

激光诱导击穿光谱在地质录井岩性快速识别中的应用

陈兴龙^{1,2} 董凤忠^{2,3} 陶国强⁴ 李油建⁴ 余明军⁴ 付洪波² 倪志波² 王静鸽²
贺文干² 汤玉泉² 饶瑞中^{1,2}

¹ 合肥工业大学仪器科学与光电工程学院, 安徽 合肥 230009

² 中国科学院安徽光学精密机械研究所, 安徽 合肥 230031

³ 中国科学技术大学环境科学与光电技术学院, 安徽 合肥 230026

⁴ 中国石油化工集团公司中原石油工程有限公司录井公司, 河南 濮阳 457001

摘要 激光诱导击穿光谱(LIBS)已经被证明是极具潜力的物质定性、定量分析工具之一。将激光诱导击穿光谱结合自组织映射神经网络技术,引入到石油勘探录井领域,对五类岩心样品(火山灰岩、泥岩、页岩、砂岩、白云岩)进行了岩性自动分类,为以后在录井现场实现岩性在线快速识别奠定基础。使用构造特征变量和主成分分析两种方法对原始光谱进行特征提取,相应的特征参量和主成分分别作为自组织映射神经网络的输入变量。两种输入方式下,神经网络对全部44块岩心样品岩性分类的准确率分别为75%和86%。其中以主成分作为网络输入变量,对火山灰岩、砂岩、白云岩的分类准确率可达100%。实验分析表明:在进一步提高对泥岩和页岩的区分能力后,LIBS有望成为录井领域新的岩性快速识别技术。

关键词 激光光学;激光诱导击穿光谱;自组织映射;特征变量;主成分分析;岩性分类

中图分类号 O433.4; TE19 文献标识码 A doi: 10.3788/CJL201340.1215001

Fast Lithology Identification by Laser-Induced Breakdown Spectroscopy

Chen Xinglong^{1,2} Dong Fengzhong^{2,3} Tao Guoqiang⁴ Li Youjian⁴ She Mingjun⁴
Fu Hongbo² Ni Zhibo² Wang Jingge² He Wengan² Tang Yuquan² Rao Ruizhong^{1,2}

¹ School of Instrument Science & Opto-Electronic Engineering, Hefei University of Technology, Hefei, Anhui 230009, China

² Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei, Anhui 230031, China

³ School of Environment Science and Optoelectronic Technology, University of Science and Technology of China, Hefei, Anhui 230026, China

⁴ Log Branch of Zhongyuan Petroleum Engineering Co. Ltd., Sinopec, Puyang, Henan 457001, China

Abstract Laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) has demonstrated its high potential in both qualitative analysis and quantitative analysis. LIBS combined with self-organizing mapping (SOM) neural network is applied in oil prospecting industry. Some rock core samples, including ash rock, mudstone, shale, sandstone and dolostone, are automatically classified to lay a foundation for lithology on-line identification. Characteristic variables and principal components, which are obtained by feature extraction from raw spectra, are used as inputs of the SOM neural network, respectively. Classification accuracy is 75% and 86% for the two kinds of inputs, respectively. Particularly, all of ash rocks, sandstone and dolostone are classified correctly when principal components are used as the input. The experimental results indicate that LIBS will be capable of fast identification of lithology after improving the

收稿日期: 2013-06-14; 收到修改稿日期: 2013-07-19

基金项目: 国家自然科学基金(11075184)、中国石化集团科技攻关项目(P12084)

作者简介: 陈兴龙(1986—),男,博士研究生,主要从事光谱分析与光电信息处理等方面的研究。

E-mail: xlchen@mail.hfut.edu.cn

导师简介: 董凤忠(1966—),男,研究员,博士生导师,主要从事光纤传感、气体检测、过程控制等方面的研究。

E-mail: fzdong@aiofm.ac.cn(通信联系人,中国光学学会会员号: S040111633)

classification accuracy of mudstone and shale.

