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
2135～2144

doi: 10. 20236/j. CJIAC. 2026. 11. 017

张艳娜. 基于元启发式优化的一维卷积神经网络(1D-CNN)结合激光诱导击穿光谱(LIBS)的铝硅合金定量分析[J]. 中国无机分析化学, 2026, 16(11): 2135-2144.

Zhang Yanna. Quantitative Analysis of Aluminum Silicon Alloy by Based on Meta-heuristic Optimization One-dimensional Convolutional Neural Network Combined With Laser-induced Breakdown Spectroscopy[J]. Chinese Journal of Inorganic Analytical Chemistry, 2026, 16(11): 2135-2144.

基于元启发式优化的一维卷积神经网络(1D-CNN)结合激光诱导击穿光谱(LIBS)的铝硅合金定量分析

张艳娜

(江西航空职业技术学院 航空电子与信息学院, 江西 抚州 344000)

摘　要　铝合金广泛应用于航空、汽车及电子等领域, 硅含量对其力学性能、铸造性能及耐磨性具有重要影响。传统的分析方法虽精确, 但存在样品前处理复杂、分析周期长等问题。激光诱导击穿光谱(Laser-induced Breakdown Spectroscopy, LIBS)技术因其无损、快速、无需样品制备等优势, 成为分析铝合金成分的重要手段。然而, LIBS在定量分析中面临噪声、基体效应等问题, 影响分析精度。本文提出一种结合LIBS技术和元启发式优化的一维卷积神经网络(One-dimensional Convolutional Neural Network, 1D-CNN)的铝合金定量分析方法, 利用粒子群优化(Particle Swarm Optimization, PSO)和海洋捕食者算法(Marine Predator Algorithm, MPA)等元启发式算法优化CNN结构与超参数, 提高铝合金中硅含量的分析精度。本研究采集多种铝硅合金样品的LIBS光谱数据, 并进行预处理。通过PSO-CNN和MPA-CNN优化CNN的卷积核大小、学习率等超参数, 建立定量分析模型。优化后的CNN模型用于预测样品中硅含量, 并与传统回归模型支持向量回归(Support Vector Regression, SVR)和偏最小二乘回归(Partial Least Squares Regression, PLSR)进行对比, 评估其性能。结果表明, 优化后的PSO-CNN和MPA-CNN模型在铝硅合金硅含量预测中表现出更高的精度, 决定系数(R^2)接近0. 97, 均方根误差(RMSE)降低至4. 6%以下, 明显优于传统模型。优化后模型提高了预测精度, 并缩短了训练和预测时间, 具有较强的实时监控能力。本文提出的基于元启发式优化的1D-CNN结合LIBS的铝硅合金定量分析方法, 为铝硅合金硅含量的快速、精确测定提供了新技术途径, 具有重要的应用价值, 特别是在铝合金生产及质量监控领域。

关键词　激光诱导击穿光谱; 元启发式优化; 一维卷积神经网络; 铝硅合金; 定量分析

要点

1) 提出了一种将LIBS与元启发式优化的1D-CNN相结合的铝硅合金定量分析新方法。

2) 实现了CNN模型超参数的自适应优化, 显著提升了预测精度与效率。

3) 为铝硅合金硅含量的快速精确测定及工业在线监控提供了新的技术路径。

中图分类号: O657. 38　　**文献标志码**: A　　**文章编号**: 2095-1035(2026)11-2135-10

收稿日期: 2026-03-19　　**修回日期**: 2026-04-11　　**录用日期**: 2026-04-12　　**在线出版日期**: 2026-07-27

Received: 2026-03-19　　**Revised**: 2026-04-11　　**Accepted**: 2026-04-12　　**Online published**: 2026-07-27

基金项目: 江西省教育厅科学技术研究项目(GJ2202708)

Fund: Supported by the Science and Technology Research Project of Jiangxi Provincial Department of Education (GJ2202708)

作者简介: 张艳娜, 女, 讲师, 主要从事计算机科学与技术研究。E-mail: 405549052@qq. com

Author: Zhang Yanna, female, lecturer, mainly engaged in the research of computer science and technology. E-mail: 405549052@qq. 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.

铝合金因其轻质、高强度等优异性能，在航空航天、汽车制造、建筑及电子设备等关键工业领域具有不可替代的应用价值[1-4]。其宏观性能主要取决于合金中各元素的含量与配比，其中硅是影响铝合金性能的关键因素之一。硅含量直接决定了铝合金的力学性能、铸造性能、耐磨性及热处理特性[5]。具体而言，适量的硅可以显著改善合金的流动性、降低收缩率并减少气孔缺陷，从而提升铸造性能；但过高的硅含量则可能导致合金脆性增加，降低其机械强度和延展性。此外，硅含量对铝合金的耐磨性、热稳定性以及热膨胀系数均有重要影响，在航空航天和汽车制造等对材料耐高温性能要求较高的领域，精准控制硅含量是保证部件使用寿命和可靠性的关键[6-8]。因此，实现铝合金中硅含量的准确、快速检测，对于材料设计、生产工艺控制及产品质量保障具有重要意义。

目前，铝合金中硅元素的检测主要依赖于传统实验室分析方法，如电感耦合等离子体光学发射光谱法(ICP-OES)和电感耦合等离子体质谱法(ICP-MS)等。尽管这些方法具有较高的检测精度，但普遍存在样品前处理复杂、检测周期长、设备昂贵且难以实现在线分析等局限性[9-10]。其他光谱技术，如X射线荧光光谱法(XRF)和原子吸收光谱法(AAS)，虽在元素检测中有所应用，但也各有不足。XRF技术虽快速无损，但其空间分辨率有限，且定量分析能力较弱[11]；AAS法则需要对样品进行消解处理，检测流程繁琐且耗材成本较高。综上所述，传统方法难以满足现代工业生产对高效、实时、在线检测的需求，亟待发展一种能够实现快速、原位、准确分析的定量检测新技术。激光诱导击穿光谱(Laser-induced Breakdown Spectroscopy，LIBS)作为一种新兴的元素分析技术，因其独特的优势而受到广泛关注[12-16]。该技术无需复杂的样品前处理，可实现非接触式、多元素同时检测，并具有响应速度快、适于在线分析等特点[17-19]。这些优势使其在金属材料成分分析领域展现出巨大的应用潜力。然而，LIBS技术在定量分析中仍面临诸多挑战，如光谱谱线重叠、基体效应以及信号噪声干扰等，导致传统的数据处理方法难以保证分析结果的准确性和稳定性[20-22]。

