rock Characterization with SEM/Image - Analysis Techniques. *SPE Formation Evaluation*, 6(4): 437-443. <https://doi.org/10.2118/20920-pa>
- Cochrane, C. J., Blackberg, J., 2015. A Fast Classification Scheme in Raman Spectroscopy for the Identification of Mineral Mixtures Using a Large Database with Correlated Predictors. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 53(8): 4259-4274. <https://doi.org/10.1109/TGRS.2015.2394377>
- Dyar, M. D., Carosino, M. L., Breves, E. A., et al., 2012. Comparison of Partial Least Squares and Lasso Regression Techniques as Applied to Laser - Induced Breakdown Spectroscopy of Geological Samples. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 70: 51-67. <https://doi.org/10.1016/j.sab.2012.04.011>
- El Haddad, J., de Lima Filho, E. S., Vanier, F., et al., 2019. Multiphase Mineral Identification and Quantification by Laser-Induced Breakdown Spectroscopy. *Minerals Engineering*, 134: 281-290. <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2019.02.025>
- Flesche, H., Nielsen, A. A., Larsen, R., 2000. Supervised Mineral Classification with Semiautomatic Training and Validation Set Generation in Scanning Electron Microscope Energy Dispersive Spectroscopy Images of Thin Sections. *Mathematical Geology*, 32(3): 337-366. <https://doi.org/10.1023/A:1007538028119>
- Gallagher, M., Deacon, P., 2002. Neural Networks and the Classification of Mineralogical Samples Using X-Ray Spectra. Proceedings of the 9th International Conference on Neural Information Processing, Singapore.
- Gibbons, E., Léveillé, R., Berlo, K., 2020. Data Fusion of Laser-Induced Breakdown and Raman Spectroscopies: Enhancing Clay Mineral Identification. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 170: 105905. <https://doi.org/10.1016/j.sab.2020.105905>
- Gomes, O. D. F. M., Iglesias, J. C. A., Paciornik, S., et al., 2013. Classification of Hematite Types in Iron Ores through Circularly Polarized Light Microscopy and Image Analysis. *Minerals Engineering*, 52: 191-197. <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2013.07.019>
- Gomes, O., Paciornik, S., Iglesias, J. C. A., 2010. A Simple Methodology for Identifying Hematite Grains under Polarized Reflected Light Microscopy. Proceedings of 17th International Conference on Systems, Signals and Image Processing, IWSSIP, Rio de Janeiro.
- Gu, Y., 2003. Automated Scanning Electron Microscope Based Mineral Liberation Analysis an Introduction to JKMRC/FEI Mineral Liberation Analyser. *Journal of Minerals and Materials Characterization and Engineering*, 2(1): 33-41. <https://doi.org/10.4236/jmmce.2003.21003>
- Guo, Y. J., Zhou, Z., Lin, H. X., et al., 2020. The Mineral Intelligence Identification Method Based on Deep Learning Algorithms. *Earth Science Frontiers*, 27(5): 39-47 (in Chinese with English abstract).
- Hao, H. Z., Guo, R. H., Gu, Q., et al., 2019. Machine Learning Application to Automatically Classify Heavy Minerals in River Sand by Using SEM/EDS Data. *Minerals Engineering*, 143: 105899. <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2019.105899>
- Harmon, R. S., Remus, J., McMillan, N. J., et al., 2009. LIBS Analysis of Geomaterials: Geochemical Fingerprinting for the Rapid Analysis and Discrimination of Minerals. *Applied Geochemistry*, 24(6): 1125-1141. <https://doi.org/10.1016/j.apgeochem.2009.02.009>
- Holden, E. J., Moss, S., Russell, J. K., et al., 2009. An Image Analysis Method to Determine Crystal Size Distributions of Olivine in Kimberlite. *Computational Geosciences*, 13(3): 255-268. <https://doi.org/10.1007/s10596-008-9115-9>
- Iglesias, J. C. Á., Santos, R. B. M., Paciornik, S., 2019. Deep Learning Discrimination of Quartz and Resin in Optical Microscopy Images of Minerals. *Minerals Engineering*, 138: 79-85. <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2019.04.032>
- Ishikawa, S. T., Gulick, V. C., 2013a. An Automated Classification of Mineral Spectra. 44th Lunar and Planetary Science Conference, The Woodlands.
- Ishikawa, S. T., Gulick, V. C., 2013b. An Automated Mineral Classifier Using Raman Spectra. *Computers & Geosciences*, 54: 259-268. <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2013.01.011>
- Itano, K., Ueki, K., Iizuka, T., et al., 2020. Geochemical Discrimination of Monazite Source Rock Based on Machine Learning Techniques and Multinomial Logistic Regression Analysis. *Geosciences*, 10(2): 63. <https://doi.org/10.3390/geosciences10020063>.
- Iyas, M. R., Setiawan, N. I., Warmada, I. W., 2020. Mask R-CNN for Rock-Forming Minerals Identification on Petrography, Case Study at Monterado, West Kalimantan. *E3S Web of Conferences*, 200: 06007. <https://doi.org/10.1051/e3sconf/202020006007>
- Izadi, H., Sadri, J., Bayati, M., 2017. An Intelligent System for Mineral Identification in Thin Sections Based on a Cascade Approach. *Computers & Geosciences*, 99:

- 37–49. <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2016.10.010>
- Izadi, H., Sadri, J., Mehran, N. A., 2013. Intelligent Mineral Identification Using Clustering and Artificial Neural Networks Techniques. First Iranian Conference on Pattern Recognition and Image Analysis (PRIA), Birjand.
- Khajehzadeh, N., Haavisto, O., Koresaar, L., 2016. On-Stream and Quantitative Mineral Identification of Tailoring Slurries Using LIBS Technique. *Minerals Engineering*, 98: 101–109. <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2016.08.002>
- Larsen, R., Nielsen, A. A., Flesche, H., 2000. Sensitivity Study of a Semi-Automatic Training Set Generator. *Pattern Recognition Letters*, 21(13–14): 1175–1182. [https://doi.org/10.1016/S0167-8655\(00\)00079-9](https://doi.org/10.1016/S0167-8655(00)00079-9)
- Launeau, P., Cruden, A. R., Bouchez, J. L., 1994. Mineral Recognition in Digital Images of Rocks: A New Approach Using Multichannel Classification. *The Canadian Mineralogist*, 32(4): 919–933.
- Li, M. C., Liu, C. Z., Zhang, Y., et al., 2020. A Deep Learning and Intelligent Recognition Method of Image Data for Rock Mineral and Its Implementation. *Geotectonica et Metallogenia*, 44(2): 203–211 (in Chinese with English abstract).
- Li, N., Hao, H. Z., Gu, Q., et al., 2017. A Transfer Learning Method for Automatic Identification of Sandstone Microscopic Images. *Computers & Geosciences*, 103: 111–121. <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2017.03.007>
- Li, N., Hao, H. Z., Jiang, Z. W., et al., 2020. A Multi-Task Multi-Class Learning Method for Automatic Identification of Heavy Minerals from River Sand. *Computers & Geosciences*, 135: 104403. <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2019.104403>
- Liu, J. C., Gibson, S. J., Mills, J., et al., 2019. Dynamic Spectrum Matching with One-Shot Learning. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 184: 175–181. <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2018.12.005>
- Liu, J., Osadchy, M., Ashton, L., et al., 2017. Deep Convolutional Neural Networks for Raman Spectrum Recognition: A Unified Solution. *The Analyst*, 142(21): 4067–4074. <https://doi.org/10.1039/c7an01371j>
- Liu, X. K., Song, H. J., 2020. Automatic Identification of Fossils and Abiotic Grains during Carbonate Microfacies Analysis Using Deep Convolutional Neural Networks. *Sedimentary Geology*, 410: 105790. <https://doi.org/10.1016/j.sedgeo.2020.105790>
- Lopez-Reyes, G., Sobron, P., Lefebvre, C., et al., 2014. Multivariate Analysis of Raman Spectra for the Identification of Sulfates: Implications for ExoMars. *American Mineralogist*, 99(8–9): 1570–1579. <https://doi.org/10.2138/am.2014.4724>
- Lou, W., Zhang, D. X., Bayless, R. C., 2020. Review of Mineral Recognition and Its Future. *Applied Geochemistry*, 122: 104727. <https://doi.org/10.1016/j.apgeochem.2020.104727>
- Maitre, J., Bouchard, K., Bédard, L. P., 2019. Mineral Grains Recognition Using Computer Vision and Machine Learning. *Computers & Geosciences*, 130: 84–93. <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2019.05.009>
- Marschallinger, R., 1997. Automatic Mineral Classification in the Macroscopic Scale. *Computers & Geosciences*, 23(1): 119–126. [https://doi.org/10.1016/S0098-3004\(96\)00074-X](https://doi.org/10.1016/S0098-3004(96)00074-X)
- Marschallinger, R., Hofmann, P., 2010. The Application of Object Based Image Analysis to Petrographic Micrographs. In: Méndez-Vilas, A., Diaz, J., eds., *Microscopy: Science, Technology, Applications and Education*. Formatex Research Center, Badajoz.
- Nie, J. S., Peng, W. B., 2014. Automated SEM - EDS Heavy Mineral Analysis Reveals no Provenance Shift between Glacial Loess and Interglacial Paleosol on the Chinese Loess Plateau. *Aeolian Research*, 13: 71–75. <https://doi.org/10.1016/j.aeolia.2014.03.005>
- Nielsen, A. A., Flesche, H., Larsen, R., et al., 1998. Semi-Automatic Supervised Classification of Minerals from X - Ray Mapping Images. Proceedings of the Fourth Annual Conference of the International Association of Mathematical Geology, Ischia.
- Peng, W.H., Bai, L., Shang, S.W., et al., 2019. Common Mineral Intelligent Recognition Based on Improved InceptionV3. *Geological Bulletin of China*, 38(12): 2059–2066 (in Chinese with English abstract).
- Pires de Lima, R., Duarte, D., Nicholson, C., et al., 2020. Petrographic Microfacies Classification with Deep Convolutional Neural Networks. *Computers & Geosciences*, 142: 104481. <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2020.104481>
- Ramil, A., López, A. J., Pozo-Antonio, J. S., et al., 2018. A Computer Vision System for Identification of Granite-Forming Minerals Based on RGB Data and Artificial Neural Networks. *Measurement*, 117: 90–95. <https://doi.org/10.1016/j.measurement.2017.12.006>
- Reid, A., Gottlieb, P., Macdonald, K. J., et al., 1985. QEM*SEM Image Analysis of Ore Minerals: Volume Fraction, Liberation and Observational Variances. Applied Mineralogy, Proceedings of the Second Interna-