Key words laser optics; laser-induced breakdown spectroscopy; self-organizing mapping; characteristic variable; principal component analysis; lithology classification

OCIS codes 070.4790; 140.3440; 300.6365

1 引 言

在石油勘探录井过程中,实时识别所钻岩层岩性,对于了解地下地质状况,认识生油、储油、油气运移、聚集、保存等具有重要意义。目前,录井现场实时识别岩性主要是靠人工方法,即定时从泥浆中捞取钻井所带出来的岩屑样品,洗净烘干后靠地质工作人员镜下肉眼判断,这种传统的岩屑录井方法具有人工主观性。并且,随着钻井工艺的迅速发展,钻井速度越来越快,岩屑颗粒越来越细,导致岩屑采集困难,人工识别效率无法满足新形势下的录井要求。因此,录井领域亟需新的岩性识别方法^[1]。X射线荧光元素录井技术是近年发展起来的一种新型岩性识别技术^[2],但是它的实时性和准确性还不能完全满足要求,只能作为一种辅助手段。

激光诱导击穿光谱(LIBS),利用激光脉冲轰击待分析样品,激发出等离子体,通过分析等离子体光谱来实现待测样品的定性、定量分析。此技术具有无需样品预处理、分析速度快、可以实现现场在线分析等优点,因而可以满足现代录井形势下对快速识别岩性的要求。LIBS技术已经在冶金^[3-7]、环境^[8]、农业^[9]、核工业^[10]、太空^[11]、生物^[12]等诸多领域有了广泛的应用,不同的应用需要不同的光谱数据处理方法。LIBS结合人工神经网络,常常被运用于物质的快速识别与分类。北京理工大学王茜倩等^[13]利用激光诱导击穿光谱结合反向传播神经网络,对七种塑料样品进行分类,取得了不错的效果。捷克马萨里克大学的Gabriela等^[14]利用LIBS快速识别考古发掘中的生物矿物,采用了线性判别分析和反向传播神经网络两种光谱数据处理方法,识别准确率均在75%以上。加拿大空间局的Koujelev等^[15]验证了LIBS结合前馈多层神经网络实时快速进行物质分类的能力,以期未来能够将其用于火星探测上。中国海洋大学的田野等^[16]利用LIBS结合偏最小二乘判别分析(PLS-DA),初步实现了对四种岩屑样品的自动识别。

本文利用激光诱导击穿光谱结合自组织映射(SOM)神经网络对不同岩性的岩心样品进行分类。自组织映射神经网络是一种前馈的无监督网络,它不需要外部提供目标输出,能够主动发现多维数据

集里的聚类结构和关系,将相似的输入映射为同一输出,从而实现对未知事物进行分类的目的^[17]。很多情况下,事先无法获知未知事物的类别信息,在神经网络进行知识学习时无法为其提供目标输出,则无法使用有监督网络。岩石岩性类别繁多,网络学习时事先提供目标类别信息有时很难做到,自组织映射网络可以克服这一困难。自组织映射网络处理岩石样品的激光诱导击穿光谱数据通常需要对光谱数据进行预处理,这里采取了特征参量和主成分分析(PCA)两种预处理方法。

2 实验和方法

2.1 实验装置

图1是实验室LIBS系统装置示意图。脉冲激光器发出的激光脉冲能量为50 mJ,波长为1064 nm,脉宽为7 ns,脉冲重复频率最高可达20 Hz。激光脉冲经过特种光纤传输至焦距300 mm的透镜进行聚焦,轰击待测样品,如此高功率密度的激光脉冲瞬间将轰击区域的样品加热、气化等离子体,等离子体中原子、离子发出的光被透镜组收集耦合至光纤,然后传输至光谱仪,通过分析等离子体光谱,便可以获知样品的成分信息。实验所采用的光谱仪为Avantes公司的四通道微型光谱仪,可探测光谱范围为180~610 nm,光谱分辨精度约为±0.05 nm。宽光谱探测范围保证了能够同时探测岩石中的Si, Al, Fe, Ca, Mg等造岩元素的发射谱线。实验所选择光谱积分时间为1 ms,采集延时相对于激光脉冲延迟1 μs。通过光纤传输光信号,可以在录井现场方便地实现对岩石的实时在线分析。

