

## 典型块状煤的可见-近红外光谱特征研究

杨 恩, 王世博, 葛世荣\*

中国矿业大学机电工程学院, 江苏 徐州 221116

**摘 要** 因可见-近红外波段反射光谱测试方便, 仪器成本较低, 适用于在线分析, 为此针对煤在可见-近红外波段的反射光谱曲线特征规律及其产生机理进行了研究分析。从晋、鲁、宁、吉地区煤矿收集了无烟煤、烟煤、褐煤三大类型中的 12 种典型煤样, 按煤阶从高到低具体包括无烟煤一号、无烟煤二号、贫煤、贫瘦煤、瘦煤、焦煤、肥煤、1/3 焦煤、气肥煤、气煤、褐煤一号、褐煤二号, 在实验室利用地物光谱仪采集了块状煤样在可见-近红外波段的反射光谱曲线。通过对光谱曲线特征分析, 发现无烟煤的反射光谱曲线整体上趋于水平方向, 吸收谷特征不明显, 随煤阶的降低, 光谱反射率、近红外波段光谱斜率整体上呈增加趋势, 较明显的吸收谷特征增多且吸收强度增加, 有 13 个较明显的吸收谷特征波段。通过 X 射线衍射分析(XRD)测定了煤样的碳材料结构和矿物成分, 煤非晶质性分子结构的芳构化趋势对煤阶升高时光谱反射率降低、反射曲线趋于平缓起到主要作用。当煤阶降低时, 以脂肪侧链为主的有机吸收基团的中红外波段基频在近红外波段的倍频和合频产生众多吸收叠加, 绝大多数吸收谷特征不明显, 相对较为明显的吸收谷产生在 1 700 和 2 300 nm 附近。同时含 Fe 等过渡金属的矿物、H<sub>2</sub>O、粘土矿物等无机物成分也是煤反射光谱曲线吸收谷特征增多的因素。通过对实验煤样 X 射线荧光分析(XRF)和工业分析测定了煤样中 Fe 和 Al 等矿物元素成分含量和空气干燥基水分、灰分、挥发分、固定碳含量, 得出煤反射光谱曲线的近红外波段光谱斜率与挥发分产率、固定碳含量分别呈正、负相关性。H<sub>2</sub>O 谱带吸收深度之和与内在水含量线性相关性较好, Fe 和 Al 含量与相关波段吸收谷深度之和基本呈线性关系, 而主要由有机基团倍频和合频所产生的 1 700 和 2 300 nm 附近两处吸收谷深度之和与挥发分产率线性相关性较差。获得典型块状煤种的可见-近红外波段反射光谱特征, 为煤矿区高光谱遥感以及煤光谱数据库的建立提供依据, 也为直接利用可见-近红外波段的反射光谱曲线波形特征快速、低成本、定性识别煤种类提供参考; 同时对煤矿用煤炭探测光谱传感器的研制具有重要意义。

**关键词** 煤类; 可见-近红外光谱; 反射率; 光谱特征; 成分分析

**中图分类号:** TP79      **文献标识码:** A      **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2019)06-1717-07

### 引 言

越来越多的光谱分析技术用在了煤矿高光谱遥感、煤研识别、煤种鉴别、煤质分析等煤矿勘测和煤检测领域<sup>[1-4]</sup>。可见-近红外波段(380~2 526 nm)反射光谱测试方便, 仪器成本较低, 适用于在线分析。然而由于煤分子结构的非晶质性, 主要包括了芳香结构为主的环状大分子化合物和链状结构为主的低分子化合物, 以上结构中的有机吸收基团的基频主要集中在中红外(4 000~400 cm<sup>-1</sup>)范围, 使得煤绝大多数

明显的吸收峰出现在中红外波段<sup>[5]</sup>。而在近红外波段(14 286~4 000 cm<sup>-1</sup>), 煤的吸收峰为各类有机吸收基团的倍频和合频, 吸收峰重合叠加数目繁多且大多数较微弱<sup>[6-7]</sup>。同时煤中又含有石英、粘土矿物等少量矿物成分, 也对近红外波段吸收产生影响, 在可见光波段煤的吸收特征主要受到铁等过渡金属矿物的影响<sup>[5-6, 8]</sup>。以上因素使得煤在可见-近红外波段反射光谱中明显的吸收谷较少。

煤光谱分析应用领域中, 多采用数据挖掘、机器学习等模式识别、化学计量学的间接建模方法<sup>[1, 3-4, 7]</sup>。这类方法是建立在统计学习基础之上, 通过采集大量煤样本的光谱数据

