第16卷第11期
2026年11月

中国无机分析化学
Chinese Journal of Inorganic Analytical Chemistry

Vol. 16, No. 11
2057～2067

doi: 10. 20236/j. CJIAC. 2026. 11. 009

王旭，杨清波. 基于旗鱼优化算法-支持向量回归(SFOA-SVR)的激光诱导击穿光谱(LIBS)定量分析煤灰组分[J]. 中国无机分析化学，2026，16(11)：2057-2067.

Wang Xu, Yang Qingbo. Quantitative Analysis of Coal Ash Composition by Laser-induced Breakdown Spectroscopy Based on SFOA-SVR[J]. Chinese Journal of Inorganic Analytical Chemistry, 2026, 16(11): 2057-2067.

基于旗鱼优化算法-支持向量回归(SFOA-SVR)的激光诱导击穿光谱(LIBS)定量分析煤灰组分

王 旭　杨清波

（许昌电气职业学院 信息工程学院，河南 许昌 461002）

摘　要　煤灰成分的快速准确测定对燃煤锅炉结渣预测、煤炭分级利用及固废资源化具有重要意义。激光诱导击穿光谱(Laser-induced Breakdown Spectroscopy，LIBS)技术无需复杂前处理，且可实现多元素同步分析，在煤质在线检测领域备受关注。然而，煤灰基体效应显著，光谱响应与组分含量之间呈现复杂的非线性关系，传统线性模型的定量准确度难以满足工业应用需求，亟待发展高精度非线性校正方法。本研究提出一种基于旗鱼优化算法(Sailfish Optimization Algorithm，SFOA)的优化支持向量回归(Support Vector Regression，SVR)的LIBS定量分析策略，旨在突破基体干扰瓶颈，实现煤灰多组分含量的同步精准检测。系统收集了来自电厂除尘器灰斗的120份煤灰样本，涵盖SiO_2、Al_2O_3、Fe_2O_3、CaO、MgO、TiO_2等主要氧化物，经粉末压片后采集LIBS光谱。以分析线净峰面积作为PLSR模型的输入，以全谱数据作为SFOA-SVR和PSO-SVR模型的输入，利用SFOA自适应寻优SVR的惩罚系数与核参数，建立了SFOA-SVR多组分校准模型，并与偏最小二乘回归(Partial Least Squares Regression，PLSR)和粒子群优化的SVR进行对比。结果表明：SFOA-SVR对测试集的SiO_2、Al_2O_3、Fe_2O_3、CaO、MgO、TiO_2六种主要组分的预测决定系数(R^2)和均方根误差(RMSE)分别达到0. 974 2和1. 1006%，预测优于PLSR，收敛速度与预测稳定性均优于PSO-SVR。采用煤灰成分分析标准物质(GBW08401)进行验证，组分预测的R^2和RMSE分别为0. 970 4和1. 8214%。所提方法通过SFOA智能调参有效校正了光谱与组分间的非线性基体效应，显著提升了LIBS煤灰组分检测的准确度与泛化能力，为煤炭工业快速在线分析提供了一种可行的技术方案。

关键词　激光诱导击穿光谱；煤灰；旗鱼优化算法；支持向量回归；定量分析

要点

1）首次将SFOA-SVR用于解耦煤灰LIBS强非线性基体效应。

2）所有组分整体预测R^2>0. 96，预测性能优于PLSR和PSO-SVR。

3）采用独立标准物质验证了SFOA-SVR模型与激光诱导击穿光谱技术联用的可靠性。

中图分类号：O657. 38　O433. 5　　**文献标志码**：A　　**文章编号**：2095-1035(2026)11-2057-11

收稿日期：2026-06-04　**修回日期**：2026-06-18　**录用日期**：2026-06-19　**在线出版日期**：2026-06-23

Received：2026-06-04　**Revised**：2026-06-18　**Accepted**：2026-06-19　**Online published**：2026-06-23

基金项目：河南省重点研发与推广专项项目(232400410357)；中国高校产学研创新基金资助项目(2021ITA09018)；河南省普通高校就业创业课题(JYB2025120)

Fund：Supported by the Henan Key R & D and Promotion Project (232400410357)；China University Industry Research Innovation Fund (2021ITA09018)；Henan University Employment and Entrepreneurship Project (JYB2025120)

作者简介：王旭，男，副教授，主要从事机器学习与大数据研究。E-mail：wangxu8203@126. com

Author：Wang Xu, male, associate professor, mainly engaged in machine learning and big data research. E-mail：wangxu8203@126. com

©Chinese Journal of Inorganic Analytical Chemistry Editorial Department 2026. This is an open access article under the CC-BY-NC-ND 4. 0 License.

煤炭是全球工业发展的核心能源，其清洁高效利用始终是能源领域的重大研究课题。煤灰是煤炭燃烧后的无机残留物，其化学组成直接影响锅炉的结渣特性、换热效率及飞灰资源化途径[1]，因此煤灰组分的快速、准确测定对燃煤电厂运行优化和固废资源化具有重要工程价值[2]。然而，煤炭及其灰分属于高度异质性的复杂基体，传统分析方法如X射线荧光光谱(X-ray Fluorescence Spectrometry，XRF)[3]和电感耦合等离子体质谱法[4]，虽具备较高准确度，却普遍存在前处理繁琐、检测周期长等不足，难以满足工业生产中在线实时监测的需求。近年来，激光诱导击穿光谱(Laser-induced Breakdown Spectroscopy，LIBS)技术凭借其无需复杂前处理、全元素同步分析和可在线检测等突出优势，已成为煤炭及煤灰快速分析领域的研究热点[5]。杨海能等[6]系统综述了LIBS在煤质分析中的研究进展，指出该技术已逐步构建起覆盖系统搭建、数据处理和工程应用的完整技术路线。然而，煤炭中高碳异质性引发的等离子体激发不稳定、谱线干扰严重和非线性效应突出等问题，仍是制约LIBS定量分析准确度的核心瓶颈[7-10]。因此，突破基体效应带来的非线性校准难题，是实现LIBS在煤灰检测中从实验室可行性走向工业应用的关键。

