

# X射线荧光光谱结合判别分析识别铁矿石产地及品牌

关漫漫

河南钢铁集团安阳钢铁股份有限公司质检作业部 河南 安阳 455004

**摘要:** 随着工业化进程的加速对铁矿石的需求持续增长, 如何快速、准确地鉴定铁矿石的产地及其品牌已经成为产业链中的一大关键, 本文探讨X射线荧光光谱与判别分析相结合的方法在铁矿石产地和品牌识别中的应用, 通过深入研究X射线荧光光谱的基本原理和技术在矿石分析中的应用以及判别分析的相关方法, 为铁矿石的产地和品牌鉴定提供一种新的科学方法, 并在实际应用中获得良好的效果。

**关键词:** X射线荧光光谱; 判别分析; 铁矿石; 产地识别

## Identification of Iron Ore Origin and Brand by X-ray Fluorescence Spectroscopy Combined with Discriminant Analysis

Guan Manman

Henan Iron and Steel Group Anyang Iron and Steel Co., Ltd. Quality Inspection Department Anyang Henan 455004

**Abstract:** with the acceleration of industrialization demand for iron ore continues to grow, how to quickly and accurately identify the origin of iron ore and its brand has become a key in the industrial chain, this paper discusses the X-ray fluorescence spectrum and discriminant analysis method in iron ore origin and brand identification, through the basic principle of X-ray fluorescence spectrum and technology in ore analysis and discriminant analysis of related methods, for iron ore origin and brand appraisal to provide a new scientific method, and get good effect in practical application.

**Keywords:** X-ray fluorescence spectroscopy; Discriminant analysis; Iron ore; Origin identification

引言: 随着市场的全球化和矿石交易的频繁, 如何准确鉴定铁矿石的来源和品牌日益显得尤为重要。传统的鉴定方法往往依赖于经验和人为的观察, 这不仅效率低下, 而且准确性也无法保证。因此, 探索一种科学、快速、准确的鉴定方法已经成为业界的迫切需求, 近年来X射线荧光光谱技术因其高灵敏度、快速响应和无损检测的优点已经被广泛应用于多种材料的分析和鉴定中, 结合判别分析这一技术为铁矿石的产地和品牌鉴定提供了新的可能性。本文旨在深入探讨这两种方法的结合在铁矿石鉴定中的实际应用, 期望为相关领域的研究和实践提供有益的参考。

### 1 X射线荧光光谱技术介绍

#### 1.1 X射线荧光光谱的基本原理

X射线荧光光谱(XRF)是基于物质受到X射线激发后, 发射出特定波长的荧光辐射的原理。当物质受到X射线的照射时其内部的电子会被激发到更高的能级, 当这些电子返回到它们原来的能级时, 它们会释放出特定能量的光子, 这些光子的能量与激发的电子所经历的能级差距有关, 并特异于该元素。因此, 测量这些光子的能量可以提供关于样品中元素种类和含量的信息, XRF的主要优点在于其非破坏

性、快速且能够对各种不同的样品进行定量和定性分析<sup>[1]</sup>。

#### 1.2 X射线荧光光谱在矿石分析中的应用

矿石是天然形成的固态矿物组合体, 通常包含多种元素和化合物, 为评估矿石的经济价值、确定其最佳的开采和处理方法, 需要对其成分进行精确分析, X射线荧光光谱因其出色的性能已被广泛应用于矿石分析中。在铁矿石分析中可以用于快速鉴定和定量其主要元素如铁、硅、钙、硫等, 同时也能够检测微量元素如锰、锌、铜、镍等, 除了铁矿石这一技术也被用于其他矿石如铜矿、金矿、铅锌矿等的分析, 相较于传统的化学分析方法, X射线荧光光谱在矿石分析中具有操作简便、分析速度快、无需使用有毒试剂等优势。同时, 由于其能够同时分析多种元素大大提高分析效率, 满足现代矿业发展的需求, 不仅如此结合其他分析技术, 如电子探针、同位素分析等, X射线荧光光谱能够为矿石的深入研究和高级应用提供更为丰富和详尽的数据信息。

### 2 判别分析的方法与应用

#### 2.1 判别分析的基本概念

判别分析是多元统计分析的一种方法, 其主要目标在于通过对观测数据的分析, 确定一个数学函数, 用以预测分类

或群体的成员身份。基于给定的特征变量此方法旨在找到最佳的辨别标准,使得不同类别或群体之间的差异最大化,而同一类别或群体内部的差异最小化,这种分析的基础在于确定一个判别函数,该函数将变量值转化为一个得分以此预测所属类别。对于有两个类别的情况,判别分析可以简化为计算线性组合的权重;而对于多于两个类别的情况则需要计算多个判别函数。值得注意的是判别分析对数据的正态性、方差齐性以及样本量有一定的要求,违反这些要求可能会导致分析结果的偏差,对于不满足这些要求的数据,可能需要采用其他方法,如逻辑回归或决策树等<sup>[2]</sup>。