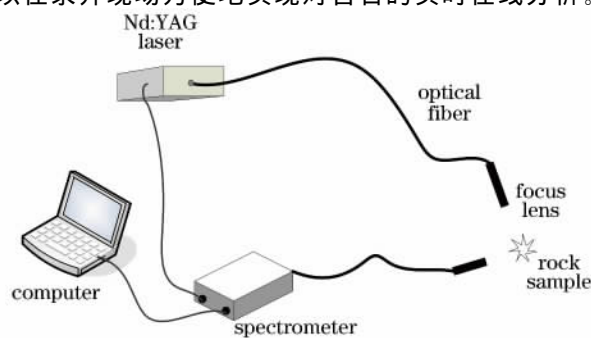


图1 LIBS系统装置示意图

Fig. 1 Schematic experimental setup of LIBS system

44 块不规则块状岩心样品被用来做测试,其中火山灰岩 9 块、泥岩 9 块、页岩 9 块、砂岩 9 块、白云岩 8 块。考虑到岩心样品的成分可能存在不均匀性,对每块样品取五点不同位置进行分析,每个样品

点前五个激光脉冲用来清洁样品表面的氧化层,随后的五个脉冲平均后得到一幅光谱,最后将五点的光谱再进行平均,结果作为此块样品的光谱数据。实验所得的五类岩心样品的典型光谱如图 2 所示。

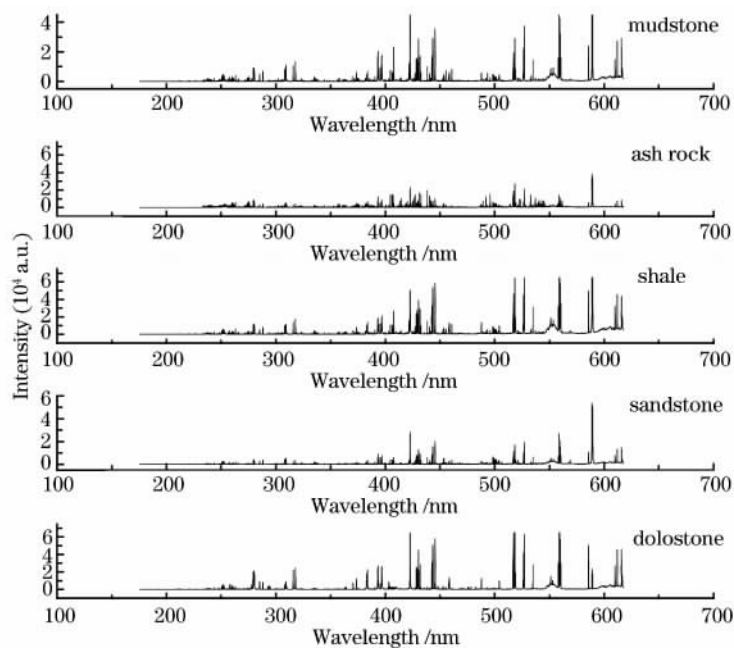


图 2 五种岩石典型的 LIBS 光谱图

Fig. 2 Typical LIBS spectra of five kinds of rocks

2.2 光谱数据处理方法

自组织映射神经网络实际上是一种聚类分析方法,它将一群未经标示的样本作为输入向量,通过竞争层神经元之间的竞争,最终具有最大激励的神经元胜出,具有相似特性的样本导致同一个神经元胜出,从而实现了输入样本的分类。

SOM 神经网络由输入和竞争层构成(图 3)。输入神经元的个数由实际问题决定,每个输入神经元与竞争层神经元是全连接。竞争层同时也是输出层,通常采用二维网格结构,每个神经元与其相邻的

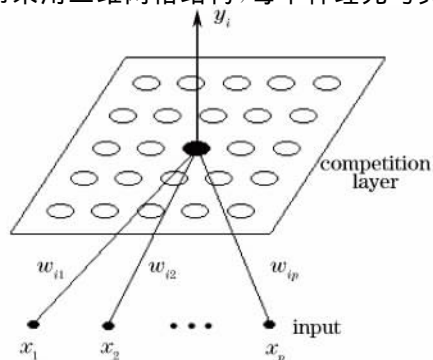


图 3 SOM 神经网络组织结构

Fig. 3 Structure of SOM neural network

神经元全部连接。竞争层神经元个数要大于可能的类别数目。样本集送入神经网络,网络进行自我学习,学习好的网络具备对输入样本进行分类的能力。根据输入样本的岩性,将输入神经元与岩性建立对应关系,即可使网络具备岩性识别功能。