面对上述挑战，国内外学者从化学计量学建模层面进行了广泛探索。Wang等[11]将最小二乘支持向量机应用于LIBS煤质多参数预测，对碳元素的决定系数(Coefficient of Determination，R^2)达到0.994 0，证明了非线性机器学习方法较传统线性模型具有显著优势。Niu等[12]从光谱信息维度拓展的视角出发，提出了时空双维融合光谱映射方法，通过构建高光谱图谱来解耦基体效应，使煤质指标的验证集R^2提升至0.99，均方根误差降低66%以上。崔佳诚等[13]将物理域知识与统计建模相结合，提出了主导因素-多层感知机方法，在煤的灰分和挥发分预测中较传统支持向量回归(Support Vector Regression，SVR)方法分别降低均方根误差23.13%和5.99%，揭示了融入光谱物理机理是提升模型鲁棒性的有效策略。此外，SVR作为一种擅长处理小样本、非线性问题的回归方法，在LIBS定量分析中展现了良好的应用前景。多项研究表明，SVR在LIBS地质样品元素分析中能有效克服谱线冗余和基体干扰，其性能优于偏最小二乘回归(Partial Least Squares Regression，PLSR)等传统线性方法[14]。值得指出的是，SVR的预测性能高度依赖于惩罚系数C和核参数γ的选取，手动调参不仅效率低下，且难以逼近全局最优解，这一不足限制了SVR在复杂基体体系中的定量表现。

近年来，群体智能优化算法在光谱分析参数优化中的应用日益受到关注，为突破上述瓶颈提供了新的技术思路。旗鱼优化算法(Sailfish Optimizer Algorithm，SFOA)是2019年提出的一种模拟旗鱼群体合作捕食行为的元启发式算法，通过精英旗鱼引导和交替攻击策略实现高维搜索空间中的全局寻优，具有收敛速度快、不易陷入局部最优等优势[15]。在光谱定量分析领域，智能优化算法与SVR的结合已初步展现出巨大潜力。黄杰等[16]针对SF_6电气设备中CO_2浓度激光吸收光谱反演问题，提出了基于改进旗鱼优化算法(Improved Sailfish Optimizer Algorithm，ISFO)优化核极限学习机(Kernel Extreme Learning Machine，KELM)的CO_2浓度反演模型(ISFO-KELM)，ISFO-KELM模型在精度和鲁棒性上均优于传统的最小二乘法、极限学习机和BP神经网络，验证了改进SFOA在光谱定量分析中的技术可行性。Li等[17]提出了一种ISFO优化SVR的方法，用于绝缘栅双极型晶体管结温的准确预测，改进SFOA-SVM模型在预测精度和计算效率方面均优于传统的网格搜索和粒子群算法，为SFOA在机器学习回归参数优化中的应用提供了验证。上述研究充分表明，群体智能优化SVR的框架在光谱非线性校正中具有良好的泛化能力和实用化潜力。然而，将SFOA-SVR算法应用于LIBS煤灰这一基体更为复杂、谱线干扰更为严重的体系，迄今鲜有报道。基于上述分析，本文针对LIBS煤灰组分定量分析中基体效应导致的光谱-组分非线性响应问题，提出一种基于旗鱼优化算法(SFOA)自适应寻优SVR超参数的智能校准方法。本研究采集多个来源的实际煤灰样品，经均质化预处理后，系统采集LIBS光谱数据，构建SFOA-SVR多组分定量模型，并与传统PLSR和粒子群优化支持向量回归(Particle Swarm Optimization Support Vector Regression，PSO-SVR)模型进行全面对比，最终以煤飞灰成分分析标准物质(GBW08401)进行独立验证，旨在为煤灰快速在线分析提供一种高精度、强泛化的技术方案。

1 实验部分

1.1 实验系统

LIBS实验系统如图1所示。激发源为调Q Nd:YAG脉冲激光器(Quantel CFR400，法国)，基频波长1 064 nm，最大脉冲持续时间为13 ns，重复频率

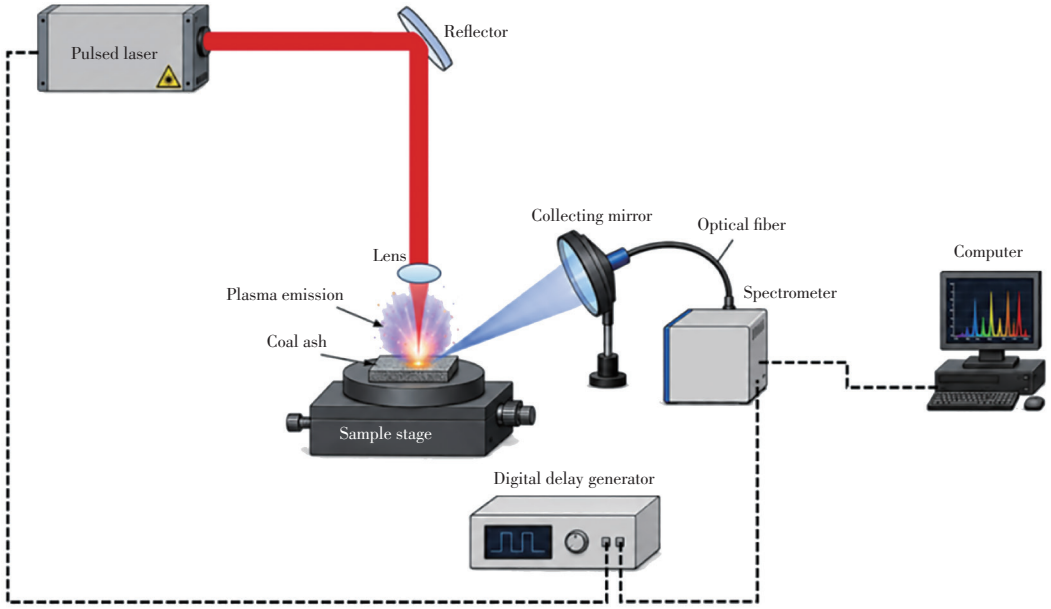


图1　LIBS实验系统光路示意图

Figure 1　Schematic diagram of the optical path of the LIBS experimental system.

为1～20 Hz，最高单脉冲能量400 mJ。脉冲激光经过反射镜反射后射入焦距为150 mm的平凸透镜，透镜垂直聚焦于样品表面，光斑直径约200 μm。等离子体发射光由与激光光路呈45°角放置的信号收集镜收集，耦合至爱万提斯光谱仪(型号AvaSpec-2048-USB1)，分辨率为0.04～20 nm，单次采集覆盖波长范围190～720 nm。利用数字延时发生器(DG645，Stanford Research Systems)精确控制激光脉冲与ICCD门控之间的延迟时间和门宽。样品放置于三维精密平移台上，可在X-Y方向实现步进扫描，保证每次脉冲作用于新鲜表面。

1.2　样品制备

1.2.1　模拟煤灰样本

为确保所建模型具有广泛的代表性和泛化能力，本研究收集了来自河南省内主要火力发电厂的120份煤灰样本。所有样本均采集于电厂除尘器灰斗，每份原始样本的现场采集质量不少于2 kg，密封保存运回实验室。采用四分法缩分后，一部分用于成分分析与物性测试，另一部分密封保存备用。要求120份样本覆盖不同挥发分、灰分及硫含量的原煤所产生的飞灰，以反映燃烧前端的差异性。全部样本经105 ℃干燥至恒重，研磨过200目(75 μm)筛后均匀化处理，考虑到实际煤灰样品存在组分分布不均的问题，每份样品均经过充分研磨、过筛及混合，以确保样品的均匀性，降低后续XRF定值及LIBS采集的随机误差，如图2所示。