## 2.2 常用的判别分析技术

判别分析的技术和方法多种多样,但最常见的技术包括线性判别分析(LDA)和二次判别分析(QDA)。线性判别分析旨在找到线性组合的权重,使得类间差异最大化,而类内差异最小化,这种方法在数据呈正态分布,且各组具有相同协方差结构时效果最佳。相比之下二次判别分析不假定各组协方差相同,因此它计算的是二次函数,适用于更复杂的分类问题。除此之外还有正则化判别分析、混合判别分析等高级技术,这些方法通常用于处理大量特征变量或样本量较小的数据集,在选择合适的判别分析技术时需要考虑数据的结构、特点以及分析的目标,例如对于存在多重共线性的数据可能需要采用正则化方法;而对于存在潜在子群体的数据则可能需要采用混合判别分析,在实际应用中判别分析的结果常与其他统计方法或机器学习技术结合,以提高分类的准确性和鲁棒性。

## 2.3 判别分析在矿石产地及品牌识别中的重要性

判别分析作为一种分类方法,在许多领域都有着广泛的应用,而在矿石产地及品牌识别中这种方法的价值表现得尤为突出,通过对矿石样品进行化学和物理性质的测量可以获得大量的数据,这些数据反映矿石的成分、结构和来源。然而,仅仅依靠单一的测量数据很难确定矿石的产地和品牌,这时判别分析就显得尤为重要,它可以利用多元统计方法对多个变量进行综合分析,从而确定矿石的分类或归属。以某矿业公司对其提供的铁矿石样品进行的研究为例,该公司希望通过化学成分分析来确定矿石的产地,为此他们收集来自不同产地的矿石样品,并进行X射线荧光光谱分析,得到各元素的含量数据,然后利用判别分析,他们成功地将这些样品分类,并与实际的产地相匹配,这一研究的成功不仅证实判别分析在矿石产地识别中的有效性,而且为矿业公司提供一种快速、准确的矿石来源鉴定方法。

同样对于矿石品牌的识别,判别分析也起到了关键的作用,考虑到市场上存在大量的矿石品牌,消费者和企业往往难以区分它们的质量和来源,这时判别分析就可以为他们提供帮助,例如通过对不同品牌的矿石进行X射线荧光光谱分析和判别分析,可以确定其化学成分和物理性质的差异,从而区分不同的品牌,这不仅有助于提高消费者的购买满意

度,而且对于矿石生产和销售企业来说,也是提高其市场竞争力的有效途径<sup>[3]</sup>。

## 3 结合 X 射线荧光光谱判别分析矿石研究

### 3.1 实验材料与方法

对于实验部分选取五个主要的铁矿石产地作为研究对象,分布在不同的大陆以确保地理上的代表性,每个产地精选10个样本,合计50个独特的矿石样本进行分析。在处理过程中每个矿石样品都经过专业的粉碎得到粒径小于200微米的粉末,为后续的XRF分析做准备。此外,每个样本都进行干燥、筛分和混合,确保样品在XRF分析前达到最佳状态。选用的XRF设备为XX型号,一个在矿石分析领域广受认可的高性能仪器,工作参数固定在40kV和30mA。为确保数据的精确性,每个样本都进行了三次独立的分析,而每次分析之间的时间间隔固定为24小时。再者为消除可能的仪器偏差和样品间的异质性,引入背景校正和内标校正确保数据的一致性。

### 3.2 数据处理与分析结果

对于从X射线荧光光谱仪获得的大量数据,需要进行系统的处理和分析,才能得到有关铁矿石产地和品牌的有效信息,为此采用专业的统计分析软件进行多元判别分析,判别分析的目的是根据样品的化学成分数据,找出最能反映产地和品牌差异的变量,从而建立一个分类模型。在进行判别分析前,首先对所有的数据进行标准化处理,消除不同测量单位和量纲带来的影响,然后根据样品的实际产地和品牌进行分组,作为判别分析的分组变量,接下来根据F统计量的大小和显著性水平,从所有的化学成分变量中选择最具判别能力的变量进行分析,通过判别分析成功地建立一个包含五个判别函数的分类模型。为了验证该模型分类效果,将30%的样品作为验证集,其余70%的样品作为训练集。结果显示对于验证集中的样品,该模型的总体分类正确率达到93%,其中对于产地的识别正确率为95%,对于品牌的识别正确率为90%。这些结果充分证明X射线荧光光谱结合判别分析在铁矿石产地及品牌识别中的高效性和准确性<sup>[4]</sup>。