近年来，深度学习技术，特别是卷积神经网络(Convolutional Neural Network，CNN)，在光谱数据的特征提取与建模分析中表现出强大的能力。CNN通过其多层网络结构，能够自动从原始光谱中学习并提取高维抽象特征，有效建模元素含量与光谱之间的复杂非线性关系，从而提升预测精度[23-25]。然而，CNN模型的性能高度依赖于其网络结构及超参数的设置。传统的超参数优化方法，如网格搜索和随机搜索，不仅计算效率低下，且容易陷入局部最优，难以充分发挥模型的潜力。为此，引入具有强大全局搜索能力的元启发式算法进行模型优化成为研究热点。该类算法通过模拟自然界中的优化机制，能够自适应地搜索最优的网络结构和学习参数，显著提升模型的训练效率与泛化能力[26-28]。基于上述背景，本文提出将激光诱导击穿光谱技术与元启发式优化的一维卷积神经网络(One-dimensional Convolutional Neural Network，1D-CNN)相结合，开展铝硅合金中硅元素的定量分析研究。本研究旨在利用LIBS技术快速获取铝硅合金样本的光谱数据，构建1D-CNN模型自动提取光谱特征并建立定量分析模型，通过引入元启发式算法对1D-CNN的模型结构和超参数进行自动优化，以提高定量分析的精度和鲁棒性[29-30]。该研究不仅为铝硅合金中关键元素的快速、准确检测提供了一种新的技术路径，也为推动LIBS技术与深度学习在工业在线分析领域的深度融合提供了理论依据与实践参考。需要说明的是，本文选取的样品硅含量范围(5%～90%)显著宽于常规工业变形铝合金的限定区间。构建一个覆盖从亚共晶到高硅含量的完整Al-Si成分谱系，旨在系统探究并验证所提LIBS结合深度学习算法在极宽动态浓度范围内的非线性建模能力与光谱响应特性。虽然高硅样品不属于常规变形铝合金，但其分析数据对于铸造铝合金的质量监控及硅基材料中杂质铝的检测亦具有参考价值。本研究重在方法论探索，后续将针对工业中常见的Si质量分数0%～15%的区间(特别是低含量检测)开展专项优化研究，以增强方法的现场适用性。

1 实验与方法

1.1 铝硅合金样品制备与光谱采集

本实验选取了不同硅含量的铝硅合金样品，涵盖5%～90%硅含量(质量分数)的铝硅合金样本(表1)，确保了研究的广泛性和代表性。每种硅含量的铝硅合金样品各制备10个独立样本，通过标准方法处理，并保证其表面光滑、均匀，适合进行LIBS光谱采集。实验所用Al-Si系列样品为购置的铝硅合金标准样品，其成分经XRF标定，均为质量分数。

表1　不同硅元素含量的铝硅合金

Table 1　Aluminum-silicon alloys with different silicon content

Number	Silicon/%	Number	Silicon/%
1	5.0	10	50.0
2	10.0	11	55.0
3	15.0	12	60.0
4	20.0	13	65.0
5	25.0	14	70.0
6	30.0	15	75.0
7	35.0	16	80.0
8	40.0	17	85.0
9	45.0	18	90.0

使用自制LIBS光谱平台(图1)进行数据采集，设置激光波长为1 064 nm，光谱范围为190～700 nm，激光脉冲能量为15 mJ，每个脉冲激发一条LIBS光谱，采集窗口为1.5 ms，每两条光谱取平均值作为一条光谱保存，以确保涵盖铝硅合金中硅元素的特征谱线。每个样品保存10条光谱数据，确保结果的稳定性和准确性。

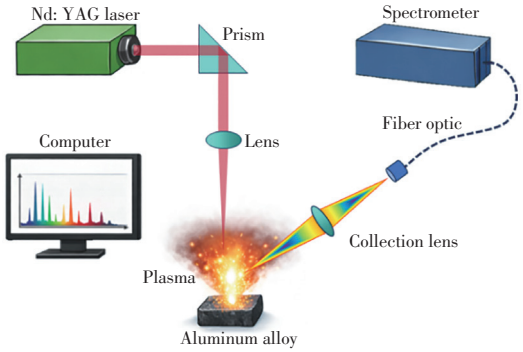


图1　LIBS光路示意图

Figure 1　Schematic diagram of the LIBS optical path.