- tional Congress on Applied Mineralogy in the Minerals Industry, Los Angeles.
- Remus, J. J., Harmon, R. S., Hark, R. R., et al., 2012. Advanced Signal Processing Analysis of Laser-Induced Breakdown Spectroscopy Data for the Discrimination of Obsidian Sources. *Applied Optics*, 51(7): B65—B73.
- Ross, B. J., Fueten, F., Yashkir, D. Y., 2001. Automatic Mineral Identification Using Genetic Programming. *Machine Vision and Applications*, 13(2): 61—69. <https://doi.org/10.1007/PL00013273>
- Ruisanchez, I., Potokar, P., Zupan, J., et al., 1996. Classification of Energy Dispersion X-Ray Spectra of Mineralogical Samples by Artificial Neural Networks. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 36(2): 214—220. <https://doi.org/10.1021/ci950068b>
- Sandmann, D., 2015. Method Development in Automated Mineralogy (Dissertation). University of Freiberg, Freiberg.
- Sevetlidis, V., Pavlidis, G., 2019. Effective Raman Spectra Identification with Tree-Based Methods. *Journal of Cultural Heritage*, 37: 121—128. <https://doi.org/10.1016/j.culher.2018.10.016>
- Singh, J. P., Thakur, S. N., 2007. Laser-Induced Breakdown Spectroscopy. Elsevier, Amsterdam.
- Stefaniak, E. A., Worobiec, A., Potgieter-Vermaak, S., et al., 2006. Molecular and Elemental Characterisation of Mineral Particles by Means of Parallel Micro-Raman Spectrometry and Scanning Electron Microscopy/Energy Dispersive X-Ray Analysis. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 61(7): 824—830. <https://doi.org/10.1016/j.sab.2006.04.009>
- Tang, D. G., Milliken, K. L., Spikes, K. T., 2020. Machine Learning for Point Counting and Segmentation of Arenite in Thin Section. *Marine and Petroleum Geology*, 120: 104518. <https://doi.org/10.1016/j.marpetgeo.2020.104518>
- Thompson, S., Fueten, F., Bockus, D., 2001. Mineral Identification Using Artificial Neural Networks and the Rotating Polarizer Stage. *Computers & Geosciences*, 27(9): 1081—1089. [https://doi.org/10.1016/S0098-3004\(00\)00153-9](https://doi.org/10.1016/S0098-3004(00)00153-9)
- Tiwary, A. K., Ghosh, S., Singh, R., et al., 2020. Automated Coal Petrography Using Random Forest. *International Journal of Coal Geology*, 232: 103629. <https://doi.org/10.1016/j.coal.2020.103629>
- Tovey, N. K., Krinsley, D. H., 1991. Mineralogical Mapping of Scanning Electron Micrographs. *Sedimentary Geology*, 75(1—2): 109—123. [https://doi.org/10.1016/0037-0738\(91\)90053-G](https://doi.org/10.1016/0037-0738(91)90053-G)
- Tsuji, T., Yamaguchi, H., Ishii, T., et al., 2010. Mineral Classification from Quantitative X-Ray Maps Using Neural Network: Application to Volcanic Rocks. *Island Arc*, 19(1): 105—119. <https://doi.org/10.1111/j.1440-1738.2009.00682.x>
- Wu, C. W., Shi, R. J., Zeng, W. D., 2020. Mineral Raman Spectral Recognition Based on Siamese Network. *Laser & Optoelectronics Progress*, 57(9): 271—277 (in Chinese with English abstract).
- Xu, S. T., Zhou, Y. Z., 2018. Artificial Intelligence Identification of Ore Minerals under Microscope Based on Deep Learning Algorithm. *Acta Petrologica Sinica*, 34(11): 3244—3252 (in Chinese with English abstract).
- Xu, Y. Y., Li, Z. X., Xie, Z., et al., 2020. Prediction of Copper Mineralization Based on Semi-Supervised Neural Network. *Earth Science*, 45(12): 4563—4573 (in Chinese with English abstract).
- Ye, R. Q., Niu, R. Q., Zhang, L. P., et al., 2011. Mineral Contents Determination and Accuracy Evaluation Based on Classification of Petrographic Images. *Journal of China University of Mining & Technology*, 40(5): 810—815, 822 (in Chinese with English abstract).
- Zhang, X. L., Wu, C. L., Zhou, Q., et al., 2020. Multi-Scale 3D Modeling and Visualization of Super Large Manganese Ore Gathering Area in Guizhou China. *Earth Science*, 45(2): 634—644 (in Chinese with English abstract).
- Zhang, X., Yu, M. X., Zhu, L. Q., et al., 2020. Raman Mineral Recognition Method Based on All-Optical Diffraction Deep Neural Network. *Infrared and Laser Engineering*, 49(10): 168—175 (in Chinese with English abstract).
- Zhang, Y., Li, M. C., Han, S., et al., 2019. Intelligent Identification for Rock-Mineral Microscopic Images Using Ensemble Machine Learning Algorithms. *Sensors*, 19(18): 3914. <https://doi.org/10.3390/s19183914>
- Zhao, Q. M., Wang, R., Teng, Q. Z., et al., 2015. Particle Composition Analysis Based on Rock Slice Orthogonal Polarization Sequence Diagram. *Journal of Terahertz Science and Electronic Information Technology*, 13(2): 285—290 (in Chinese with English abstract).
- Zhao, Y. Y., Shen, Y., Wang, F., 2020. Intelligent Recognition of Ore Minerals Based on CART and PU Algorithm. *Journal of Shenyang Normal University (Natural Science Edition)*, 38(2): 176—182 (in Chinese with English abstract).
- Zuo, R. G., Peng, Y., Li, T., et al., 2021. Challenges of