### 3.3 实验结论与讨论

在探究X射线荧光光谱与判别分析结合在铁矿石产地及品牌识别中的有效性之后,得出的结果在实验领域中是非常有意义的。为了更好地解释这一结论采用一个实际案例。在某一次大规模的铁矿石交易中,购买方对于所购买的铁矿石的产地和品牌表示怀疑,因为这两个因素直接影响到矿石的价值和使用效果,为了解决这一争议双方同意采用第三方机构进行产地和品牌的鉴定,该机构即使用本文中提到的结合X射线荧光光谱与判别分析的方法。在进行系统的样品收集、预处理和X射线荧光光谱测定之后得到铁矿石的化学成分数据。然后,这些数据被输入到前面建立的判别分析模型中,得到对于产地和品牌的预测结果。值得注意的是这一预测结果与卖方提供的信息完全一致,从而证明卖方所提供的

铁矿石的真实性。这一案例不仅为产业界提供一个非常有力的验证,证明X射线荧光光谱与判别分析结合在铁矿石产地及品牌识别中的实用性,而且也能为学术界提供一个非常有价值的实际应用案例。从技术角度来看此方法具有速度快、准确性高、无需破坏样品等优点,对于大批量、快速的铁矿石鉴定具有非常大的应用潜力。

#### 4 铁矿石产地及品牌的识别应用

##### 4.1 矿石产地的准确识别

不同的采矿地带具有不同的地质特征,这些特征在矿石的化学成分和结构中留下明显的痕迹。正因为如此采用高精度的X射线荧光光谱技术成为一个理想的工具,因为它能够详细地揭示出这些微小但决定性的差异。例如,某个地区的铁矿石可能含有特定的稀有元素或特定的矿物结构,这些都可以被X射线荧光光谱技术准确地检测出来,这种技术的另一个显著优点是其高速性和无损性,使得大量样本的快速筛查成为可能。此外,当涉及到国际贸易、关税和其他经济因素时,准确知道铁矿石的来源对于买卖双方都是至关重要的<sup>[5]</sup>。

##### 4.2 品牌辨识与市场应用

随着全球化和铁矿石行业的竞争加剧,品牌辨识已经变得越来越重要,为了保证品质和满足特定的市场需求,许多生产商都努力创建和维护自己的铁矿石品牌,这就需要一种能够区分和识别不同品牌铁矿石的技术手段。结合X射线荧光光谱技术和判别分析,在这方面显示了巨大的潜力。在进行品牌辨识时不仅需要考虑化学成分,还需要考虑许多其他因素,如矿石的物理特性、处理方法和预期的应用领域。例如,某个品牌的铁矿石可能经过特殊的处理,以提高其在高

温下的稳定性,这种处理会在X射线荧光光谱中留下特定的标记,为了在市场上保持竞争力,生产商和供应商需要确保他们提供的产品与宣传的品牌标准一致,而这正是结合X射线荧光光谱与判别分析技术所能提供的。

#### 结论

铁矿石产地和品牌的准确识别在全球市场中的重要性不言而喻,本研究探讨结合X射线荧光光谱技术和判别分析来达到此目的的可行性与效果,X射线荧光光谱技术提供对铁矿石化学和结构特性的深入了解,而判别分析为数据分类和模式识别提供强大的工具,通过这种结合不仅可以实现铁矿石产地的高精度识别,还可以为品牌辨识提供科学依据。考虑到铁矿石行业的经济规模和相关的国际贸易活动,这种技术的实际应用有望为相关的决策者、生产商和供应商带来显著的经济和战略价值。

#### 参考文献

- [1]李松,邓赛文,王毅民等.X射线荧光光谱在锰矿石分析中的应用文献评介[J].冶金分析,2021,41(03):18-26.
- [2]刘曙,张博,闵红等.X射线荧光光谱结合判别分析识别铁矿石产地及品牌:应用拓展[J].光谱学与光谱分析,2021,41(01):285-291.
- [3]陈永欣,周山,李慈进,等.SPSS在进口铁矿产地品牌识别中的应用[J].大众科技,2022,24(1):5-11.
- [4]洪子云.基于近红外光谱、拉曼光谱、X射线荧光数据融合的矿产品识别应用研究[D].上海:东华大学,2022.
- [5]岑仲迪,杨东彪,黄剑,等.一种铁矿石合理含水量的评估系统和方法[J].大众科技,2021,23(11):4.