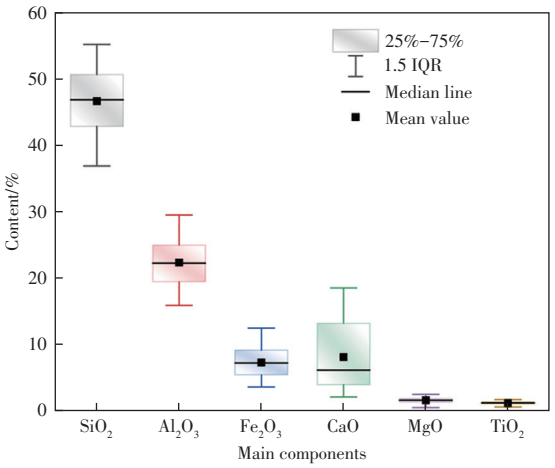


图2　120份煤灰样本主要元素含量的箱线图

Figure 2　Box plot of main element contents in 120 coal ash samples.

将组分均匀的粉末置于直径13 mm的不锈钢模具中，在20 MPa压力下保持3 min，制成致密圆片状样品。共制备模拟煤灰样本120个，其中100个作为训练集，训练集内部与折交叉验证，另外20个留出测试样本。

1.2.2　标准物质与验证样本

为检验模型对真实煤灰基体的泛化能力，选用煤飞灰成分分析标准物质(GBW08401)作为独立验证样本(表1)。取适量标准物质粉末，采用与模拟样本完全相同的压片流程制备分析试样，平行压制3片，用于考察方法的精密度与准确度。

表1 煤飞灰成分分析标准物质(GBW08401)主要成分

Table 1 Main components of the standard reference material for coal fly ash composition analysis(GBW08401)

Main components	SiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	CaO	MgO	TiO_2
Actual values/%	51.18	24.43	9.20	3.90	0.90	0.97

1.3 光谱采集与预处理

所有光谱采集均在常压空气环境中进行。经过透镜的脉冲激光能量约为50 mJ(能量密度约为159 J/cm^2),重复频率设置为2 Hz。通过预实验优化,数字延时发生器控制系统总触发延时为211.5 μs(该值包含激光出光、光传输、光谱仪电子学响应及等离子体门控延迟在内的整个系统延迟),光谱仪采集的窗口为1.0 ms,以充分获取原子谱线信号并抑制连续背景。每张光谱由1个激光脉冲获得,每个样品表面随机选取5个不同位置采集,每个采集位置各获取20条光谱,即每个样本各获取了100条光谱数据。每采集5个样品后,采集一组空白背景光谱用于暗电流校正。

光谱预处理步骤包括:暗电流扣除、连续背景扣除以及全光谱面积归一化,以补偿脉冲能量波动和基体效应引起的整体强度变化。根据NIST原子光谱数据库,选择无显著自吸收和谱线重叠的分析线作为PLSR各组分定量分析的依据[18-20],具体为:Si Ⅰ 288.16 nm、Al Ⅰ 394.4 nm、Fe Ⅰ 248.33 nm/252.28 nm、Ca Ⅱ 393.37 nm/396.85 nm、Mg Ⅱ 280.27 nm和Ti Ⅱ 334.94 nm。对于含量较低或谱线干扰严重的SO_3和P_2O_5,不纳入定量分析范围。各分析线的净峰面积作为PLSR输入变量。SFOA-SVR和PSO-SVR则将全谱数据作为模型的输入变量。需要说明的是,由于不同算法对输入数据形式的适配性存在差异,经前期探索,PLSR以分析线净峰面积为输入时效果最佳,而SVR类方法以全谱数据为输入时性能最优。因此,后续对比均基于各模型的最佳输入配置进行,以反映各模型在该问题上的性能上限。

1.4 建模方法与评价指标

以100个训练集样本的全谱数据作为输入,对应组分含量作为输出,构建多组分SVR非线性校准模型。SVR采用径向基核函数,其惩罚系数C和核参数γ的取值对预测性能影响显著。采用旗鱼优化算法(SFOA)在参数空间内自适应搜索最优(C, γ)组合,SFOA种群规模设为30,最大迭代次数100次,搜索范围$C\in[0.1, 100]$,$\gamma\in[0.01, 10]$。适应度函数定义为5折交叉验证下的均方根误差(Root Mean Square Error, RMSE)。为验证所提方法的优越性,同步建立PLSR和PSO-SVR模型作为对比,两种对比方法的核心参数均由相应交叉验证过程确定,建模方法与评价流程如图3所示。模型性能采用R^2和预测,RMSE[21-23],三个参数的计算如式(1)和式(2)所示。最终以煤飞灰成分分析标准物质(GBW08401)的分析结果检验模型的准确度与泛化能力。

$$R^2=1-\frac{\sum(y_i-\hat{y}_i)^2}{\sum(y_i-\bar{y})^2} \tag{1}$$

$$\mathrm{RMSE}=\sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\hat{y}_i)^2} \tag{2}$$

式中,y_i为真实值(%);$\hat{y}_i$为模型预测值(%);$\bar{y}$为真实值的均值(%);n为样本个数;R^2衡量模型对实测数据变异程度的解释比例,值越接近1表示拟合效果越好;RMSE对异常值敏感,但能反映预测误差的分布情况。

2 结果与讨论

2.1 光谱特征分析

图4展示不同状态煤灰样本的LIBS全谱图(190~720 nm),其中图4a为松散煤灰样本的LIBS全谱图,图4b为压片后煤灰样本的LIBS全谱图,图4中黑色曲线为原始光谱数据,红色曲线为提取的噪声信号,蓝色曲线为校正后的LIBS光谱,绿色曲线为提取的基线信号。在相同仪器参数下,将松散粉末压制成片后,LIBS信号谱线强度增强、重复性提高、稳定性改善。这主要归因于激光-样品相互作用中表面形貌、能量耦合效率、等离子体动力学及样品物理均匀性的综合影响[24-29]。压片后LIBS信号增强且更稳定,本质上是因为压片提高了样品的物理均一性和激光耦合效率,使等离子体形成条件更加可控,从而减少烧蚀随机性并增强发射过程的一致性。