神经网络的一个关键问题就是网络输入的选择。实验所获取的一幅光谱有 8000 多个数据点,若将其全部作为网络输入将导致网络结构异常庞大,计算量巨大,实现困难。事实上,由于组成各种岩石的元素很相近,导致不同岩石的 LIBS 光谱也很相近。对于 SOM 神经网络来说,光谱数据中有大量的冗余信息,故需要对光谱数据进行特征提取,以作为网络的输入。分别采用构造特征变量和主成分分析两种方法来实现光谱数据特征提取。

不同岩石的主要构成元素基本相同,通过元素种类去区分不同岩性很困难。但是不同的岩石中各种元素含量有差异,故考虑由特征元素谱线强度比值来构造特征变量。选取 Si、Al、Ca、Fe 四种主要造岩元素,分析比较不同岩石四种元素发射谱线强度比值的差异,谱线强度比值的差异本质上反映了四种元素含量的差异。元素分析谱线的选择以无明显

自吸收、线型好、干扰小、信噪比高为原则,所选取的谱线如表 1 所示。其中 Si、Al 只选用了一条原子发射谱线,Ca、Fe 分别选用了原子和离子发射谱线。根据此四条谱线构造出三个特征变量,表达为

$$\begin{cases} F_1 = I(\text{Si})/I(\text{Al}) \\ F_2 = I(\text{Ca})/I(\text{Al}), \\ F_3 = I(\text{Fe})/I(\text{Al}) \end{cases} \quad (1)$$

式中谱线强度采用的是峰值强度。这三个特征变量作为 SOM 神经网络的输入。

表 1 所选取的岩石 LIBS 光谱特征谱线

Table 1 Selected analysis lines of rock LIBS spectrum

Elements	Analysis lines /nm
Si	288.15
Al	309.27
Ca	487.81
	315.88
Fe	374.55
	275.57

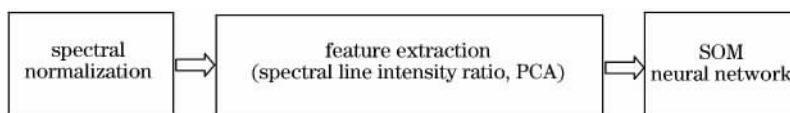


图 4 光谱处理流程

Fig. 4 Flow of spectral data processing

3 结果与讨论

44 块岩石样品被测试,样品按编号 1~9 号为火山灰岩,10~18 号为泥岩,19~27 号为页岩,28~36 号为砂岩,37~44 号为白云岩。样品光谱的获取按前文所述方法进行。

3.1 以特征参量作为网络输入

根据前文所述的构造特征参量的方法,得到 44 个样本的特征参量 F_1 、 F_2 、 F_3 (图 5)。其中 F_1 反映了样品中 Si 含量相对 Al 含量的大小, F_2 反映了样品中 Ca 含量相对 Al 含量的大小, F_3 反映了样品中 Fe 含量相对 Al 含量的大小。从图中可以看出,不同岩石的特征参量有一定变化,其中以 F_1 的变化最为显著。火山灰岩的 F_1 最小, F_2 和 F_3 大致相当。泥岩的 F_3 最大, F_2 最小。页岩的 F_2 、 F_3 和泥岩大致相当, F_1 变化范围较大,和泥岩的 F_1 存在重叠。砂岩的三个特征参量取值很接近。白云岩的 F_1 最大, F_2 最小。由此可以说明,所构造的特征变量能够较好地反映出不同岩石的特性差异。进一步对三个特征变量进行非线性处理,即送入 SOM 神经网络,实现岩石岩性的自动分类。