Geological Prospecting Big Data Mining and Integration Using Deep Learning Algorithms. *Earth Science*, 46(1): 350–358 (in Chinese with English abstract).

Zupan, J. R., Novič, M., Ruisánchez, I., 1997. Kohonen and Counterpropagation Artificial Neural Networks in Analytical Chemistry. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 38(1): 1–23. [https://doi.org/10.1016/S0169-7439\(97\)00030-0](https://doi.org/10.1016/S0169-7439(97)00030-0)

附中文参考文献

郭艳军, 周哲, 林贺洵, 等, 2020. 基于深度学习的智能矿物识别方法研究. *地学前缘*, 27(5): 39–47.

李明超, 刘承照, 张野, 等, 2020. 耦合颜色和纹理特征的矿物图像数据深度学习模型与智能识别方法. *大地构造与成矿学*, 44(2): 203–211.

彭伟航, 白林, 商世为, 等, 2019. 基于改进 InceptionV3 模型的常见矿物智能识别. *地质通报*, 38(12): 2059–2066.

吴承炜, 史如晋, 曾万聃, 2020. 基于 Siamese 网络的矿物拉曼光谱识别. *激光与光电子学进展*, 57(9): 271–277.

徐述腾, 周永章, 2018. 基于深度学习的镜下矿石矿物的智能识别实验研究. *岩石学报*, 34(11): 3244–3252.

徐永洋, 李孜轩, 谢忠, 等, 2020. 基于半监督神经网络的铜矿预测方法. *地球科学*, 45(12): 4563–4573.

叶润青, 牛瑞卿, 张良培, 等, 2011. 基于图像分类的矿物含量测定及精度评价. *中国矿业大学学报*, 40(5): 810–815, 822.

张夏林, 吴冲龙, 周琦, 等, 2020. 贵州超大型锰矿集区的多尺度三维地质建模. *地球科学*, 45(2): 634–644.

张旭, 于明鑫, 祝连庆, 等, 2020. 基于全光衍射深度神经网络的矿物拉曼光谱识别方法. *红外与激光工程*, 49(10): 168–175.

赵启明, 王睿, 滕奇志, 等, 2015. 基于岩石薄片偏光序列图的颗粒成分分析. *太赫兹科学与电子信息学报*, 13(2): 285–290.

赵永翼, 申莹, 王菲, 2020. 基于 CART 和 PU 算法的矿石矿物的智能识别. *沈阳师范大学学报(自然科学版)*, 38(2): 176–182.

左仁广, 彭勇, 李童, 等, 2021. 基于深度学习的地质找矿大数据挖掘与集成的挑战. *地球科学*, 46(1): 350–358.