1.2　LIBS光谱预处理方法

由于LIBS光谱受到基体效应、光谱噪声、谱线重叠等因素的影响，对数据进行预处理是提高定量分析精度的必要步骤。预处理方法包括基线漂移校正和归一化处理，通过基线漂移校正增强信号特征，归一化处理则消除能量抖动和实验偏差造成信号强度的振荡。

本研究采用基线估计与稀疏性去噪(Baseline Estimation and Denoising with Sparsity，BEADS)算法对原始光谱数据进行预处理[31]，以同时实现基线校正与信号降噪。该方法基于稀疏表示思想，认为光谱信号中的有效峰形在高通分量上具有稀疏性，而基线漂移主要表现为低频缓变成分，随机噪声则分布于高频区域。BEADS通过构建带有非对称惩罚项的优化模型，在抑制噪声的同时保留真实峰形的尖锐特征，并有效分离背景基线。与传统多项式拟合、小波去噪等方法相比，BEADS能够避免人为选点带来的主观性，且对弱峰和重叠峰具有更好的保持能力。因此，采用该算法处理后，可显著提高光谱信号的平滑性、峰位识别准确性及后续定量分析的可靠性，为模型构建与特征提取提供更加稳定的数据基础[32]。

1.3　元启发式优化CNN

本文的技术路线与一维卷积神经网络(1D-CNN)模型构建步骤示意如图2所示。为实现该路线，基于Matlab平台开发了一款针对铝硅合金硅含量的LIBS数据分析系统。该系统将数据预处理方法优选、特征变量筛选和模型构建等功能高度集成，为后续的精准定量分析提供了有力支持。

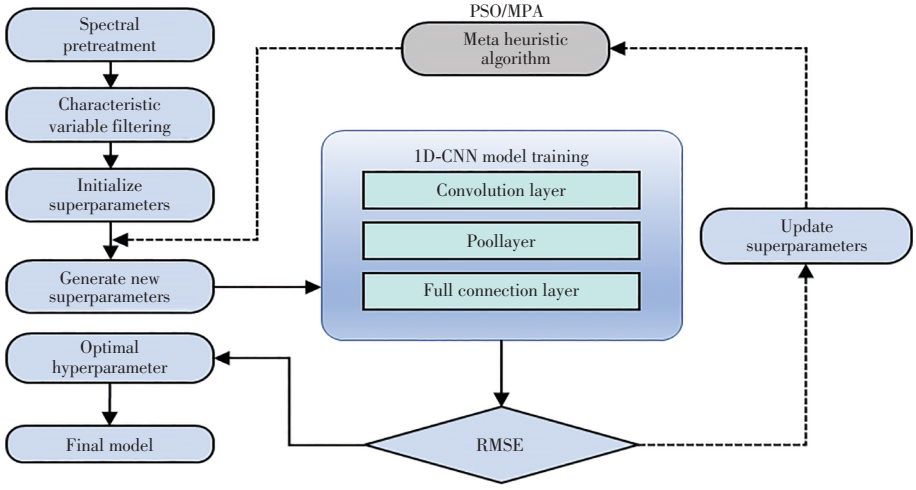


图2　1D-CNN模型构建流程图

Figure 2　Flow chart of 1D-CNN model construction.

本研究构建的一维卷积神经网络(1D-CNN)采用经典层级卷积结构[33]，并结合元启发式算法实现超参数优化，用于LIBS光谱中硅元素含量的定量分析。模型输入层以预处理后且经过特征变量筛选的LIBS一维光谱数据作为输入，保留谱线强度分布及波段连续性信息。卷积层利用多个卷积核沿光谱轴滑动，对局部谱线特征进行自动提取，可有效表征特征峰形、峰强变化及相邻波段间的相关性。池化层对卷积提取的特征进行下采样，在减少数据维度和计算复杂度的同时，抑制冗余信息与噪声干扰，降低模型过拟合风险。随后，全连接层对高维特征进行综合融合与非线性映射，最终输出硅元素含量的定量结果。为进一步提升模型性能，在CNN建模前引入粒子群优化(Particle Swarm Optimization，PSO)、海洋捕食者算法(Marine Predator Algorithm，MPA)等元启发式算法[34-35]，对学习率、卷积核数量、卷积核尺寸及批量大小等关键超参数进行全局搜索，以最小化预测误差并增强模型训练效率与泛化能力，从而提高LIBS定量分析的准确性与稳定性。

模型训练与验证过程中，使用交叉验证(Cross-validation)方法评估模型的性能。训练过程中，使用均方根误差(Root Mean Square Error，RMSE)和决定系数(R^2)等指标评价模型的表现。

2 结果与讨论

2.1 LIBS光谱预处理及谱线分析

如图3所示，采用BEADS算法对原始LIBS光谱进行联合基线校正与降噪处理后，光谱背景与有效特征信号得到了明显分离。图3中红色曲线为原始光谱，存在较强的连续背景和基线漂移，紫色曲线为算法拟合得到的基线，能够较好地表征背景缓慢变化趋势。绿色曲线为校正后的光谱，谱线峰形更加突出，特征峰位置更清晰，峰强对比度显著提高。图3中黑色曲线为分离出的噪声分量，其整体围绕零值随机波动，说明BEADS在抑制高频噪声的同时较好地保留了真实谱线信息。该结果表明，BEADS算法能够有效消除背景干扰和基线漂移，提高光谱信噪比与特征可辨识度，为后续特征提取、建模分析及元素定量预测提供更加稳定可靠的数据基础。

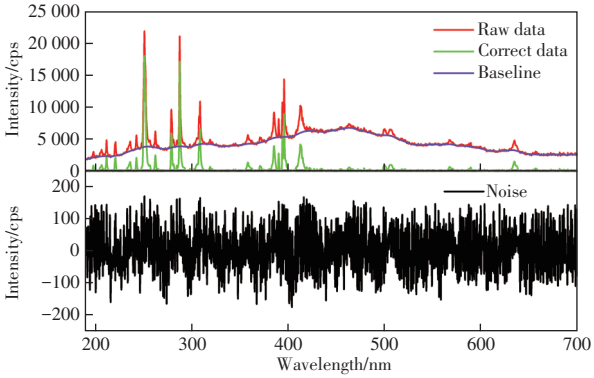


图3 LIBS光谱预处理效果

Figure 3 LIBS spectral preprocessing effect.