**收稿日期:** 2018-05-12, **修订日期:** 2018-10-10

**基金项目:** 国家自然科学基金联合基金项目(U1610251, U1510116), 国家重点基础研究发展计划(973)项目(2014CB046301), 江苏省高校优势学科建设工程项目(PAPD)资助

**作者简介:** 杨 恩, 1986 年生, 中国矿业大学机电工程学院博士研究生      e-mail: yangen635@126.com

\* 通讯联系人      e-mail: gesr@cumt.edu.cn

结合煤成分分析结果训练预测模型, 预测精度较高。然而以上间接分析方法并未对煤反射光谱曲线特征及其产生机理进行研究分析。

因煤分子结构的特点, 煤吸收光谱的研究多集中在中红外波段<sup>[5-9]</sup>, 少数学者对煤在可见-近红外波段反射光谱特征进行了相关研究。Cloutis<sup>[6]</sup>研究指出在可见-近红外波段煤阶越低, 芳香结构排列越无序, 导致了煤的红色斜率光谱, 即较低阶煤光谱反射率随波长增加而增大。Kim<sup>[10]</sup>选出了与煤中 C, H 和 O 等主要组成元素以及反映煤质的参数最相关的近红外光谱吸收波段, 包括 1 680, 1 942, 2 100, 2 180 和 2 300 nm, 分析了产生吸收特征的基团。Song<sup>[11]</sup>指出煤在 400~2 500 nm 范围光谱反射率随碳含量的增加而减小, 煤光谱中 1 400 与 1 900 nm 水和羟基吸收深度也是随碳含量的增加而减小, 1 900 nm 处的吸收特征比 1 400 nm 处更明显。Feng<sup>[12]</sup>研究了低阶煤中水的发生能态以及与煤体结构的物理化学相互作用, 表明煤阶越低, 越易产生水吸附, 对煤光谱中水谱带的影响越大。然而还未有针对我国煤炭分类中典型煤种的可见-近红外波段光谱特征的系统性研究。研究不同类型煤在可见-近红外波段的反射光谱曲线特征及变化规律, 并分析光谱特征产生的物质机理, 为煤矿高光谱遥感中煤光谱数据库的建立提供依据, 也为直接利用光谱曲线波形特征快速、低成本定性识别煤种类提供参考。

本文分析了 12 种我国典型块状煤样的反射光谱曲线特征, 研究了煤阶变化时其反射光谱的变化规律, 分析了反射光谱特征产生的物质成分影响以及反射光谱曲线特征参数与物质成分的相关性。

## 1 实验部分

### 1.1 煤样收集

按照 GB/T 5751《中国煤炭分类》中我国的煤种类, 从晋、鲁、宁、吉地区的 11 个煤矿收集了最为典型的 12 种煤类块状样品, 试样包括了无烟煤、烟煤、褐煤三个煤大类。煤样类别、相应产地及煤矿如表 1 所示, 1~12 号煤样按煤阶由高到低排序。

表 1 实验煤样  
Table 1 Coal samples

| 煤种大类 | 煤样编号 | 类别     | 产地及煤矿   |
|------|------|--------|---------|
| 无烟煤  | 1    | 无烟煤一号  | 宁夏汝其沟煤矿 |
|      | 2    | 无烟煤二号  | 山西新景煤矿  |
|      | 3    | 贫煤     | 山东东风煤矿  |
|      | 4    | 贫瘦煤    | 山东东风煤矿  |
|      | 5    | 瘦煤     | 山东埠村煤矿  |
| 烟煤   | 6    | 焦煤     | 山西马兰煤矿  |
|      | 7    | 肥煤     | 山东曹庄煤矿  |
|      | 8    | 1/3 焦煤 | 山东八一煤矿  |
|      | 9    | 气肥煤    | 山东茅庄煤矿  |
|      | 10   | 气煤     | 山东兴隆庄煤矿 |
| 褐煤   | 11   | 褐煤一号   | 山东五图煤矿  |
|      | 12   | 褐煤二号   | 吉林舒兰煤矿  |

### 1.2 方法及仪器

对收集到的块状煤样表面打磨平整, 使每块煤样大小为 10 cm×10 cm×6 cm。将试样放置于空气干燥箱中干燥直至质量恒定, 所用仪器为德国 Binder FD115 干燥箱和 Sartorius BS124S 电子天平, 干燥后放置于干燥自封塑料袋中密封保存。

将干燥后的煤样平放于暗室黑色试验台上, 卤素灯光源以 45°入射角照射试样表面, 使用美国 ASD FieldSpec 地物光谱仪测量煤样表面反射光谱, 光谱波长范围为 350~2 500 nm, 采集数据间隔为 1 nm, 利用 Spectralon 材料板进行光谱反射率参照标定。将光谱仪光纤探头垂直放置于样品 10 cm×10 cm 表面中心上方 15 cm 处, 所测光谱为光纤探头 25°视角所形成圆锥在煤块平整表面的直径为 7 cm, 面积约 40 cm<sup>2</sup> 底面圆区域的平均反射光谱。煤块试样每旋转 90°采集一次光谱数据, 共采集 10 条光谱曲线, 每个试样在四个方向共获得 40 条光谱曲线, 并计算这 40 条光谱曲线的平均值作为该试样的光谱。由于光谱仪在 350~399 和 2 451~2 500 nm 的两边缘波长区间具有较强的电流噪声, 只取 400~2 450 nm 波长区间的光谱曲线。