构造特征变量实际上是在对样本特性有一定了解的情况下,有针对性地提取能够表征样本某些特性的参量,其物理意义是明确的。

主成分分析是一种多元统计分析技术,本质上也是一种特征提取方法。它对原数据变量进行转换,用少数几个新变量去表征原数据变量的数据特征,既排除了原始数据中互相重叠、冗余的信息,还保留了原始数据主要的结构特征。每一个新变量是原变量的线性组合,一个新变量就是一个主成分。理论上,有多少个原始变量就有多少个主成分,但是由于只是前几个主成分捕获了原始数据的方差变异,即解释原数据结构特征的主要集中在前几个主成分上,故选用前几个主成分作为 SOM 神经网络输入向量即可。这实现了对原始光谱数据的降维,使得 SOM 神经网络的网络结构得以简化,计算量极大降低。数据处理流程如图 4 所示。

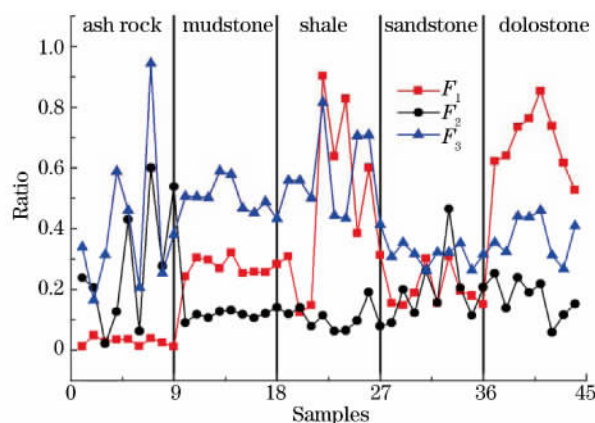


图 5 44 块岩石样品的特征参量变化趋势

Fig. 5 Characteristic variables of 44 rock samples

因为是 3 个特征变量,故网络输入神经元为 3 个,竞争层选用 3×3 二维结构。44 个样品的分类结果如表 2 所示。其中页岩的分类准确率较低,实验结果中页岩和泥岩常常互相混淆。白云岩可以轻易地与其他岩石区分开来,其分类准确率达 100%。

表 2 以特征参量为输入的 SOM 网络对样本的分类结果

Table 2 Classification results of SOM neural network with characteristic variables as inputs

Samples	Quantity	Accurate classification	Accuracy /%
Ash rock	9	7	78
Mudstone	9	6	67
Shale	9	5	56
Sandstone	9	7	78
Dolostone	8	8	100
Total	44	33	75

3.2 以主成分作为网络输入

由于所构造的特征参量仅仅反映 Si、Al、Fe、Ca 四种元素的谱线特征,对光谱信息利用有限,故尝试采用主成分分析提取光谱特征。对 44 幅归一化后的光谱数据做主成分分析后,计算结果显示,前两个主成分解释了样本光谱数据集 92% 的方差变异,前三个主成分解释了 96% 的方差变异,前四个主成分解释了 97% 的方差变异,说明第四个主成分以后所包含有用的数据特征信息已经不多。定义 95% 为最小方差阈值,作为截取主成分数目的准则,即当所选用主成分已经解释了超过 95% 的方差变异,则丢弃剩余的主成分。故实验采用前三个主成分作为后续 SOM 神经网络的输入变量。这里使用的 SOM 神经网络结构和以特征参量为输入的 SOM 神经网络结构完全相同。

对原始光谱主成分分析后获得的前三个主成分 PC₁、PC₂、PC₃ 被绘制在图 6 中。从图中可以看出,不同岩石样本的主成分得分具有聚类性,但是泥岩与页岩存在重叠区域。