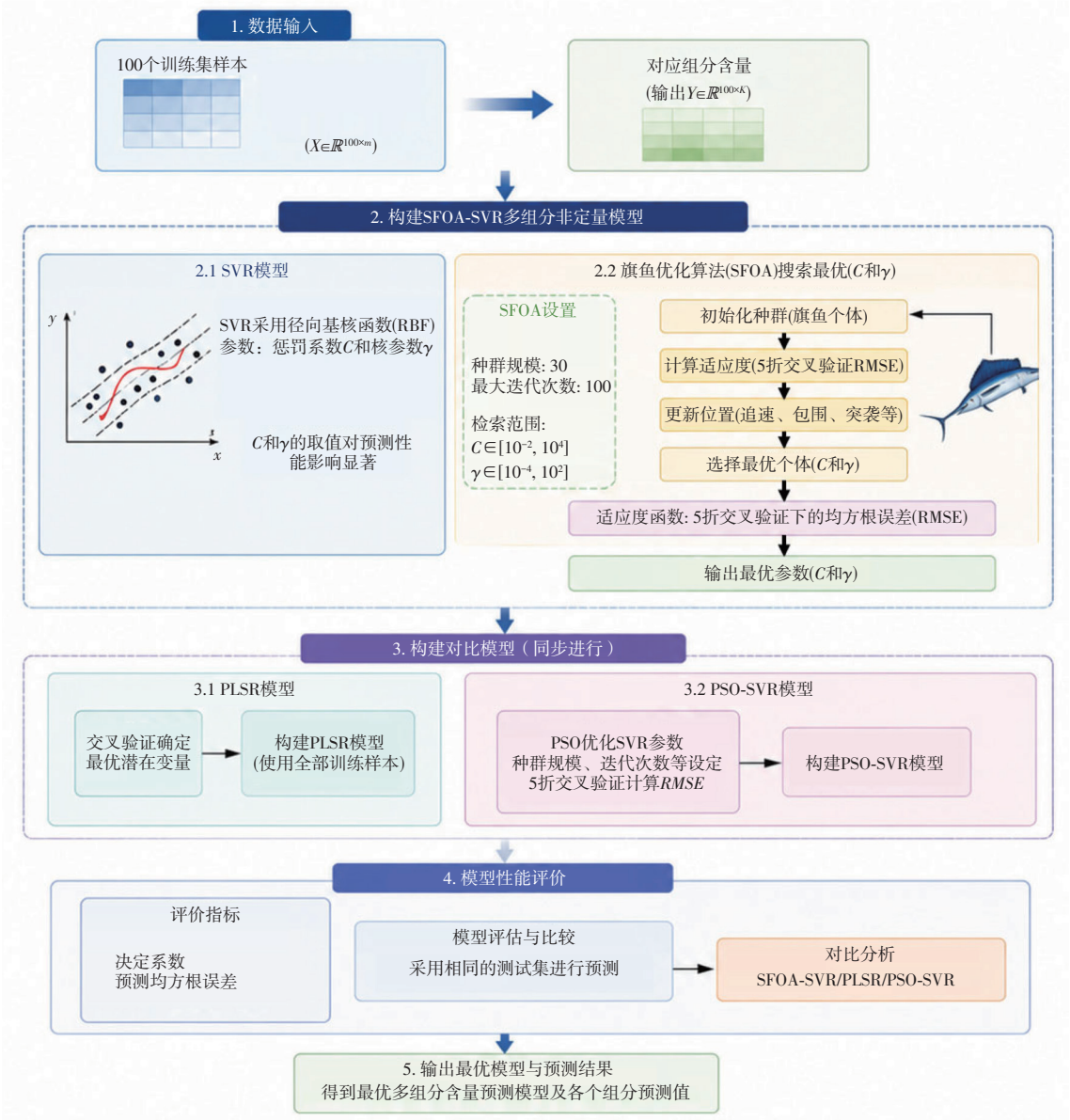


图3　建模方法与评价流程图

Figure 3　Modeling method and evaluation flow chart.

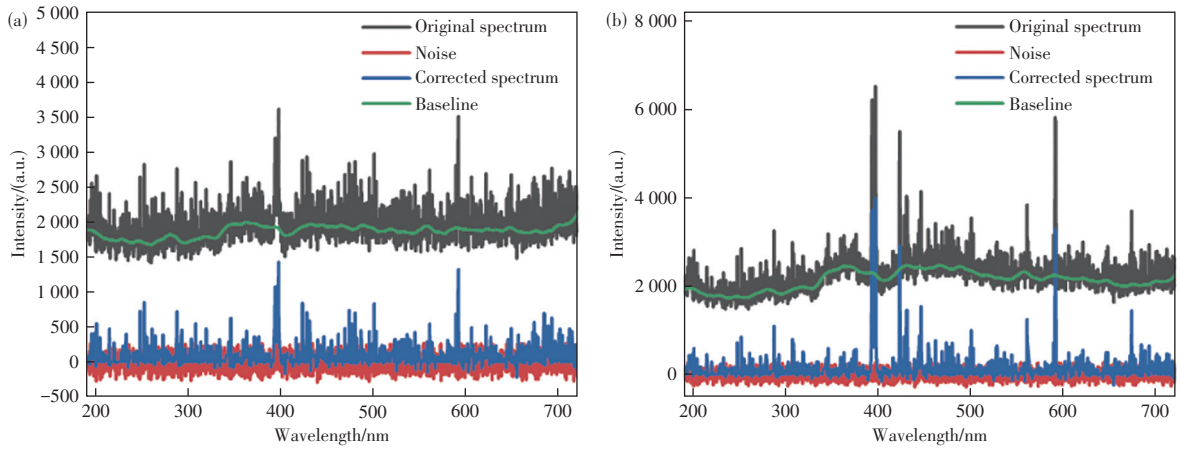


图4　不同状态煤灰样本的LIBS全谱图

Figure 4　LIBS full spectrum of coal ash samples in different states.

图5展示了典型煤灰样本的LIBS全谱图(190～720 nm),图中标注了主要元素(Si、Al、Fe、Ca等)的特征发射线位置,体现了LIBS多元素同步检测能力。例如,Si Ⅰ 288.16 nm、Al Ⅰ 394.4 nm、Fe Ⅰ 248.33/252.28 nm、Ca Ⅱ 393.37/396.85 nm、Mg Ⅱ 280.27 nm、Ti Ⅱ 334.94 nm。

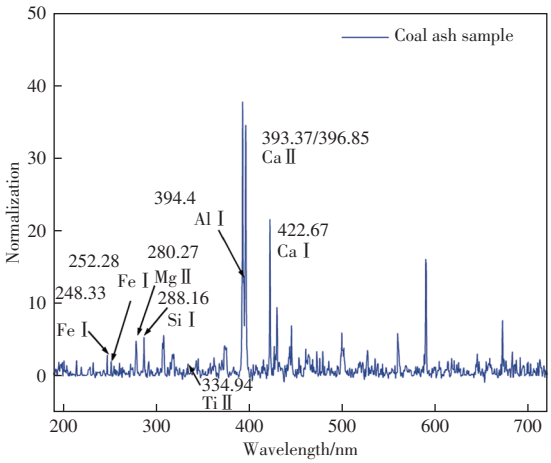


图5 不同元素LIBS特征谱线选取

Figure 5 Selection of LIBS characteristic spectral lines of different elements.

