

红外煤质多参数实时分析仪设计

魏小梅, 杨剑, 冯刚, 贾涛, 孟锦, 苏小会, 张翔, 康莉, 曹红红
(陕西华星电子集团有限公司(国营795厂), 陕西 咸阳 712099)

摘要: 燃煤内不同成分具有不同的红外吸收光谱, 吸收程度的大小与该成分的含量具有正相关性。根据燃煤不同成分的红外光谱吸收特性, 设计了煤质参数实时分析仪。采用漫反射灰度板替代滤光片作为参比物, 实验中具有更好的稳定性。采用多元线性回归法对测量数据进行处理, 煤质参数测量结果与化验室化验结果接近, 设计可满足使用要求, 工作效率较传统化验室化验法有了大幅度的提高。

关键词: 红外分析仪; 吸收光谱; 漫反射灰度板; 多元线性回归

中图分类号: TN215 文献标识码: A 文章编号: 1001-8891(2016)06-0509-05

Design of Infrared Multi-parameters Analysis Meter for Coal

WEI Xiaomei, YANG Jian, FENG Gang, JIA Tao, MENG Jin, SU Xiaohui, ZHANG Xiang,
KANG LI, CAO Honghong

(Shaanxi Huaxing Electric Group Ltd. Company(State-run 795 Factory), Xianyang 712099, China)

Abstract: Different ingredients of coal have different infrared absorption spectrums, and there is a positive correlation between the value of absorption degree and the content of the ingredient. According to the infrared absorption characteristic of different ingredients, the real-time multi-parameters analysis meter of coal is designed. By using the diffuse reflection gray scale board instead of the reference filter, a higher stability is obtained in practice. Multiple linear regression is used to process the measure data. The measure result of the infrared analysis meter is consistent with the laboratory testing values, and the design can be actually used. Even more important, its work efficiency is much better than traditional laboratory test method.

Key words: infrared analysis meter, absorption spectrum, diffuse reflection gray scale board, multiple linear regression

0 引言

煤炭作为重要的能源及化工原料在工农业生产与国民经济各行业得到了非常广泛的应用。在火力发电领域, 煤炭的主导地位迄今仍难以撼动。为了有效降低火力发电成本, 提高煤炭利用率, 火电厂需要对多个煤质参数(水分、灰分、挥发分、热值和硫分)进行化验^[1-2], 以实现按照发电量科学供煤, 提升煤炭消耗的经济性。但是现有的主流煤质化验方法或者耗时长, 完成每个样品的各个参数化验需要数小时以上的时间; 或者需要放射性 γ 射线源, 设备笨重复杂、造价高, 对操作者及环境有危害。提出了利用构成煤炭的各种参数具有不同的红外吸收光谱特性的原理而研制的红外煤质多参数分析仪, 可实现一分钟内快

速精确检测, 为解决煤质多参数实时分析问题找到了一条有效的途径。本文结合红外探测器在近红外波段的光谱分析检测及计算机应用技术, 将红外探测器在煤炭领域中对煤质成份的分析检测做以应用推广。

1 煤质多参数分析原理

我们知道, 每一种化学物质都有自己独特的红外吸收光谱。当用一定波长范围内的红外光照射被测物质时, 某些波长的红外光就会被被测物质所吸收, 吸收的程度(吸光度)与相关物质参数的含量成正比例关系; 其它波长的红外光则被漫反射。根据不同的物质参数红外吸收光谱曲线上某些特定波长处的吸光度的变化就可以测出该物质的含量^[3-4]。

根据 Kubelka-Munk 理论, 物质的反射率 R 及吸收系数 K 之间有如下关系^[5]:

$$H = \lg \frac{1}{R} = \frac{K}{S} + B \quad (1)$$

式中: H 为吸光度; S 为散射系数; B 为常数。

在一定的光强度范围内, 吸收系数 K 与被测物质中某种成分的含量比 C 之间存在线性关系:

$$K = \varepsilon C \quad (2)$$

式中: ε 为比例系数。

根据反射率的定义:

$$R = I/I_0 \quad (3)$$

式中: I 为被测物质反射光强; I_0 为参比板 (漫反射灰度板) 的反射光强。

$$H = \lg \frac{1}{R} = \lg \frac{I_0}{I} = \frac{\varepsilon}{S} C + B \quad (4)$$