将主成分向量送入 SOM 神经网络,网络经过主动学习,逐渐分别将各竞争层神经元权值向量移

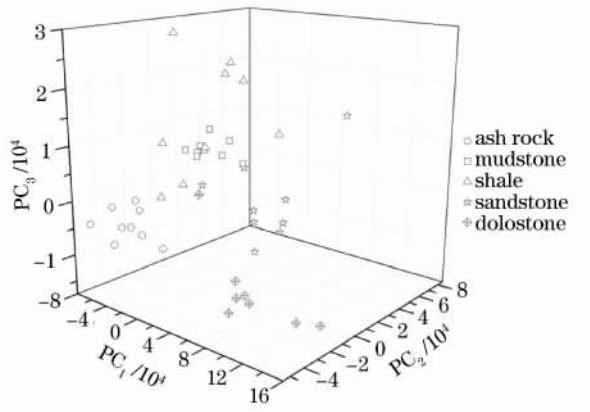


图 6 全部样本光谱的前三个主成分得分图

Fig. 6 Scores of the first three principal components of all sample spectra

动到输入向量的聚类中心。完成学习后的网络对 44 块岩心样品分类结果如表 3 所示。以主成分作为输入,SOM 神经网络对火山灰岩、砂岩、白云岩均实现了 100% 准确分类,但是对于泥岩和页岩常常混为一类。与以特征参量为输入相比,以主成分为输入的分类结果更准确。

表 3 以主成分为输入的 SOM 网络对样本的分类结果

Table 3 Classification results of SOM neural network with principal components as inputs

Samples	Quantity	Accurate classification	Accuracy /%
Ash rock	9	9	100
Mudstone	9	6	67
Shale	9	6	66
Sandstone	9	9	100
Dolostone	8	8	100
Total	44	37	86

从实验结果可以看出,两种光谱特征提取方法对泥岩和页岩的区分效果都不理想。泥岩和页岩的元素组成十分相近,而 LIBS 是一种原子光谱,主要反映构成物质的各种元素的种类和含量。泥岩和页岩的 LIBS 光谱不存在稳定的差异,难以区分。不过,虽然 SOM 神经网络容易把泥岩和页岩混为一类,但是并不会将泥岩、页岩和其他岩石混为一类,即泥岩、页岩被分为同一类:泥页岩。主成分分析配合 SOM 神经网络,对其他各种岩石的分类准确率达到了 100%。

4 结 论

基于激光诱导击穿光谱的 SOM 神经网络对岩石岩性的分类能力得到了验证。LIBS 光谱的特征提取对后续神经网络的性能表现至关重要。基于一定的样本知识,构造特征变量,其物理意义直观,但是不能充分利用光谱信息。主成分分析在对光谱数据降维的同时保留了原始光谱的主要信息,有效提取出了不同岩石光谱的特征差异。以主成分为输入的 SOM 神经网络岩性识别准确率高于以特征变量为输入的 SOM 网络,对火山灰岩、砂岩、白云岩实现了 100% 的准确分类。尽管目前对泥岩和页岩的区分效果不理想,但是 LIBS 由于其快速、可现场在线分析等优点,仍不失为录井领域极具潜力的岩性识别新技术。