图4为18种不同硅元素含量铝硅合金产生的LIBS信号平均光谱，在开展铝硅合金中硅元素定量分析之前，依据LIBS光谱特征并结合相关标准谱线数据库，对样品中Al和Si的主要特征发射峰进行识别与标注。图4中展示了铝硅合金样品在190～700 nm的LIBS光谱，其中Al(Ⅰ)236.70、237.31、308.24、309.31、394.41和396.15 nm等谱线峰强较高，表明铝基体信号占主导地位；同时，Si(Ⅰ)251.61与288.17 nm处也出现了较为清晰的特征峰，可作为硅元素定量建模的重要依据。通过观察可知，不同特征峰强度存在明显差异，部分谱线峰形较弱或邻近谱线间存在一定重叠，这可能与铝硅合金基体效应、自吸收作用及等离子体波动有关。此外，复杂背景辐射与实验噪声也会对弱特征峰识别造成干扰，因此需结合光谱特征变量筛选方法，提高后续定量分析的准确性与稳定性。

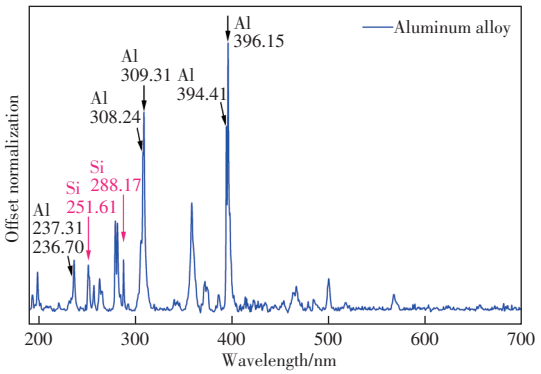
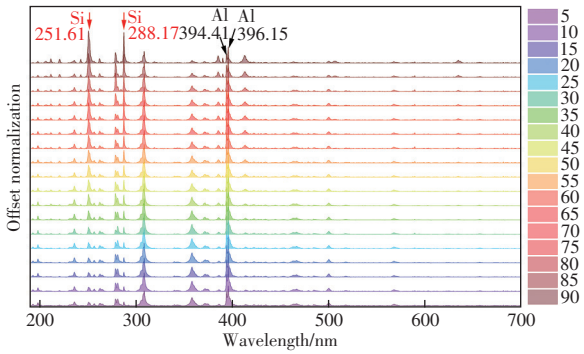


图4 LIBS光谱谱线分析

Figure 4 LIBS spectral line analysis.

2.2　不同硅含量铝硅合金的LIBS光谱特征谱线

图5中展示了不同硅含量铝硅合金样品在190～700 nm波段范围内的LIBS光谱特征。整体来看，各样品的光谱轮廓基本一致，说明铝硅合金基体成分相对稳定，主要差异体现在与硅元素相关特征谱线的强度变化上。其中，Si(Ⅰ)251.61和288.17 nm处均出现了较为明显的发射峰，且随着硅含量升高，这两处特征峰整体呈增强趋势，表明其峰强与样品中硅含量具有较好的响应关系，可作为后续定量分析的重要特征变量。与此同时，Al(Ⅰ)394.41和396.15 nm作为铝基体的典型谱线，在各样品中均保持较强信号，体现出良好的重复性与稳定性。需要注意的是，不同浓度样品在局部波段仍存在峰形差异和强度波动，这可能与激光烧蚀不均匀、等离子体温度波动、自吸收效应及基体效应有关。总体而言，不同硅含量铝硅合金的LIBS光谱既保留了稳定的铝基体特征，又表现出随硅含量变化而变化的特征峰响应，为构建硅元素定量模型提供了可靠的光谱依据。



注：图例数字为质量分数(%)

Note: Values in the legend represent mass fractions(%).

图5　18种不同硅元素含量的铝硅合金产生的LIBS信号

Figure 5　LIBS spectra of 18 aluminum-silicon alloys with different silicon contents.

2.3　LIBS光谱特征变量筛选

为提升LIBS定量模型的预测精度与建模效率，本研究采用皮尔逊相关系数法对不同硅含量铝硅合金光谱进行特征变量筛选。其基本原理是计算各波长处光谱强度与样品硅含量之间的线性相关程度，以评估该波长对硅含量变化的响应敏感性。图6给出了190～700 nm波段内各波长对应的相关系数，不同波长与硅含量之间同时存在显著的正相关和负相关。其中，正相关表示该波长处谱线强度随硅含量升高而增强，负相关则表明该波长处谱线强度随硅含量升高而减弱，这种现象通常与元素间谱线竞争、基体效应及等离子体状态变化等因素有关。由于相关系数的正负仅反映变化的方向，而其绝对值大小才表征关联的强弱，因此本研究不区分正负相关方向，统一选取相关系数绝对值大于0.6的波长变量作为特征筛选的阈值。该方法可有效保留对硅含量变化最敏感的谱线信息，剔除低相关、冗余及噪声变量，降低模型输入维度，减少无关信息干扰，从而为后续1D-CNN定量建模提供更精简、有效且具有代表性的输入特征。

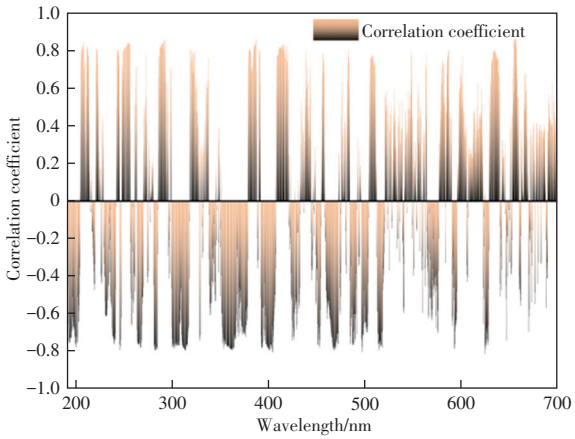
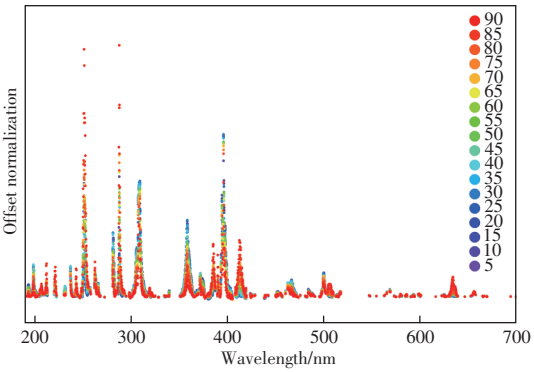


图6　LIBS特征变量强度与硅含量的皮尔逊相关系数分布

Figure 6　Pearson correlation coefficient between strength of LIBS characteristic variables and silicon content.