由式(4)可见, 吸光度 H 与对应物质成分的含量存在正比例关系。当测得某种物质成分的吸光度值, 经标定后就可以计算出该物质成分的含量。

为了检测水分、灰分、挥发分、热值和硫分等 5 个煤质参数, 综合煤质内部表征这 5 个参数的 H_2O 及 C-H、O-H、N-H、S-H、S-O 等基团在近红外波段产生倍频与合频的漫反射吸收带, 选取了 1.92、1.98、2.06、2.14 及 2.34 μm 五个近红外波段的特征波长作为测试波长, 并选用工作波段为 1~3 μm 的硫化铅 (PbS) 红外探测器进行红外特性探测。

由于被测物煤是由多种成分组成的, 其不同参数之间的吸收光谱存在重叠与干扰, 使得某参数的吸光度与含量之间的简单线性关系被破坏, 各参数之间表现为相关关系, 这种相关程度随各种参数的含量不同而变化。采用多元线性回归法可有效地解决上述问题。

设某参数的含量为 C , 5 个波长对应的吸光度为 $H_1 \sim H_5$, 则有:

$$C = A_0 + A_1 H_1 + A_2 H_2 + A_3 H_3 + A_4 H_4 + A_5 H_5 \quad (5)$$

式中: A_0 、 A_1 、 A_2 、 A_3 、 A_4 和 A_5 为回归系数, 只要确定了回归系数, 就可以根据式(5)用每个波长对应的吸光度 $H_1 \sim H_5$ 计算出该参数的含量。

确定回归系数的过程称为定标。我们用 C_1 、 C_2 、 C_3 、 C_4 和 C_5 分别代表水分 (%)、灰分 (%)、挥发分 (%)、热值 (KCal/Kg) 和硫分 (%) 含量, 则可以列出如下回归方程:

$$\begin{aligned} C_1 &= A_{10} + A_{11} H_1 + A_{12} H_2 + A_{13} H_3 + A_{14} H_4 + A_{15} H_5 + \mu_1 \\ C_2 &= A_{20} + A_{21} H_1 + A_{22} H_2 + A_{23} H_3 + A_{24} H_4 + A_{25} H_5 + \mu_2 \\ C_3 &= A_{30} + A_{31} H_1 + A_{32} H_2 + A_{33} H_3 + A_{34} H_4 + A_{35} H_5 + \mu_3 \\ C_4 &= A_{40} + A_{41} H_1 + A_{42} H_2 + A_{43} H_3 + A_{44} H_4 + A_{45} H_5 + \mu_4 \end{aligned}$$

$$C_5 = A_{50} + A_{51} H_1 + A_{52} H_2 + A_{53} H_3 + A_{54} H_4 + A_{55} H_5 + \mu_5 \quad (6)$$

式中: A_{ij} ($i=1 \sim 5, j=0 \sim 5$) 为回归系数, μ_i ($i=1 \sim 5$) 为残差。

如果样品参数的估计值已经得到, 则有:

$$\hat{C}_i = \hat{A}_{i0} + \hat{A}_{i1} H_1 + \hat{A}_{i2} H_2 + \hat{A}_{i3} H_3 + \hat{A}_{i4} H_4 + \hat{A}_{i5} H_5 \quad (7)$$

即:

$$[\hat{C}] = [H][\hat{A}] \quad (8)$$

式中: \hat{A} 为回归系数 A 的估计值, \hat{C} 为含量 C 的估计值。

为了求得回归系数, 我们取 n 个 (推荐 100 个以上, 且相同参数的煤样不得重复选取) 不同的煤样, 经粉碎、过筛等制样过程后用每个煤样的一半进行化验, 以确定每个样品的水分、灰分、挥发分、热值和硫分含量。根据最小二乘原理, 得到回归系数的估计值矩阵:

$$[\hat{A}] = ([H][H])^{-1} [H][C] \quad (9)$$

式中: $[H]$ 为 n 个样品吸光度实际测试值矩阵; $[H]'$ 为矩阵 $[H]$ 的转置矩阵; $[C]$ 为 n 个样品 5 个参数实际化验值矩阵。

至此, 只要我们将以上每个煤样的一半分别化验出煤样的水分、灰分、挥发分、热值和硫分含量, 再用煤质多参数分析仪测出各个波长下另一半煤样及参比板的反射光强并计算出对应的吸光度, 用式(9)计算出回归系数, 然后把回归系数输入煤质多参数分析仪, 之后就可以使用煤质多参数分析仪根据式(7)测量未知煤样的水分、灰分、挥发分、热值和硫分等 5 种参数的含量了。

2 煤质多参数分析仪设计

2.1 总体设计方案

煤质多参数分析仪的设计含硬件设计及软件设计 2 部分。硬件包括光学系统 (如图 1)、电路和控制系统 (如图 2) 以及机体结构等; 软件系统包括计算机数据处理及管理软件 (主程序, 如图 3) 及单片机操作执行软件 (如图 6) 2 部分。