2.2 SFOA参数寻优过程与收敛特性分析

为建立SVR多组分校准模型,需同步确定惩罚系数C与径向基核参数γ的最优组合。本研究以全谱数据作为输入,以SiO_2组分的5折交叉验证均方根误差($RMSE_{CV}$)为适应度函数,利用SFOA在$C\in[0.1,100]$和$\gamma\in[0.01,10]$的二维连续空间内执行自适应寻优。图6给出了SFOA寻优过程中种群平均位置在(C,γ)平面上的迁移轨迹及最优个体适应度值的收敛曲线。可以看出,搜索初期个体广泛散布于参数空间,适应度值较高且波动剧烈,但随着迭代推进,旗鱼个体在“追逐-包围”机制引导下快速向低误差区域聚集,参数C和γ的搜索范围迅速收缩。迭代至第25代左右,最优适应度值已进入平缓下降阶段,种群位置趋于稳定,表明算法已逼近全局最优邻域。

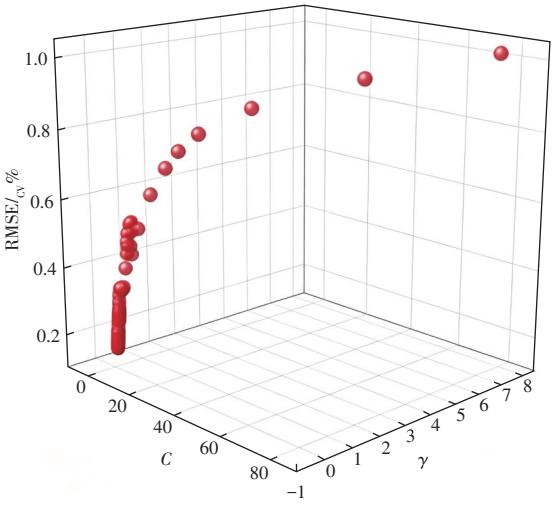


图6 SFOA种群平均位置在(C,γ)平面上的迁移轨迹

Figure 6 Migration trajectory of the average position of the SFOA population on the (C, γ) plane.

为量化SFOA的收敛优势,在相同适应度函数与种群规模下,独立运行SFOA和PSO各30次,记录最优适应度值的演化过程,如图7a所示。SFOA在平均收敛代数(达到最终适应度值95%所需的迭代步数)上较PSO减少约38%,表明SFOA具有更快的收敛速度。在全局寻优能力方面,SFOA所获最优适应度值的中位数和最小值均低于PSO,且30次运行结果的标准差(Standard Deviation, SD)仅为PSO的47%,说明SFOA能更稳定地收敛于全局最优解,而非陷入局部极值,如图7b所示。以上优势源于SFOA独特的精英引导与自适应步长策略,使其在探索与开发之间取得了更优的平衡[30]。

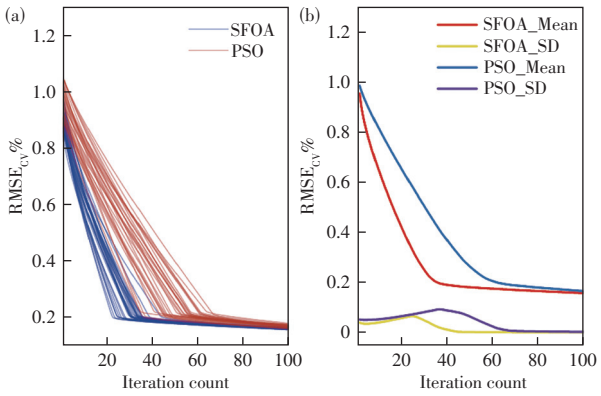


图7 SFOA和PSO的30次优化迭代最优适应度值的演化

Figure 7 Evolution of optimal fitness values through 30 optimization iterations for SFOA and PSO.

2.3 模拟煤灰样本多组分定量预测与模型对比

为全面评估SFOA-SVR模型对煤灰中多组分含量的定量预测能力,基于100个煤灰样本(训练集)、5折交叉验证及20个测试样本开展实验。图8展示了训练集、验证集与测试集主要组分(SiO_2、Al_2O_3、Fe_2O_3、CaO、MgO、TiO_2)的预测结果。其中,图8a为SFOA-SVR模型预测训练集6种主要氧化物结果,RMSE为0.8307%,R^2达0.987 5,图8b为SFOA-SVR模型预测验证集6种主要氧化物结果,RMSE为0.8776%,R^2达0.981 3,图8c为SFOA-SVR模型预

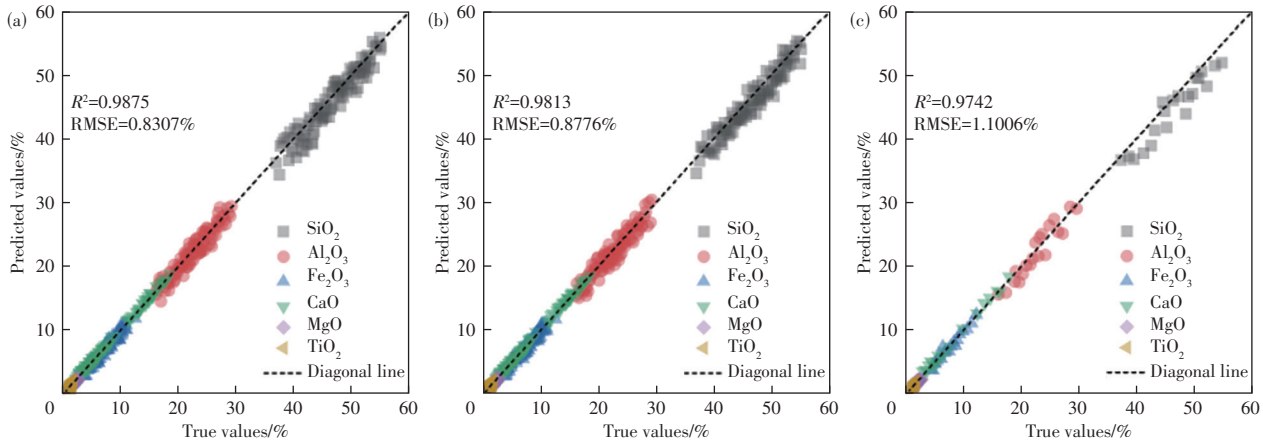


图8　SFOA-SVR煤灰组分定量预测结果：(a)100个煤灰样本训练集预测结果；(b)100个煤灰样本5折交叉验证结果；(c)20个煤灰样本测试集预测结果

Figure 8　SFOA-SVR quantitative prediction results of coal ash components: (a) Prediction results of 100 coal ash sample training sets; (b) 5-fold cross-validation results of 100 coal ash samples; (c) Prediction results of 20 coal ash sample test sets.