图7展示了在相关系数阈值为0.6的条件下筛选得到的特征变量，不同颜色对应不同硅含量的铝硅合金样品。可以看出，保留下来的变量主要集中在若干特征峰附近，且随硅含量变化呈现出较好的区分度。其中，Si(Ⅰ)251.61、288.17 nm等硅元素特征峰强度随硅含量升高而整体增强，表现出明显的浓度响应关系；而部分Al(Ⅰ)特征峰则因基体组成变化和等离子体效应而产生相对强度波动。该结果表明，相关系数筛选能够有效捕捉与硅含量变化密切相关的敏感波长，不仅保留了硅元素的直接表征信息，也保留了铝基体间接反映成分变化的重要谱线，验证了该特征变量筛选方法的合理性和有效性。



注：图例数字为质量分数(%)

Note: Values in the legend represent mass fractions(%).

图7 遴选的特征变量

Figure 7 Selected characteristic variables.

2.4 CNN模型与优化效果

表1将不同硅元素含量的铝硅合金进行了编号，模型训练和交叉验证选用偶数序号的样本进行模型构建和定量效果对比。为验证元启发式算法优化策略对LIBS定量分析性能的提升作用，本文分别建立了1D-CNN、粒子群优化卷积神经网络(Particle Swarm Optimization-Convolutional Neural Network，PSO-CNN)、海洋捕食者算法优化卷积神经网络(Marine Predators Algorithm-Convolutional Neural Network，MPA-CNN)、支持向量回归(Support Vector Regression，SVR)和偏最小二乘回归(Partial Least Squares Regression，PLSR)模型，对铝硅合金中硅元素含量进行定量预测。为全面评价各模型的预测能力，采用决定系数R^2和RMSE作为性能指标。其中，R^2越接近1，说明模型对样本浓度变化的解释能力越强；RMSE越小，表明模型预测误差越低，精度越高。

从表2可以看出，传统线性模型PLSR对光谱整体趋势具有一定表征能力(交叉验证的R^2=0.8714，RMSE=8.06%)，但由于LIBS光谱中存在明显的非线性响应、峰重叠及基体效应，其预测精度相对有限。SVR作为典型非线性建模方法，较PLSR在拟合能力和泛化性能方面有所提升(交叉验证的R^2=0.9104，RMSE=7.98%)，但其模型性能仍较大程度依赖核函数与参数设置。相比之下，1D-CNN能够直接从一维光谱中自动提取局部特征和深层非线性信息，因此在R^2和RMSE指标上均优于传统

表2 不同模型定量性能的对比

Table 2 Comparison of quantitative performance of different models

Models	Training set R^2	Training set RMSE/%	Cross validation R^2	Cross validation RMSE/%
PLSR	0.890 1	7.14	0.871 4	8.06
SVR	0.924 5	6.87	0.910 4	7.98
1D-CNN	0.941 2	4.51	0.932 4	5.94
PSO-CNN	0.987 1	2.78	0.978 1	3.91
MPA-CNN	0.985 7	2.87	0.979 1	3.84

回归模型，表现出更强的定量分析能力(交叉验证的R^2=0.9324，RMSE=5.94%)。

引入PSO和MPA对1D-CNN的学习率、卷积核数目、卷积核尺寸及批量大小等关键超参数进行全局优化后，模型性能得到进一步改善。PSO-CNN和MPA-CNN均表现出更高的R^2和更低的RMSE，说明元启发式算法能够有效避免人工调参带来的局限性，提升模型收敛效率和预测稳定性。其中，MPA-CNN的交叉验证结果最优，其R^2和RMSE分别为0.979 1和3.84%；PSO-CNN的训练结果更优，其R^2和RMSE分别为0.9871和2.78%。结果表明，PSO-CNN具有更强的训练集拟合能力，能够更充分地学习已有样本特征；而MPA-CNN在交叉验证中表现更优，说明其泛化能力和稳定性更强，对未知样本具有更好的适应性。因此，若侧重模型对训练数据的拟合精度，可优先考虑PSO-CNN。若更强调模型的鲁棒性与实际预测能力，则MPA-CNN更具优势。总体而言，元启发式算法优化后的CNN模型在硅元素定量分析中展现出更优的精度与泛化能力。

图8进一步展示了PSO与MPA两种元启发式算法在优化1D-CNN超参数过程中的适应度(以RMSE为优化目标)收敛曲线。可以看出，相较于传统网格搜索或随机搜索，两种算法均能在较少迭代次数内快速逼近最优区域。具体而言，MPA算法在前期的全局探索阶段下降斜率更大，表现出更强的跳出局部最优能力，这与其采用捕食者-猎物策略进行广域搜索的机制相符；而PSO算法在中后期收敛更为平滑稳定，体现了粒子群记忆与信息共享的优势。最终，MPA略优于PSO获得了更低的验证误差，这与表2中MPA-CNN泛化性能更佳的结论相互印证。

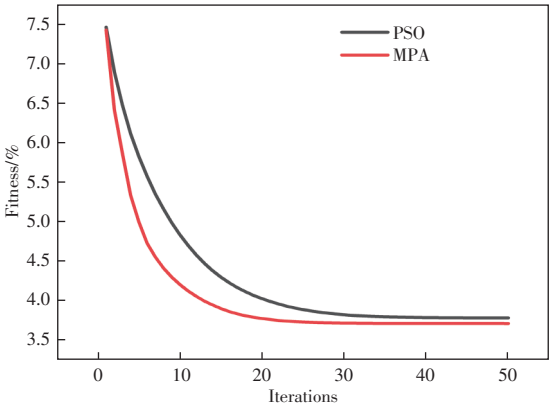


图8　模型预测性能对比

Figure 8　Comparison of model prediction performance.