采集光谱后, 将光谱测量的表面区域打磨下煤碎屑, 研成粉末, 分成三部分进行成分分析: (1) X 射线衍射分析 (XRD), 仪器为德国 Bruker D8 Advance; (2) X 射线荧光分析 (XRF), 仪器为德国 Bruker Spectrometer S8 Tiger; (3) 煤炭工业分析, 仪器为德国 Binder FD115 干燥箱、Sartorius BS124S 电子天平, 英国 Carbolite AAF12/18 灰化马弗炉、VMF10/6 挥发分马弗炉。

## 2 结果与讨论

### 2.1 煤反射光谱曲线特征

实验测得表 1 中 12 种煤样的光谱反射率曲线如图 1 所示。由图 1 可知, 煤在可见-近红外波段的整体光谱反射率随煤阶的升高而降低。煤化程度最高的两种无烟煤光谱曲线近似水平, 反射率值较低。所有煤种在近红外波段(780~2 450 nm)的光谱反射率随波长的增加而呈增加趋势(两种褐煤在 1 900 nm 波段附近开始下降)。图 1 列出了煤样较明显的 13 个局部吸收谷波段, 包括: 455, 514, 591, 662, 770, 900, 1 106, 1 342, 1 418, 1 698, 1 905, 2 196 和 2 303 nm, 结合煤阶的变化可知, 455~1 342 nm 各吸收谷较明显地出现在各阶煤样中, 当煤阶越低时 1 418~2 303 nm 各吸收谷越明显。

图 2 列举了本实验中四个最具代表性煤样的反射光谱: 煤阶最高的无烟煤一号(1)、煤阶最低的褐煤二号(12), 烟煤中煤阶最高的贫煤(3)、煤阶最低的气煤(10)。为了表示反射曲线在近红外波段随波长的整体变化趋势, 从 780 nm 波长点  $P_{i-780}$  ( $780, Ref_{i-780}$ ) 到反射率最高点  $P_{i-end}$  ( $\lambda_{i-end}, Ref_{i-end}$ ) 进行连线, 如图 2 所示, 计算反射曲线光谱斜率(以下简称光谱斜率), 即连线的斜率  $K_i$

$$K_i = \frac{Ref_{i-end} - Ref_{780}}{\lambda_{i-end} - 780} \quad (1)$$

其中  $i=1, 2, \dots, 12$  为煤样编号。使用吸收谷深度  $H_{i-j}$  表征反射光谱吸收谷的吸收程度, 其中  $j$  为吸收谷所在波段<sup>[13]</sup>。

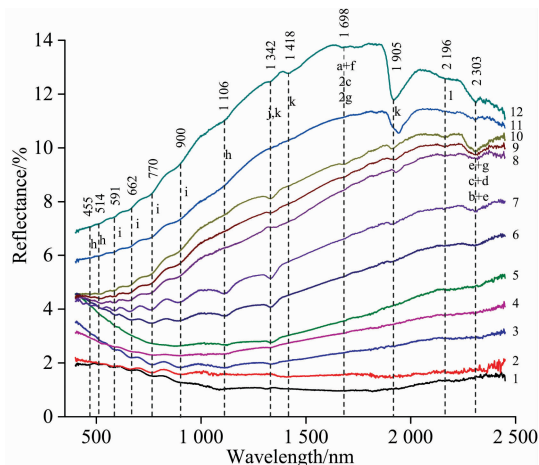


图 1 典型煤种的可见-近红外波段反射光谱曲线及较明显局部吸收波段

- 1: 无烟煤一号; 2: 无烟煤二号; 3: 贫煤; 4: 贫瘦煤;
- 5: 瘦煤; 6: 焦煤; 7: 肥煤; 8: 1/3 焦煤; 9: 气肥煤;
- 10: 气煤; 11: 褐煤一号; 12: 褐煤二号

Fig. 1 Spectral reflectance curves and bands of obvious local absorption valleys of the typical coal samples in the visible and near-infrared range

1: No. 1 anthracite; 2: No. 2 anthracite; 3: Meager coal; 4: Meager lean coal; 5: Lean coal; 6: Coking coal; 7: Fat coal; 8: 1/3 coking coal; 9: Gas fat coal; 10: Gas coal; 11: No. 1 lignite; 12: No. 2 lignite