测测试集6种主要氧化物结果，RMSE为1.1006%，R^2达0.9742。SFOA-SVR模型与传统偏最小二乘回归(PLSR)及未优化PSO-SVR模型测试集预测性能对比，结果如表2所示。SFOA-SVR模型在训练、验证与测试集上的RMSE分别为0.8307%、0.8776%、1.1006%，三者接近，表明模型无显著过拟合，泛化性能良好。总体而言，SFOA-SVR在煤灰多组分定量分析中具有较高潜力，尤其适用于主量组分的精准预测。图9绘制出SiO_2、Al_2O_3、Fe_2O_3、CaO、MgO、TiO_2等主要灰分组分在训练集、验证集和测试集上的R^2与RMSE。

表2　SFOA-SVR模型与PLSR及PSO-SVR模型的对比

Table 2　Comparison of PLSR and PSO-SVR models with the SFOA-SVR model

Quantitative model	R^2	RMSE/%
PLSR	0.7641	12.0274
PSO-SVR	0.9135	4.1579
SFOA-SVR	0.9742	1.1006

2.4　潜力评估

为检验SFOA-SVR模型对真实煤灰基体的泛化能力，选取煤飞灰成分分析标准物质(GBW08401)作为独立验证样本平行测定3片同工艺压制的样品，分别进行预测并计算RMSE和R^2。图10展示了

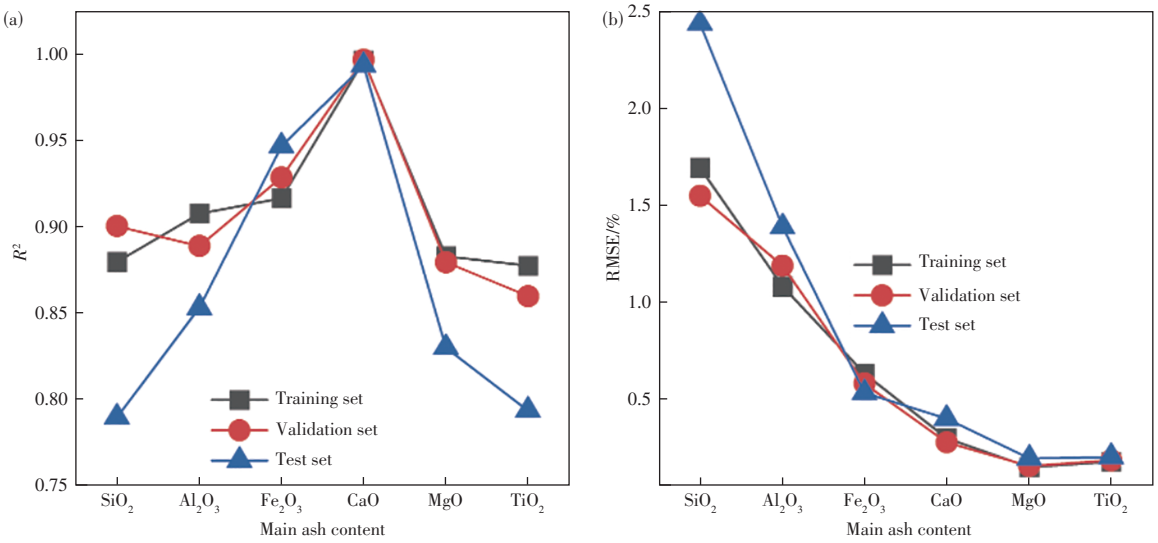


图9　SFOA-SVR模型对主要灰分组分的预测性能：(a)训练集、验证集和测试集的R^2；(b)训练集、验证集和测试集的RMSE

Figure 9　Prediction performance of the of SFOA-SVR model for main ash components: (a) R^2 of training set, validation set, and test set; (b) RMSE of training set, validation set, and test set.

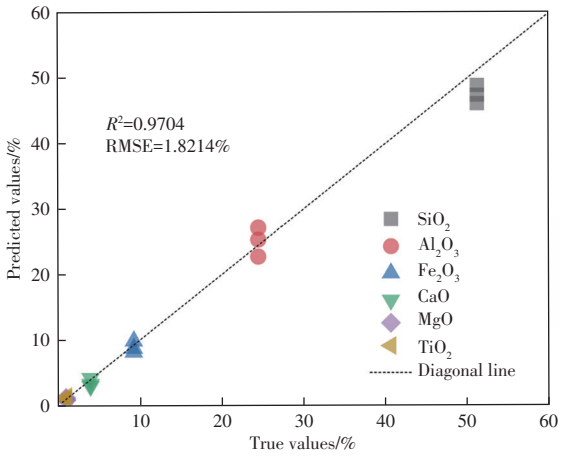


图10 GBW08401标准物质3个平行压片的主要组分预测结果

Figure 10 Prediction results of main components of GBW08401 certified reference materials in three parallel tablets.

3个平行片中各主要组分(SiO_2、Al_2O_3、Fe_2O_3、CaO、MgO、TiO_2)的真实值与预测值对比。从预测结果看,模型对标准物质各组分的预测值存在低于真实值的现象,表明方法具有良好的重复性,但准确度不足,存在系统负偏差。尽管如此,该模型在真实样本测试中仍呈现稳定的趋势性响应与良好精密度,表明其在煤灰快速筛查方面具备应用潜力。后续研究可从以下方面开展,结合特征选择算法(如CARS、SPA)剔除受基体干扰严重的波长变量;融合多种光谱技术(如LIBS与XRF)提供互补信息。总体而言,SFOA-SVR在标准化条件下对模拟样本具有优异预测能力,经适当基体校正后,有望发展成为一种低成本、高效率的煤灰多组分现场检测技术。

值得一提的是煤飞灰成分分析标准物质预测结果存在系统负偏差的主要原因源于基体效应的差异。SFOA-SVR模型的训练集由实际煤灰样品构成,其基体组成(如未燃尽碳含量、矿物质类型、玻璃相比例等)与GBW08401煤飞灰标准物质存在系统性差异。当标准物质的基体与训练集样本基体不匹配时,模型基于训练集学到的“光谱-浓度”映射关系会发生整体偏移,导致预测值呈现系统性偏差。