2.5　模型预测性能

为进一步评价所构建PSO-CNN和MPA-CNN模型的实际预测能力，本文选取奇数序号的样本作为独立预测集，并将每种硅含量样本对应的多次LIBS光谱取平均后输入PSO-CNN和MPA-CNN模型进行预测分析，结果如图9所示。图9a和图9b分别给出了PSO-CNN与MPA-CNN模型的预测浓度与真实浓度之间的对应关系。总体来看，模型能够较好地反映不同硅含量样品的变化趋势，并实现较为准确的定量预测。

从评价指标来看，PSO-CNN模型的R^2为0.953 4，RMSE为5.61%；MPA-CNN模型的R^2为0.969 2，RMSE为4.55%。相比之下，MPA-CNN具有更高的R^2和更低的RMSE，说明其在预测集上的拟合精度和泛化能力更优。尤其是在中高浓度区间，MPA-CNN的预测点与拟合曲线更加接近，误差棒整体较短，表明模型对样品浓度变化的响应更稳定，对未知样本具有更好的适应性。

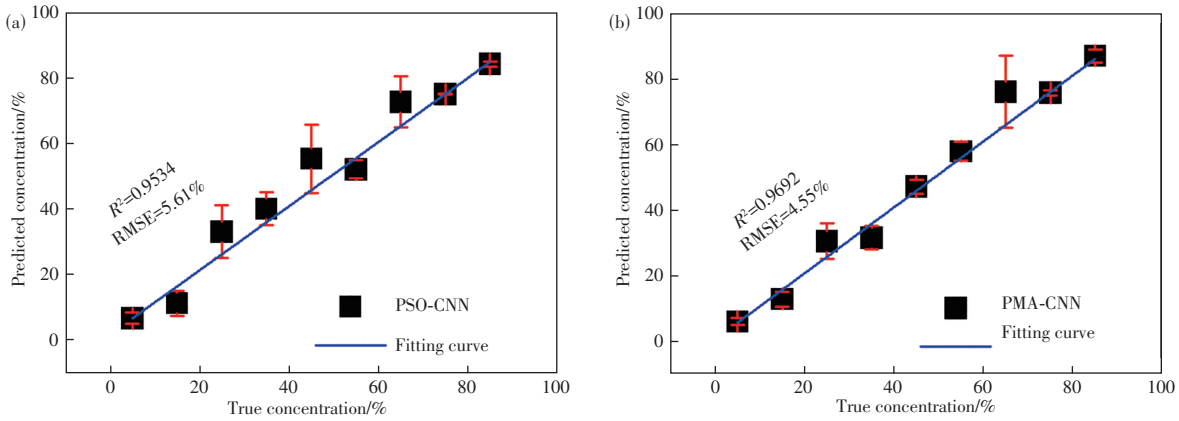


图9　模型预测性能对比

Figure 9　Comparison of model prediction performance.

同时，两种模型在低浓度和高浓度样本上的预测结果总体较为准确，而在部分中间浓度区间仍存在一定偏差，这可能与LIBS光谱信号波动、基体效应、自吸收效应以及样品烧蚀不均匀等因素有关。通过对比可知，尽管PSO优化能够显著提升CNN模型的预测性能，但MPA在超参数寻优过程中表现出更强的全局搜索能力，因此得到的模型在独立样本预测中更具优势。综合而言，MPA-CNN在本研究中表现出最佳的模型预测性能，更适用于铝硅合金中硅元素的LIBS定量分析。

3　结论

本文构建了LIBS结合元启发式优化1D-CNN的铝硅合金中硅含量定量分析方法，并系统开展了光谱预处理、特征筛选、模型建立与性能评价研究。结果表明，不同硅含量铝硅合金样品的LIBS光谱中，Si(Ⅰ)251.61和288.17 nm等特征谱线对硅含量变化具有良好的响应，可作为定量分析的重要依据。针对原始光谱中存在的基线漂移、连续背景及高频噪声干扰，采用BEADS算法进行去基线与降噪处理后，谱线峰形更加清晰，特征峰识别度和信噪比显著提高，为后续建模提供了稳定的数据基础。在特征提取方面，采用皮尔逊相关系数法对全波段光谱变量进行筛选，以相关系数绝对值大于0.6作为阈值，有效保留了与硅含量变化高度相关的敏感波长变量，降低了冗余信息干扰。建模结果表明，PLSR、SVR和1D-CNN均可实现硅元素定量预测，但预测性能依次提升。引入PSO和MPA对CNN超参数进行优化

后，模型精度进一步提高。其中，PSO-CNN在训练集上表现出更强的拟合能力，而MPA-CNN在交叉验证和独立预测中取得更高的R^2和更低的RMSE，显示出更优的泛化能力和稳定性。总体而言，本文提出的“BEADS预处理-相关系数筛选-元启发式优化1D-CNN建模”方法能够有效提升LIBS对铝硅合金中硅元素的定量检测性能，为复杂金属材料成分分析提供了新的技术思路。

参考文献

[1] 陈文杰，彭时勇，牟登志，等. 大规格铝合金铸锭铸造技术发展现状[J]. 铝加工，2026(1)：1-11.
Chen Wenjie，Peng Shiyong，Mou Dengzhi，et al. Development status of casting technology for large-size aluminum alloy ingots[J]. Aluminum Processing，2026(1)：1-11.