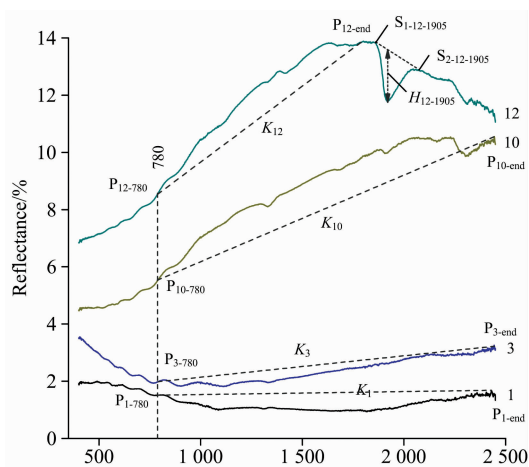


图 2 煤样反射光谱曲线特征参数化表示

Fig. 2 Parameterized representation of features of spectral reflectance curves of the coal samples

由式(1)计算所得图 1 中煤样的光谱斜率随煤阶增加的变化趋势如图 3 所示。由图 3 可知, 煤的光谱斜率随煤阶的增加呈现减小的趋势。低阶无烟煤间光谱斜率变化相对较小, 当煤阶降低到褐煤时, 光谱斜率快速增加。

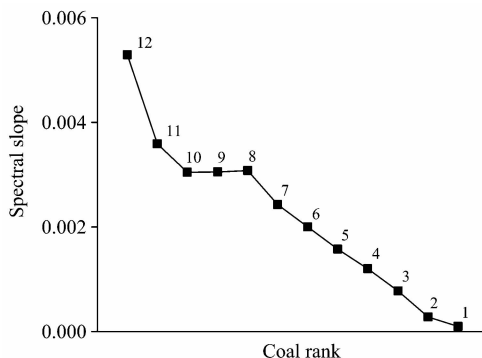


图 3 煤样光谱斜率随煤阶增加的变化趋势

- 1: 无烟煤一号; 2: 无烟煤二号; 3: 贫煤; 4: 贫瘦煤;
- 5: 瘦煤; 6: 焦煤; 7: 肥煤; 8: 1/3 焦煤; 9: 气肥煤;
- 10: 气煤; 11: 褐煤一号; 12: 褐煤二号

Fig. 3 Variation trend of spectral slopes of the coal samples with increasing coal rank

1: No. 1 anthracite; 2: No. 2 anthracite; 3: Meager coal; 4: Meager lean coal; 5: Lean coal; 6: Coking coal; 7: Fat coal; 8: 1/3 coking coal; 9: Gas fat coal; 10: Gas coal; 11: No. 1 lignite; 12: No. 2 lignite

### 2.2 煤结构成分对反射光谱曲线特征的影响

无烟煤一号(1)、贫煤(3)、气煤(10)、褐煤二号(12)四种最具代表性煤样的碳材料结构和矿物成分 XRD 分析结果如图 4 所示。煤样 XRD 曲线在  $25^\circ$  和  $43^\circ$  附近的 (002) 和 (100) 衍射峰随煤阶的升高而愈加明显, 表明高阶煤样的芳香环缩合层状结构较多, 具有类似石墨的片层结构或具有石墨化趋势<sup>[14]</sup>。由于芳香分子中电子跃迁趋向于较长波长方