参 考 文 献

1 Zhu Yixiang, Shi Guangren. Identification of lithologic

- characteristics of volcanic rocks by support vector machine[J]. *Acta Petrolei Sinica*, 2013, 34(2): 312–322.
- 朱怡翔, 石广仁. 火山岩岩性的支持向量机识别[J]. *石油学报*, 2013, 34(2): 312–322.
- 2 Zhang Guotian, Zheng Xingwei, Wang Dandan, *et al.*. X-ray fluorescence element logging in Liaohe oil-field[J]. *Mud Logging Engineering*, 2012, 23(4): 10–16.
- 张国田, 郑新卫, 王丹丹, 等. X射线荧光元素录井在辽河油田的应用[J]. *录井工程*, 2012, 23(4): 10–16.
- 3 Wang Qi, Liang Yunxian, Chen Xinglong, *et al.*. Experimental investigation on pre-ablation dual-pulse laser-induced Fe plasmas [J]. *Chinese J Lasers*, 2011, 38(12): 1215001.
- 王 琦, 梁云仙, 陈兴龙, 等. 预烧蚀双脉冲激光诱导 Fe 等离子体发射光谱的实验研究[J]. *中国激光*, 2011, 38(12): 1215001.
- 4 Dong Meirong, Lu Jidong, Li Jun, *et al.*. Properties of laser-induced breakdown spectroscopy between liquid steel and solid steel[J]. *Acta Optica Sinica*, 2011, 31(1): 0130002.
- 董美蓉, 陆继东, 李 军, 等. 液相和固相钢铁的激光诱导击穿光谱特性[J]. *光学学报*, 2011, 31(1): 0130002.
- 5 Sun Lanxiang, Yu Haibin, Cong Zhibo, *et al.*. On-line semi-quantitative analysis of molten steel compositions by laser-induced breakdown spectroscopy [J]. *Chinese J Scientific Instrument*, 2011, 32(11): 2602–2608.
- 孙兰香, 于海斌, 丛智博, 等. 利用 LIBS 技术在线半定量分析液态钢成分[J]. *仪器仪表学报*, 2011, 32(11): 2602–2608.
- 6 Fengzhong Dong, Xinglong Chen, Qi Wang, *et al.*. Recent progress on the application of LIBS for metallurgical online analysis in China [J]. *Frontiers of Physics*, 2012, 7(6): 679–689.
- 7 Chen Xinglong, Dong Fengzhong, Wang Qi, *et al.*. Quantitative analysis of slag by calibration-free laser-induced breakdown spectroscopy[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2011, 31(12): 3289–3293.
- 陈兴龙, 董凤忠, 王 琦, 等. 自由定标激光诱导击穿光谱技术在炉渣成分定量分析中的应用[J]. *光谱学与光谱分析*, 2011, 31(12): 3289–3293.
- 8 Rai Nilesh K, Rai A K. LIBS: an efficient approach for the determination of Cr in industrial wastewater[J]. *J Hazardous Materials*, 2008, 150(3): 835–838.
- 9 J B Sirven, B Bousquet, L Canioni, *et al.*. Qualitative and quantitative investigation of chromium-polluted soils by laser-induced breakdown spectroscopy combined with neural networks analysis[J]. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 2006, 385(2): 256–262.
- 10 Arnab Sarkar, Vijay M Telmore, Devanathan Alamelu, *et al.*. Laser induced breakdown spectroscopic quantification of platinum group metals in simulated high level nuclear waste [J]. *J Analytical Atomic Spectrometry*, 2009, 24(11): 1545–1550.
- 11 Grégory Bazalgette Courrèges-Lacoste, Berit Ahlers, Fernando Rull Pérez. Combined Raman spectrometer/laser-induced breakdown spectrometer for the next ESA mission to Mars[J]. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2007, 68(4): 1023–1028.
- 12 Ma Shuang, Gao Xun, Guo Kaimin, *et al.*. Analysis of the element content in poplar tree leaves by femtosecond laser-induced breakdown spectroscopy[J]. *Science China Physics, Mechanics and Astronomy*, 2011, 54(11): 1953–1957.
- 13 Wang Qianqian, Huang Zhiwen, Liu Kai, *et al.*. Classification of plastics with laser-induced breakdown spectroscopy based on principal component analysis and artificial neural network model [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2012, 32(12): 3179–3182.
- 王茜倩, 黄志文, 刘 凯, 等. 基于主成分分析和人工神经网络的激光诱导击穿光谱塑料分类识别方法研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2012, 32(12): 3179–3182.
- 14 Vitková Gabriela, Karel Novotný, Lubomir Prokeš, *et al.*. Fast identification of biominerals by means of stand-off laser-induced breakdown spectroscopy using linear discriminant analysis and artificial neural networks [J]. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 2012, 73: 1–6.
- 15 A Koujelev, M Sabsabi, V Motto-Ros, *et al.*. Laser-induced breakdown spectroscopy with artificial neural network processing for material identification[J]. *Planetary and Space Science*, 2010, 58(4): 682–690.
- 16 Tian Ye, Wang Zhennan, Hou Huaming, *et al.*. Study of cuttings identification using laser-induced breakdown spectroscopy [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2012, 32(8): 2027–2031.
- 田 野, 王振南, 侯华明, 等. 基于激光诱导击穿光谱的岩屑识别方法研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2012, 32(8): 2027–2031.
- 17 Liu Yanjie, Zeng Yongnian. Research on remote sensing classification of urban land coverage based on SOM neural network[J]. *Geomatics & Space Information Technology*, 2012, 35(6): 42–48.
- 刘艳杰, 曾永年. 基于 SOM 神经网络的城市土地覆盖遥感分类研究[J]. *测绘与空间地理信息*, 2012, 35(6): 42–48.

栏目编辑: 何卓铭