2.2 光学系统设计

光学系统示意图如图 1, 投射到被测煤样或参比板表面上的红外光经煤样 (某些波段能量被吸收) 或参比板 (无吸收) 漫反射后由主反射镜反射并汇聚到次反射镜, 次反射镜再将红外光通过旋转滤光片滤波

后反射到 PbS 红外探测器,探测器接收红外信号并转化为电信号输出。

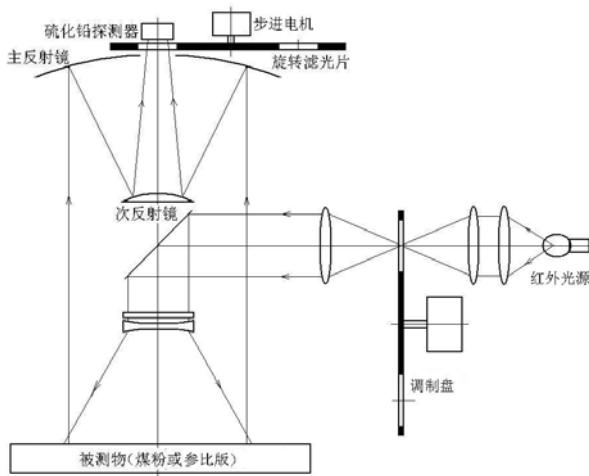


图 1 光学系统示意图
Fig.1 Diagram of optical system

2.3 电路及控制系统设计

电路及控制系统原理框图^[3]见图 2。PbS 探测器接收到的漫反射红外信号经低噪声前放放大、窄带滤波器滤波及后级放大器放大后通过有效值变换器转换为直流信号, 直流信号的大小与被测煤样的 5 种参数相关, 再经过 A/D 转换器将直流信号转换为数字信号送往单片机, 最后由计算机读取并计算、显示及储存测量结果^[6-7]。

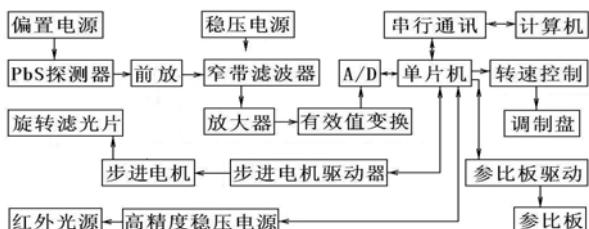


图 2 红外煤质多参数分析仪原理框图

Fig.2 Schematic diagram of infrared multi-parameters analysis meter of coal

旋转滤光片是一个包含 5 个滤光片的转盘。转盘从起始位置开始, 依次安装了中心波长分别为 1.92、1.98、2.06、2.14 及 2.34 μm 的 5 个窄带滤光片。设备工作时单片机^[8]根据计算机的指令依次测取上述 5 个波长处的参比板及煤样的信号供计算机处理^[9]并计算出煤样 5 种参数值。

参比板为在近红外波段内反射率平坦的漫反射灰度板, 用于 5 个波段煤样测试的参比信号源。其测量结果与煤样测量的比值用于计算每个波长的吸光度。

2.4 软件系统设计

2.4.1 计算机数据处理及管理软件

计算机主程序框图如图 3, 主要包含了系统定标、

参数设置、煤质分析、系统状态检测及使用帮助等 5 个模块。

设备在使用前必须进行系统定标, 否则将无法正常工作。定标的过程为: 搜集将要测量的不同成分各种含量的煤样, 其煤质参数必须覆盖所有可能使用的范围, 样本数需足够多(不同煤矿的 100 个不同煤质), 经过仔细制样后(样品粒度小于 1 mm, 去除铁等金属杂质, 搅拌均匀), 在化验室用传统的化验方法化验出每个样品的 5 个参数并做好记录, 然后在煤质分析仪上进行定标。