[2] 王祝堂. 开发有特色的汽车铝合金及其冲挤件[J]. 轻合金加工技术，2016，44(9)：1-5.
Wang Zhutang. Development of distinctive automotive aluminum alloys and their stamping-extrusion parts[J]. Light Alloy Fabrication Technology，2016，44(9)：1-5.

[3] 王景玄，刘芳玲，王文达. 铝合金管约束钢筋混凝土柱轴压性能研究[J]. 建筑结构学报，2025，46(4)：210-222.
Wang Jingxuan，Liu Fangling，Wang Wenda. Axial compression behavior of aluminum alloy tube-confined reinforced concrete columns[J]. Journal of Building Structures，2025，46(4)：210-222.

[4] 吴辉，朱超群. 加固铝合金机箱钎焊工艺[J]. 轻金属，2018(1)：54-56.
Wu Hui，Zhu Chaoqun. Brazing process for reinforced aluminum alloy chassis[J]. Light Metals，2018(1)：54-56.

[5] 樊富起，徐敏道. Si含量对汽车用铝合金组织和性能的影响[J]. 功能材料，2024，55(6)：6224-6229.
Fan Fuqi，Xu Mindao. Effect of Si content on microstructure and properties of automotive aluminum alloys[J]. Functional Materials，2024，55(6)：6224-6229.

[6] Wang Yongjin，Liao Hengcheng，Wu Yuna，et al. Effect of Si content on microstructure and mechanical properties of Al-Si-Mg alloys[J]. Materials & Design，2014，53：634-638.

[7] Sergueeva A V，Mara N A，Kuntz J D，et al. Shear band formation and ductility of metallic glasses[J]. Materials Science and Engineering：A，2004，383(2)：219-223.

[8] Qin Jian，Zhao Xiwen，Zhu Chunyao，et al. Determination of silicon and zirconium in silicon-zirconium alloy by potassium fluorosilicate titration and mandelic acid gravimetric method[J]. China Nonferrous Metallurgy，2024，53(3)：81-87.

[9] Becker J S. Inductively coupled plasma mass spectrometry (ICP-MS) and laser ablation ICP-MS for isotope analysis of long-lived radionuclides[J]. International Journal of Mass Spectrometry，2005，242(2/3)：183-195.

[10] Hou Xiandeng，Jones Bradley T. Inductively coupled plasma/optical emission spectrometry[J]. Encyclopedia of Analytical Chemistry，2000，9468-9485. DOI:10. 1002/9780470027318. a5110.

[11] Weindorf D C，Chakraborty S. Portable X-ray fluorescence spectrometry analysis of soils[J]. Soil Science Society of America Journal，2020，84(5)：1384-1392.

[12] El Haddad J，Canioni L，Bousquet B. Good practices in LIBS analysis：review and advices[J]. Spectrochimica Acta Part B：Atomic Spectroscopy，2014，101：171-182.

[13] Brunnbauer L，Gajarska Z，Lohninger H，et al. A critical review of recent trends in sample classification using laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) [J]. TrAC Trends in Analytical Chemistry，2023，159：116859. DOI：10. 1016/j. trac. 2022. 116859.

[14] Wang Junling，Yang Junjie，Bai Wei，et al. Thermal runaway and jet flame features of LIBS undergone high-rate charge/discharge：an investigation[J]. Journal of Energy Chemistry，2025，103：826-837.

[15] Cui Minchao，Shi Guangyuan，Deng Lingxuan，et al. Microstructure classification of steel samples with different heat-treatment processes based on laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) [J]. Journal of Analytical Atomic Spectrometry，2024，39(5)：1361-1374.

[16] Khan Z H，Ullah M H，Rahman B，et al. Laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) for trace element detection：a review[J]. Journal of Spectroscopy，2022，2022：3887038. DOI：10. 1155/2022/3887038.

[17] Zhang Ying，Zhang Tianlong，Li Hua. Application of laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) in environmental monitoring[J]. Spectrochimica Acta Part B：Atomic Spectroscopy，2021，181：106218. DOI：10. 1016/j. sab. 2021. 106218.

[18] Knight A K，Scherbarth N L，Cremers D A，et al. Characterization of laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) for application to space exploration[J]. Applied Spectroscopy，2000，54(3)：331-340.

[19] Rehse S J，Salimnia H，Miziolek A W. Laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS)：an overview of recent progress and future potential for biomedical applications[J]. Journal of Medical Engineering & Technology，2012，36(2)：77-89.

[20] Chen Wei. Research on rapid detection and quality classification of trace elements in coal based on LIBS[J]. Chemical Production and Technology, 2025, 31(6): 43-48, 10.

[21] Guo Guangmeng, Niu Guanghui, Shi Qi, et al. Multi-element quantitative analysis of soils by laser induced breakdown spectroscopy (LIBS) coupled with univariate and multivariate regression methods[J]. Analytical Methods, 2019, 11(23): 3006-3013.

[22] Pamu R, Ali Davari S, Darbar D, et al. Calibration-free quantitative analysis of lithium-ion battery (LiB) electrode materials using laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS)[J]. ACS Applied Energy Materials, 2021, 4(7): 7259-7267.

[23] Chen Tong, Sun Lanxiang, Yu Haibin, et al. Deep learning with laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) for the classification of rocks based on elemental imaging[J]. Applied Geochemistry, 2022, 136: 105135. DOI: 10. 1016/j. apgeochem. 2021. 105135.

[24] Song Weiran, Hou Zongyu, Gu Weilun, et al. Incorporating domain knowledge into machine learning for laser-induced breakdown spectroscopy quantification[J]. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 2022, 195: 106490. DOI: 10. 1016/j. sab. 2022. 106490.