3 结论

本研究提出了一种基于旗鱼优化算法(SFOA)优化支持向量回归(SVR)的激光诱导击穿光谱(LIBS)煤灰组分定量分析方法,旨在解决煤灰光谱中普遍存在的强非线性基体效应对定量分析精度的制约。通过系统采集电厂除尘器灰斗中120份煤灰样本的LIBS光谱,样本经粉末压片处理,以提高信号强度和重复性。通过SFOA自适应优化SVR的惩罚系数与核参数,建立了多组分校准模型,实现了对SiO_2、Al_2O_3、Fe_2O_3、CaO、MgO、TiO_2等六种主要氧化物的同步精确预测。实验结果表明,SFOA-SVR模型在测试集上的预测决定系数(R^2)超过0.96,RMSE为1.1006%,整体性能优于偏最小二乘回归(PLSR)和粒子群优化SVR(PSO-SVR)模型。同时,采用煤飞灰成分分析标准物质(GBW08401)进行独立验证,预测R^2为0.970 4,RMSE为1.8214%,进一步证明了方法的可靠性与泛化能力。与PSO-SVR相比,SFOA-SVR在收敛速度、预测稳定性和全局优化能力方面均表现出显著优势。总体而言,所提出的SFOA-SVR-LIBS方法能够有效解耦煤灰复杂基体效应,实现多组分在线快速定量分析,为燃煤锅炉结渣预测、煤炭分级利用和固废资源化提供了高精度、可行的技术方案。未来研究可进一步结合特征选择算法和多种光谱技术融合,以提升模型精度和适用范围,为煤炭工业现场快速检测和实时监控提供更强有力的支撑。

参考文献

[1] 刘中毅,金晶,张宾宾,等. 燃准东煤锅炉灰沉积对炉膛传热的影响[J]. 动力工程学报,2020,40(2):96-103,116.
Liu Zhongyi, Jin Jing, Zhang Binbin, et al. Effects of ash deposition on heat transfer in the furnace of a Zhundong coal-fired boiler[J]. Journal of Chinese Society of Power Engineering, 2020, 40(2): 96-103, 116.

[2] Wang Shenghao, Cao Shuaijie, Li Saisai, et al. Advances in rapid spectroscopic methods for coal analysis: principles, key techniques, and emerging measurement challenges[J]. Measurement, 2026, 259: 119493. DOI: 10.1016/j.measurement.2025.119493.

[3] 刘娜,宋文丽,周利琴. X荧光光谱法(压片法)在煤灰成分分析中的应用[J]. 宁夏电力,2024(6):85-90.
Liu Na, Song Wenli, Zhou Liqin. Application of X-fluorescence spectroscopy (tableting method) in coal ash composition analysis[J]. Ningxia Electric Power, 2024(6): 85-90.

[4] 李文文,亓大千. 高分辨率电感耦合等离子体质谱法测定煤中微量元素的研究[J]. 煤化工,2023,51(6):97-100,104.
Li Wenwen, Qi Daqian. Study on trace elements determination in coal by high resolution inductive coupling plasma mass spectrometry[J]. Coal Chemical Industry, 2023, 51(6): 97-100, 104.

[5] 刘一江，闫春华，李茂刚，等. 激光诱导击穿光谱(LIBS)结合机器学习算法快速测定石油焦中微量元素[J]. 中国无机分析化学，2024，14(2)：197-204.
Liu Yijiang，Yan Chunhua，Li Maogang，et al. Rapid determination of trace elements in petroleum coke by laser-induced breakdown spectroscopy combined with machine learning algorithms[J]. Chinese Journal of Inorganic Analytical Chemistry，2024，14(2)：197-204.

[6] 杨海能，郭连波，牛雪晨，等. 激光诱导击穿光谱在煤质检测方面的研究进展[J]. 光学学报(网络版)，2026，3(8)：20-36.
Yang Haineng，Guo Lianbo，Niu Xuechen，et al. Research progress of laser-induced breakdown spectroscopy for coal quality analysis[J]. Acta Optica Sinica(Online)，2026，3(8)：20-36.

[7] 钟子铭，陆继东，郑建平，等. 激光诱导不同化学形态碳等离子体光谱特性研究[J]. 光学学报，2011，31(12)：283-289.
Zhong Ziming，Lu Jidong，Zheng Jianping，et al. Study on properties of plasma spectroscopy of laser-induced carbon materials with different chemical forms[J]. Acta Optica Sinica，2011，31(12)：283-289.

[8] 郝晓剑，任龙，杨彦伟，等. 煤中激光诱导击穿光谱的碳元素定量分析[J]. 激光技术，2020，44(2)：232-236.
Hao Xiaojian，Ren Long，Yang Yanwei，et al. Quantitative analysis of carbon in coal based on laser-induced breakdown spectroscopy[J]. Laser Technology，2020，44(2)：232-236.

[9] 党红艳，刘小丽，赵琰，等. 激光诱导击穿光谱法对煤中碳元素的定量分析研究[J]. 应用化工，2025，54(11)：2971-2974.
Dang Hongyan，Liu Xiaoli，Zhao Yan，et al. Quantitative analysis of carbon elements in coal by LIBS technology[J]. Applied Chemical Industry，2025，54(11)：2971-2974.

[10] 孙永凯. 激光诱导击穿光谱技术用于煤中非金属元素定量分析研究[D]. 太原：中北大学，2019.
Sun Yongkai. Quantitative analysis of nonmetallic elements in coal by laser induced breakdown spectroscopy[D]. Taiyuan：North University of China，2019.

[11] Wang Qingsong，Corporation C E，Zhang Donglian，et al. Advanced multi-parameter prediction of coal quality using LIBS and ensemble machine learning techniques[J]. ACS Omega，2025，10(33)：37574-37582.

[12] Niu Xuechen，Guan Feiyu，Li Zixuan，et al. A temporal and spatial dual-dimension fusion spectra mapping method for rapid detection of coal quality in laser-induced breakdown spectroscopy[J]. Talanta，2025，293：128106. DOI：10.1016/j.talanta.2025.128106.

[13] 崔佳诚，宋惟然，姚蔚利，等. 结合主导因素和多层感知机提高LIBS定量化性能[J]. 光谱学与光谱分析，2025，45(4)：1022-1027.
Cui Jiacheng，Song Weiran，Yao Weili，et al. Improving LIBS quantification by combining domain factors and multilayer perceptron method[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis，2025，45(4)：1022-1027.

[14] Wang Manping，Lu Yang，Liu Man，et al. Enhancing laser-induced breakdown spectroscopy quantification through minimum redundancy and maximum relevance-based feature selection[J]. Remote Sensing，2025，17(3)：416. DOI：10.3390/rs17030416.

[15] Shadravan S，Naji H R，Bardsiri V K. The Sailfish Optimizer：a novel nature-inspired metaheuristic algorithm for solving constrained engineering optimization problems[J]. Engineering Applications of Artificial Intelligence，2019，80：20-34.