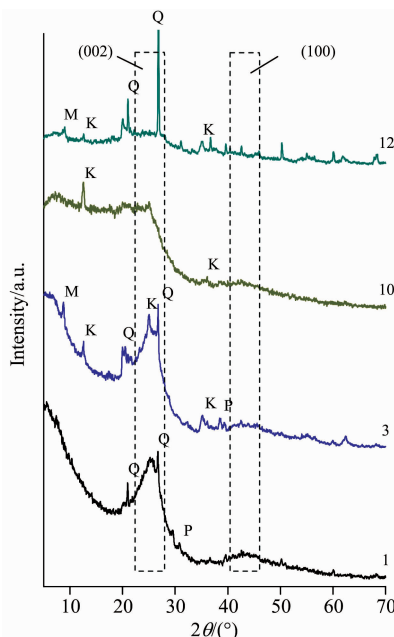


图 4 四种最具代表性煤样的 XRD 谱图

Fig. 4 X-ray diffraction spectra of four most representative coal samples

Q: Quartz; K: Kaolinite; P: Pyrite; M: Mica

向, 芳构化程度增加导致吸收边缘, 即长波长方向吸收系数增大, 使得芳构化程度较高的高阶煤样整体反射率较低且反射光谱曲线趋于水平<sup>[6]</sup>。

随煤阶的降低, 芳香环缩合减少, 决定挥发分的脂肪侧链和含氧官能团结构增多<sup>[5, 9]</sup>。脂肪侧链、含氧官能团、芳香结构的光谱吸收基频位于中红外波段(4 000~400 cm<sup>-1</sup>), 煤近红外波段吸收谷特征是由以脂肪侧链为主的各有机基团基频的倍频和合频所致, 同时受矿物成分、水吸收谱带影响。因此挥发分产率较高的低阶煤种吸收谷特征受挥发分影响。图 4 中 XRD 结果显示煤样中矿物成分以石英、粘土矿物、含铁矿物为主。引起图 1 中各个吸收谷产生的基本吸收基团、离子及其波段代号见表 2, 吸收谷产生最为可能的波段代号、倍频和合频的波段代号组合形式如图 1 中所示<sup>[6, 8, 10]</sup>。图 1 中两种褐煤 1 905 nm 附近 H<sub>2</sub>O 振动谱带吸收谷最为强烈, 原因为褐煤煤化程度低, 孔裂隙大, 毛细孔吸附力强, 内在水分经空气干燥时难以去除<sup>[12]</sup>。

表 2 引起煤样反射光谱明显吸收谷的主要基团和离子  
Table 2 The major groups and ions related with obvious absorption valleys of reflectance spectra of the coal samples

| 波段代号 | 吸收基团和离子  |
|------|--|
| a    | 芳香氢 C—H 伸缩(3 030 cm <sup>-1</sup> )                              |
| b    | CH <sub>3</sub> 对称伸缩(2 875 cm <sup>-1</sup> )                    |
| c    | CH <sub>3</sub> 非对称伸缩(2 950 cm <sup>-1</sup> )                   |
| d    | CH <sub>3</sub> 对称弯曲(1 375 cm <sup>-1</sup> )                    |
| e    | CH <sub>3</sub> 和 CH <sub>2</sub> 非对称弯曲(1 450 cm <sup>-1</sup> ) |
| f    | CH <sub>2</sub> 对称伸缩(2 850 cm <sup>-1</sup> )                    |
| g    | CH <sub>2</sub> 非对称伸缩(2 920 cm <sup>-1</sup> )                   |
| h    | Fe <sup>2+</sup> 为主过渡金属电子跃迁                                      |
| i    | Fe <sup>3+</sup> 为主过渡金属电子跃迁                                      |
| j    | —OH 倍频   |
| k    | H <sub>2</sub> O 振动  |
| l    | 粘土矿物 Al—OH 弯曲  |

### 2.3 煤反射光谱曲线特征参数与物质成分含量的相关性

煤光谱特征与物质成分含量关系的研究主要在中红外波段范围, 如采用不同波段吸收谷深度比值与煤质指标的分布点图<sup>[6]</sup>。为在可见-近红外波段进一步研究煤反射光谱曲线特征与其关联基团和离子的关系, 对所有煤样的光谱斜率  $K_i$ 、吸收谷深度之和  $H_{n-i}$  与相关基团、离子所对应的物质成分含量进行相关性分析。其中,  $n$  代表吸收谷对应物质成分, 例如根据图 1 中 H<sub>2</sub>O 吸收谱带, 第  $i$  个煤样 H<sub>2</sub>O 吸收谷深度之和计算如式(2)

$$H_{H_2O-i} = \sum H_{i-j} = H_{i-1\ 342} + H_{i-1\ 418} + H_{i-1\ 905} \quad (2)$$

以此类推, 计算图 1 中各煤样物质成分吸收谷深度之和。表 3 给出了所有实验煤样 XRF 分析结果中 SiO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 和 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 的含量以及空气干燥基水分、灰分、挥发分、固定碳的工业分析结果。

表 3 12 类煤样的 XRF 矿物元素分析和工业分析/%  
Table 3 Mineral element concentrations using X-ray fluorescence analyses and proximate analyses of 12 coal samples/%

| 煤样编号 | XRF 分析           |                                |                                | 工业分析  |       |       |      |
|------|------------------|--------------------------------|--------------------------------|-------|-------|-------|------|
|      | SiO <sub>2</sub> | Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 固定碳   | 挥发分   | 灰分    | 水分   |
| 1    | 2.63             | 1.01                           | 0.87                           | 89.86 | 2.74  | 6.05  | 1.35 |
| 2    | 4.61             | 1.17                           | 0.81                           | 84.26 | 6.14  | 8.22  | 1.38 |
| 3    | 6.18             | 1.40                           | 1.19                           | 75.32 | 13.57 | 9.95  | 1.16 |
| 4    | 6.46             | 0.98                           | 0.44                           | 71.73 | 17.86 | 9.39  | 1.02 |
| 5    | 7.13             | 1.20                           | 0.54                           | 74.32 | 14.31 | 9.91  | 1.46 |
| 6    | 3.05             | 0.84                           | 1.08                           | 69.49 | 22.51 | 6.94  | 1.06 |
| 7    | 3.96             | 1.00                           | 1.25                           | 65.84 | 23.06 | 9.22  | 1.88 |
| 8    | 2.48             | 1.23                           | 0.89                           | 59.02 | 31.78 | 7.55  | 1.65 |
| 9    | 2.92             | 1.68                           | 0.93                           | 50.38 | 41.02 | 7.11  | 1.49 |
| 10   | 2.05             | 2.09                           | 0.98                           | 54.23 | 35.67 | 8.16  | 1.94 |
| 11   | 17.20            | 1.07                           | 0.86                           | 35.24 | 37.86 | 24.13 | 2.77 |
| 12   | 21.05            | 1.75                           | 1.03                           | 30.56 | 39.09 | 26.81 | 3.54 |