[25] 诸葛雁翔，陈瀑，许育鹏，等. 深度学习在现代光谱分析技术中的应用研究进展[J]. 中国无机分析化学, 2026, 16(2): 163-176.
Zhuge Yanxiang, Chen Pu, Xu Yupeng, et al. Research progress on the application of deep learning in modern spectral analysis technology[J]. Chinese Journal of Inorganic Analytical Chemistry, 2026, 16(2): 163-176.

[26] Meissner M, Schmuker M, Schneider G. Optimized Particle Swarm Optimization (OPSO) and its application to artificial neural network training[J]. BMC Bioinformatics, 2006, 7(1): 125. DOI: 10. 1186/1471-2105-7-125.

[27] Wang Jidong, Fang Kaijie, Pang Wenjie, et al. Wind power interval prediction based on improved PSO and BP neural network[J]. Journal of Electrical Engineering and Technology, 2017, 12(3): 989-995.

[28] 刘天奇，程葳，张铉. 基于元启发式优化算法优化LSTM模型预测太阳能的应用研究[J]. 电子制作, 2025, 33(21): 102-106.
Liu Tianqi, Cheng Wei, Zhang Xuan. Research on the application of optimizing LSTM model to predict solar energy based on meta-heuristic optimization algorithm[J]. Practical Electronics, 2025, 33(21): 102-106.

[29] Kilichev D, Kim W. Hyperparameter optimization for 1D-CNN-based network intrusion detection using GA and PSO[J]. Mathematics, 2023, 11(17): 3724. DOI: 10. 3390/math11173724.

[30] Mitra S, Mukhopadhyay R, Chattopadhyay P. PSO driven designing of robust and computation efficient 1D-CNN architecture for transmission line fault detection[J]. Expert Systems with Applications, 2022, 210: 118178. DOI: 10. 1016/j. eswa. 2022. 118178.

[31] Ning Xiaoran, Selesnick I W, Duval L. Chromatogram baseline estimation and denoising using sparsity (BEADS)[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2014, 139: 156-167.

[32] 何继业，王泓鹏，万雄. 基于激光诱导击穿光谱的空间骨丢失标志物无创检测方法[J]. 光散射学报, 2025, 37(4): 669-675.
He Jiye, Wang Hongpeng, Wan Xiong. Non-invasive detection method for spatial bone loss markers based on laser-induced breakdown spectroscopy[J]. The Journal of Light Scattering, 2025, 37(4): 669-675.

[33] Xia Meng, Yang Ruifang, Yin Gaofang, et al. A method based on a one-dimensional convolutional neural network for UV-vis spectrometric quantification of nitrate and COD in water under random turbidity disturbance scenario[J]. RSC Advances, 2022, 13(1): 516-526.

[34] Clerc M, Kennedy J. The particle swarm-explosion, stability, and convergence in a multidimensional complex space[J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2002, 6(1): 58-73.

[35] Faramarzi A, Heidarinejad M, Mirjalili S, et al. Marine predators algorithm: a nature-inspired metaheuristic[J]. Expert Systems with Applications, 2020, 152: 113377. DOI: 10. 1016/j. eswa. 2020. 113377.

Quantitative Analysis of Aluminum Silicon Alloy by Based on Metaheuristic Optimization One-dimensional Convolutional Neural Network Combined With Laser-induced Breakdown Spectroscopy

Zhang Yanna

(*School of Avionics and Information, Jiangxi Aviation Vocational and Technical College, Fuzhou, Jiangxi 344000, China*)

Abstract Aluminium alloys are widely used in aerospace, automotive, electronics, and other fields. The silicon content significantly influences their mechanical properties, castability, and wear resistance. Although traditional analytical methods are accurate, they suffer from complex sample pretreatment and long analysis cycles. Laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) has emerged as an important technique for the analysis of aluminum alloy components due to its advantages of non-destructiveness, rapidity, and no sample preparation required. However, LIBS faces challenges such as noise and matrix effects in quantitative analysis, which compromise analytical accuracy. This study proposed a quantitative analysis method for aluminum alloys that integrates LIBS with a metaheuristic-optimized one-dimensional convolutional neural network (1D-CNN). Metaheuristic algorithms, including particle swarm optimization (PSO) and marine predator algorithm (MPA), were employed to optimize the CNN architecture and hyperparameters, thereby enhancing the analytical accuracy of silicon content in aluminum alloys. LIBS spectral data from various Al-Si alloy samples were collected and preprocessed. The PSO-CNN and MPA-CNN models were used to optimize hyperparameters such as convolutional kernel size and learning rate, and quantitative analysis models were established. The optimized CNN models were then applied to predict the silicon content in the samples. Their performance was evaluated against traditional regression models, namely support vector regression (SVR) and partial least squares regression (PLSR). The results demonstrated that the optimized PSO-CNN and MPA-CNN models achieve higher prediction accuracy for silicon content in Al-Si alloys, with coefficients of determination (R^2) approaching 0.97 and root mean square errors (RMSE) reduced to below 4.6%, significantly outperforming the conventional models. The optimized models not only improve prediction accuracy but also reduce training and prediction time, exhibiting strong real-time monitoring capability. The proposed method combining LIBS with a metaheuristic-optimized 1D-CNN offers a new technical approach for the rapid and precise determination of silicon content in Al-Si alloys, holding significant application value, particularly in the production and quality control of aluminum alloys.

Keywords laser-induced breakdown spectroscopy; metaheuristic optimization; one-dimensional convolutional neural network; aluminum silicon alloy; quantitative analysis

HIGHLIGHTS

1) A novel quantitative analysis method for aluminum-silicon alloys was proposed by integrating LIBS with a metaheuristic-optimized 1D-CNN.
2) Adaptive optimization of CNN hyperparameters was achieved, significantly improving prediction accuracy and computational efficiency.
3) A new technical route was provided for the rapid and accurate determination of silicon content in aluminum-silicon alloys, as well as for industrial online monitoring.