[16] 黄杰，张英，张靖，等. 基于ISFO-KELM的SF_6电气设备故障组分CO_2浓度反演模型[J]. 电子科技，2024，37(11)：62-69.
Huang Jie，Zhang Ying，Zhang Jing，et al. A CO_2 concentration inversion model for SF_6 electrical equipment fault components based on ISFO-KELM[J]. Electronic Science and Technology，2024，37(11)：62-69.

[17] Li Lingling，Liu Jiaqi，Tseng M L，et al. Accuracy of IGBT junction temperature prediction：an improved sailfish algorithm to optimize support vector machine[J]. IEEE Transactions on Power Electronics，2024，39(6)：6864-6876.

[18] Wiens R C，Maurice S，Lasue J，et al. Pre-flight calibration and initial data processing for the ChemCam laser-induced breakdown spectroscopy instrument on the Mars Science Laboratory rover[J]. Spectrochimica Acta Part B：Atomic Spectroscopy，2013，82：1-27.

[19] Fortes F J，Moros J，Lucena P，et al. Laser-induced breakdown spectroscopy[J]. Analytical Chemistry，2013，85(2)：640-669.

[20] Rezaei F，Cristoforetti G，Tognoni E，et al. A review of the current analytical approaches for evaluating，compensating and exploiting self-absorption in laser induced breakdown spectroscopy[J]. Spectrochimica Acta Part B：Atomic Spectroscopy，2020，169：105878. DOI：10.1016/j.sab.2020.105878.

[21] Camirand Lemyre F，Chalifoux K，Desharnais B，et al. Squaring things up with R^2：what it is and what it can(and cannot) tell you[J]. Journal of Analytical Toxicology，2022，46(4)：443-448.

[22] Hodson T O. Root-mean-square error (RMSE) or mean

absolute error (MAE): when to use them or not[J]. Geoscientific Model Development, 2022, 15(14): 5481-5487.
[23] Sileshi G W. A critical review of forest biomass estimation models, common mistakes and corrective measures[J]. Forest Ecology and Management, 2014, 329: 237-254.
[24] Pandey S J, Locke R, Gaume R M, et al. Effect of powder compact density on the LIBS analysis of Ni impurities in alumina powders[J]. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 2018, 148: 99-104.
[25] Lal B, Zheng Hongbo, Yueh F Y, et al. Parametric study of pellets for elemental analysis with laser-induced breakdown spectroscopy[J]. Applied Optics, 2004, 43(13): 2792-2797.
[26] Gondal M A, Hussain T, Yamani Z H, et al. The role of various binding materials for trace elemental analysis of powder samples using laser-induced breakdown spectroscopy[J]. Talanta, 2007, 72(2): 642-649.
[27] Shi Linli, Lin Qingyu, Duan Yixiang. A novel specimen-preparing method using epoxy resin as binding material for LIBS analysis of powder samples[J]. Talanta, 2015, 144: 1370-1376.
[28] Jantzi S C, Motto-Ros V, Trichard F, et al. Sample treatment and preparation for laser-induced breakdown spectroscopy[J]. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 2016, 115: 52-63.
[29] da Silva Gomes M, Santos D, Nunes L C, et al. Evaluation of grinding methods for pellets preparation aiming at the analysis of plant materials by laser induced breakdown spectrometry[J]. Talanta, 2011, 85(4): 1744-1750.
[30] Azzam S M, Emam O E, Abolaban A S. An improved Differential evolution with Sailfish optimizer (DESFO) for handling feature selection problem[J]. Scientific Reports, 2024, 14: 13517. DOI: 10.1038/s41598-024-63328-w.

Quantitative Analysis of Coal Ash Composition by Laser-induced Breakdown Spectroscopy Based on SFOA-SVR

Wang Xu, Yang Qingbo

(*Xuchang Electrical Vocational College, College of Information Engineering, Xuchang, Henan 461002, China*)

Abstract The rapid and accurate determination is of great importance of coal ash composition for the prediction of slagging in coal-fired boilers, the graded utilization of coal, and the resource recovery of solid waste. Laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS), which does not require complicated sample pretreatment and can realize simultaneous multi-element analysis, has attracted considerable attention in the field of online coal quality detection. However, significant matrix effects are present in coal ash, and a complex nonlinear relationship exists between spectral response and component contents. The quantitative accuracy required for industrial applications can hardly be achieved by traditional linear models; therefore, high-precision nonlinear calibration methods are urgently needed. In this study, a LIBS quantitative analysis strategy based on support vector regression (SVR) optimized by the sailfish optimization algorithm (SFOA) was proposed, which can break through the bottleneck of matrix interference and synchronous accurate detection of multiple components in coal ash can be realized. A total of 120 coal ash samples were collected from the ash hoppers of electrostatic precipitators in several coal-fired power plants in Henan province, covering major oxides such as SiO_2, Al_2O_3, Fe_2O_3, CaO, MgO, and TiO_2. After being pressed into pellets, LIBS spectra were acquired. The net peak areas of analytical lines were used as the input for the PLSR model, while full-spectrum data were used as the input for the SFOA-SVR and PSO-SVR models. The penalty coefficient and kernel parameter of SVR were adaptively optimized by SFOA, and an SFOA-SVR multi-component calibration model was established. The model was compared with partial least squares regression (PLSR) and particle swarm optimization-optimized SVR (PSO-SVR). As revealed by the results, for the six major components (SiO_2, Al_2O_3, Fe_2O_3, CaO, MgO, TiO_2) in the test set, the overall coefficient of determination (R^2) and root mean square error (RMSE) predicted by SFOA-SVR reached 0.974 2 and 1.1006%, respectively. SFOA-SVR demonstrated superior prediction performance compared with PLSR, and exhibited faster convergence and better prediction stability relative to PSO-SVR. When a coal fly ash certified reference

material (GBW08401) was used for validation, the R^2 and RMSE obtained were 0.970 4 and 1.8214%, respectively. The proposed method effectively corrected the nonlinear matrix effects between spectra and components through intelligent parameter tuning of SFOA, and significantly improved the accuracy and generalization ability of LIBS detection of coal ash components. A feasible technical solution for rapid online analysis in the coal industry was thus provided.

Keywords laser-induced breakdown spectroscopy; coal ash; sailfish optimization algorithm; support vector regression; quantitative analysis

HIGHLIGHTS

1) The SFOA-SVR approach was applied for the first time to decouple the strong nonlinear matrix effects in coal ash LIBS spectra.
2) Overall prediction of all components $R^2>0.96$, with performance surpassing PLSR and PSO-SVR models.
3) The reliability of the SFOA-SVR model combined with laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) was validated using an independent certified reference material.