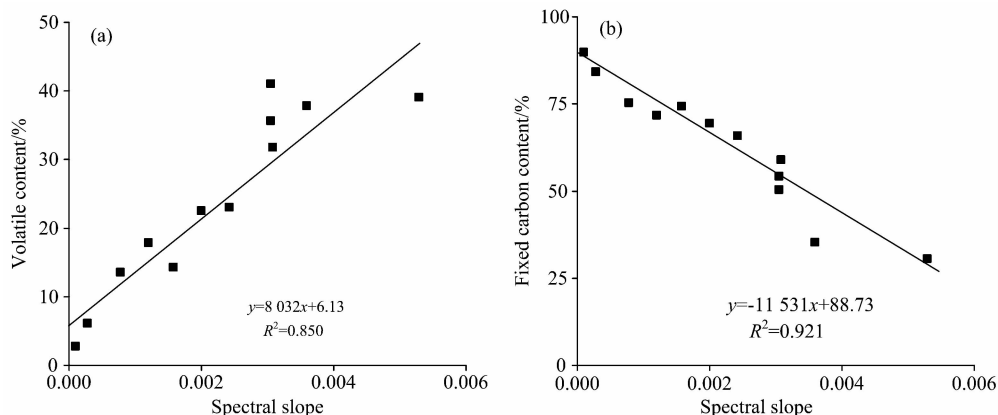


图 5 煤样工业分析有机成分含量与反射光谱斜率的相关性分析

(a): 挥发分产率; (b): 固定碳含量

Fig. 5 Correlation analyses between organic component contents by proximate analyses and reflectance spectral slopes of the coal samples

(a): Volatile content; (b): Fixed carbon content

工业分析有机成分含量中挥发分产率、固定碳含量反应了煤样的煤化程度,与光谱斜率  $K_i$  的相关性分析结果如图 5 所示。由图 5 可知,块状煤样挥发分产率、固定碳含量分别与光谱斜率表现出了较好的正、负线性相关性。

根据式(2)和图 1 中各吸收谷波段对应的吸收基团和离子,取 1 698 和 2 303 nm 波段吸收谷深度之和与挥发分产率,1 342, 1 418 和 1 905 nm 波段吸收谷深度之和与水分含量,455, 514, 591, 662, 770, 900 和 1 106 nm 波段吸收谷深度之和与 XRF 分析  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  含量,2 196 nm 波段吸收谷深度与 XRF 分析  $\text{Al}_2\text{O}_3$  含量,各自进行相关性分析,分析结果如图 6 所示。由图 6 可知,煤样中内在水分含量与相关波段吸收谷深度之和相关性最高,决定系数达到 0.872。XRF 分

析  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  和  $\text{Al}_2\text{O}_3$  含量与相关波段吸收谷深度之和基本呈线性关系。而煤样挥发分产率与 1 698 和 2 303 nm 波段吸收谷深度之和线性相关性较差,产生的原因为煤中脂肪侧链、含氧官能团种类繁多,脂肪侧链为主的各有机基团在近红外波段产生数量庞大的倍频和合频微弱吸收谷,1 698 nm 波段较弱吸收和 2 303 nm 波段较强吸收并不能充分反映煤中与挥发分有关的主要有机吸收基团<sup>[6]</sup>。此外无机矿物中的  $\text{Mg}-\text{OH}$ ,  $\text{Fe}-\text{OH}$  和  $\text{CO}_3^{2-}$  分子振动在 2 303 nm 附近也具有吸收特征<sup>[8, 15]</sup>。因此 2 303 nm 波段吸收特征产生因素众多,导致主要来源于脂肪侧链和含氧官能团的挥发分与 1 698 和 2 303 nm 波段吸收谷深度之和线性相关性较差。

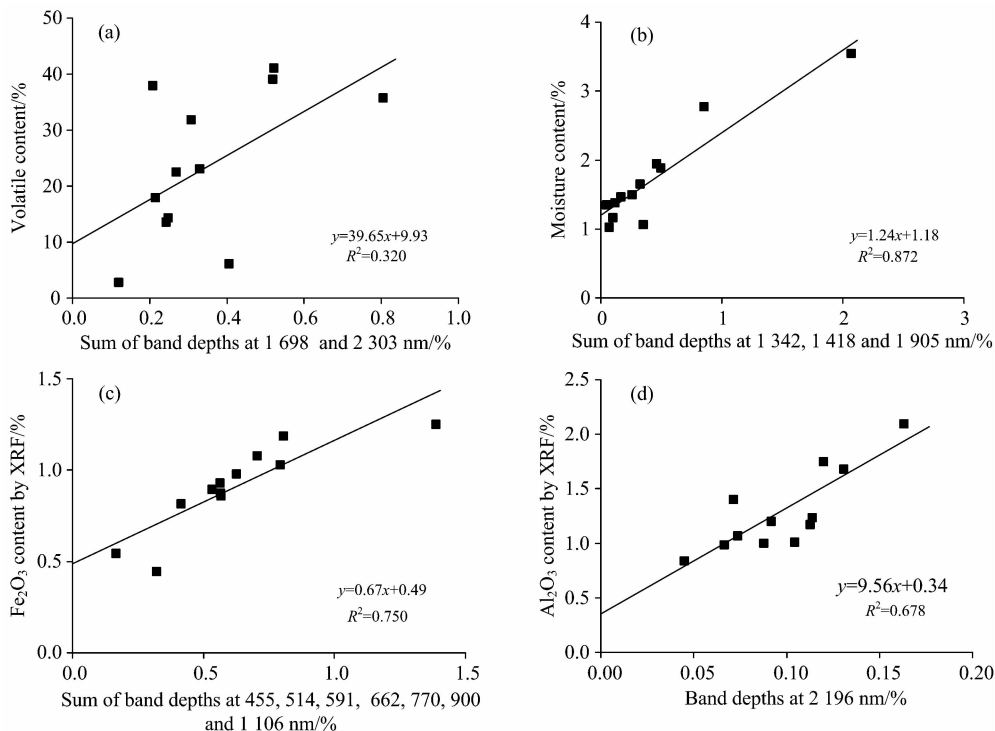


图 6 影响吸收谷基团对应物质成分含量与相应吸收谷深度之和的相关性分析

(a): 挥发分产率; (b): 水分含量; (c): XRF 分析  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  含量; (d): XRF 分析  $\text{Al}_2\text{O}_3$  含量

Fig. 6 Correlation analyses between component contents corresponding to the groups which induce the absorption valleys and the sums of the corresponding band depths

(a): Volatile content; (b): Moisture content; (c):  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  content by XRF; (d):  $\text{Al}_2\text{O}_3$  content by XRF

### 3 结 论

(1)在可见-近红外波段,无烟煤的反射光谱曲线整体上趋于水平方向,吸收谷特征不明显。随煤阶的降低,光谱反射率、光谱斜率整体上呈增加趋势,吸收谷增多且吸收强度增加。

(2)煤分子结构的芳构化趋势对煤阶变化时整体光谱反射率大小、反射曲线整体波形变化起到主要作用。以脂肪侧链为主的有机吸收基团在近红外波段的倍频和合频产生众多

吸收叠加,绝大多数吸收谷特征不明显,相对较为明显的吸收谷产生在 1 700 和 2 300 nm 附近。少量含 Fe 等过渡金属矿物、 $\text{H}_2\text{O}$ 、粘土矿物等无机物成分也是煤反射光谱吸收谷特征增多的因素。

(3)光谱斜率与挥发分产率、固定碳含量分别呈正、负相关性。 $\text{H}_2\text{O}$  谱带吸收深度之和与内在水含量线性相关性较好,Fe 和 Al 含量与相关吸收谷深度之和基本呈线性关系,1 700 和 2 300 nm 吸收谷深度之和与挥发分产率线性相关性较差。

## References

- [ 1 ] Ba Tuan Le, Xiao Dong, Desmond Okello, et al. *Spectroscopy Letters*, 2017, 50(8): 440.
- [ 2 ] Mao Yachun, Ma Baodong, Liu Shanjun, et al. *Canadian Journal of Remote Sensing*, 2014, 40(5): 327.
- [ 3 ] SONG Liang, LIU Shan-jun, MAO Ya-chun, et al(宋 亮, 刘善军, 毛亚纯, 等). *Journal of Northeastern University • Natural Science (东北大学学报 • 自然科学版)*, 2017, 38(10): 1473.
- [ 4 ] LEI Meng, LI Ming, WU Nan, et al(雷 萌, 李 明, 吴 楠, 等). *Journal of China University of Mining & Technology(中国矿业大学学报)*, 2013, 42(2): 291.
- [ 5 ] Xie Xing, Zhao Yan, Qiu Penghua, et al. *Fuel*, 2018, 216: 521.
- [ 6 ] Cloutis E A. *Fuel*, 2003, 82(18): 2239.
- [ 7 ] Andrés J M, Bona M T. *Analytica Chimica Acta*, 2005, 535(1): 123.
- [ 8 ] YAN Shou-xun, ZHANG Bing, ZHAO Yong-chao, et al(燕守勋, 张 兵, 赵永超, 等). *Remote Sensing Technology and Application(遥感技术与应用)*, 2003, 18(4): 191.
- [ 9 ] Li Wu, Zhu Yanming, Wang Geoff, et al. *Fuel*, 2016, 185: 298.
- [10] Kim D W, Lee J M, Kim J S. *Korean Journal of Chemical Engineering*, 2009, 26(2): 489.
- [11] Song Zeyang, Kuenzer Claudia. *International Journal of Coal Geology*, 2017, 171: 142.
- [12] Feng Li, Yuan Chuazhou, Mao Lianzhen, et al. *Fuel*, 2018, 219(1): 288.
- [13] WANG Jin-nian, ZHENG Lan-fen, TONG Qing-xi(王晋年, 郑兰芬, 童庆禧). *Journal of Remote Sensing(遥感学报)*, 1996, 11(1): 20 (doi: 10.1007/BF02951625).
- [14] HUANG Du-bin, CHUAN Xiu-yun, CAO Xi(黄杜斌, 传秀云, 曹 曦). *Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析)*, 2016, 36(11): 3698.
- [15] Sgavetti M, Pompilio L, Meli S. *Geosphere*, 2006, 2(3): 142.

## Study on the Visible and Near-Infrared Spectra of Typical Types of Lump Coal

YANG En, WANG Shi-bo, GE Shi-rong\*

School of Mechanical and Electrical Engineering, China University of Mining & Technology, Xuzhou 221116, China

**Abstract** Because the visible and near-infrared reflectance spectrum is easily to be acquired using cheap instrument and suitable for online analysis, the features and generation principle of spectral reflectance curve of coal in the visible and near-infrared range were studied and analyzed in this paper. 12 typical types in the three major coal types of anthracite, bituminous and lignite were collected from coal mines in Shanxi, Shandong, Ningxia and Jilin. With decreasing coal rank, these coals included No. 1 anthracite, No. 2 anthracite, meager coal, meager lean coal, lean coal, coking coal, fat coal, 1/3 coking coal, gas fat coal, gas coal, No. 1 lignite and No. 2 lignite. Spectral reflectance curves of these lump coals were acquired in the visible and near-infrared range by a field spectrometer in the laboratory. By analyzing features of these spectral curves, it was found that reflectance curves of anthracites tend to be horizontal in the whole wavelength range and the absorption valleys are not obvious. With decreasing coal rank, spectral reflectance, spectral slope in the near-infrared range, the numbers of obvious absorption valleys and the absorption intensities all increased. Bands of 13 obvious absorption valleys were selected. Carbon structures and mineral compositions of these coal samples were measured through X-ray diffraction (XRD) analyses. With increasing coal rank, the aromatization tendency of amorphous molecular structures of coal plays a major role in reducing the spectral reflectance and flattening the reflectance curve. With decreasing coal rank, overtones and combinations in the near-infrared range generated by the fundamental frequencies of absorption groups mainly including aliphatic side chains in the mid-infrared range generate a lot of absorption superposition. And most of the absorption valleys are not obvious due to the absorption superposition and the relatively more pronounced absorption valleys appear near 1 700 and 2 300 nm. At the same time, transition metals mainly Fe-contained minerals, H<sub>2</sub>O, clay minerals and other inorganic components are also the factors that increase the number of absorption valleys of reflectance curve of coal. Through X-ray fluorescence (XRF) and proximate analyses of these coal samples, the contents of major mineral elements such as Fe and Al and the contents of moisture, ash, volatile, and fixed carbon based on air-dried basis were acquired. It was shown that the spectral slope of reflectance curve of coal in the near-infrared range is positively and negatively cor-

related with volatile yield and fixed carbon content respectively. The sum of absorption depths of H<sub>2</sub>O bands is well linearly correlated with intrinsic moisture content. There is a basically linear relationship between Fe or Al content and the sum of absorption depths of the relevant bands. However, there is a poorly linear relationship between volatile yield and the sum of depths of 1 700 and 2 300 nm absorption valleys which are mainly caused by overtones and combinations of the organic fundamental absorption bands. The acquisition of reflectance spectrum features of typical lump coals in the visible and near-infrared range provides the basis for hyperspectral remote sensing of coal mine areas and establishment of spectral library of coals, and also the reference for the rapid, low cost and qualitative identification of coal categories by shapes of spectral reflectance curves directly. At the same time, it is of great significance to the development of spectral sensor for coal detection in coal mine.

**Keywords** Coal type; Visible and near-infrared spectrum; Reflectance; Spectrum feature; Composition analysis

(Received May 12, 2018; accepted Oct. 10, 2018)

\* Corresponding author