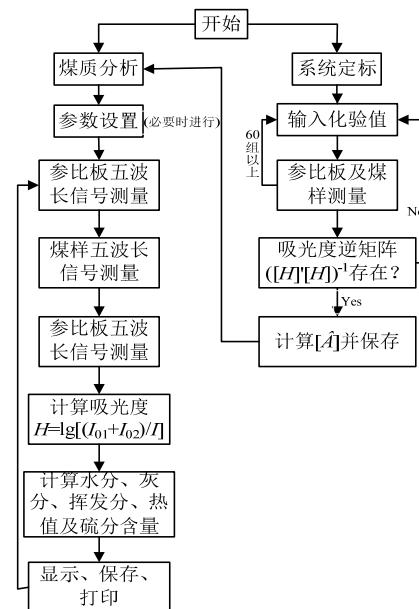


图 3 软件框图 Fig.3 Schematic diagram of PC software

进入系统定标界面(见图 4), 依次输入每个煤样的 5 个参数化验值, 用煤质分析仪测量出每个煤样的 5 个波长的吸光度(数据采集, 需分别测量煤样及参比板), 系统将自动保存每个煤样的化验值及测量数据, 完成所有的煤样数据保存后根据式(9)计算出回归系数(计算矩阵)并保存。在完成系统定标后, 可分别采集参比板及煤样的红外漫反射信号, 系统将自行计算出吸光度, 然后将吸光度及回归系数代入式(7)即得到 5 个参数的分析值, 分析结果以数据及图形的方式显示(图 5)。

经过对不同煤矿的 100 个不同煤样进行实际化验, 发现不同煤矿的煤样, 其模型差异并不大, 不需要针对不同煤矿的煤样重新设定模型参数。

2.4.2 单片机控制与执行软件

设备通电后, 红外光源及调制盘处于非工作状态, 单片机等待接收并执行计算机指令。当单片机收到“开机”指令后, 立即打开红外光源进行预热, 同时输出一个与调整频率相同的脉冲信号至锁相控制器让调制盘处于正常工作状态准备进行测量工作。单

片机按照计算机主程序指令要求,控制步进电机驱动器依次选择5个滤光片及通过控制参比板的位置来测量参比板或煤样的5个波长的红外信号,并将数据上传至计算机进行计算处理,如图6所示。



图4 系统定标界面
Fig.4 Diagram of calibration



图5 煤质分析主程序界面
Fig.5 Window of main software

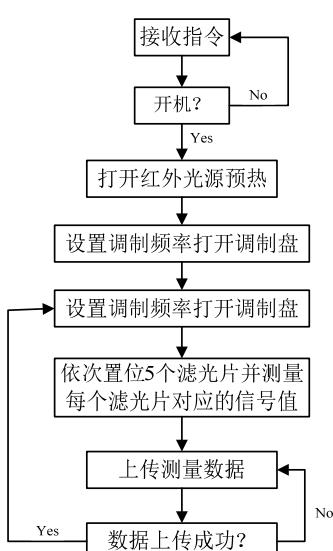


图6 单片机软件框图 Fig.6 Diagram of MCU software

3 煤质多参数分析仪实验情况分析

测量结果快速准确,工作稳定可靠是煤质分析仪存在的必要条件。经过一段时间的修改调试,煤质分析仪已可以长期处于稳定的工作状态,采用120个非标样本在实验室与分析仪上进行测试精度对比,其实际测试结果参见表1。

表1 某煤样实验室化验数据与煤质分析仪分析数据对比情况

Table 1 Test data from laboratory and infrared multi-parameters analysis meter of coal

项 目	实验室 化验结果	煤质分析仪 测试结果	平均测试 误差/%
水分 M_t /%	4.68	4.65	-0.64
灰分 A_g /%	27.34	27.07	-0.99
挥发分 V_{ad} /%	23.22	23.36	0.6
热值 Q_{ad} (mJ/kg)	22.07	22.19	0.54
硫分 S_{ad} /%	1.13	1.24	9.73

注:①以上数据均是对120个非标定样本的5次化验及测试结果平均值;②平均测试误差为分析仪测试结果相对于实验室化验结果的相对误差;③除硫分外,其它样品的各个参数测试误差绝大部分都在0.3%~2.5%之内。

经过对每个样本的快速检测,从测试结果可以看出,煤质分析仪分析结果无系统性误差,测量结果稳定,接近实验室化验水平,除硫分外测量误差在可接受范围内。

在实际测试过程中,低灰分和高灰分煤样对整体测试结果有较为明显的影响,为此尝试采用马氏距离判别法将煤样按灰分高低进行分组定标及测试,初步实验结果基本上令人满意。

从实际测量结果看,目前煤质分析仪还存在2个问题:一是硫分测试结果误差较大,可能还需要对滤光片的中心波长或者数量进行必要的调整,以期达到预期的设计目标;二是设备硬件及软件尚需进一步优化,使设备能适应各种煤质的测试要求。

4 结论

经过精心的设计及不断地修改完善,煤质参数实时分析仪在5个测试参数中的4个与实验室化验结果非常吻合,基本上达到了设计目标,可以满足实际使用要求。在实时性方面相比传统分析手段则有了颠覆性的突破,检测速度快,使用成本低,操作简单方便,是传统的化验方法无法比拟的,为传统化验方法的理想替代手段。

使用煤质分析仪进行硫分分析尚存在较大误差,需要对硬件及软件进行进一步修改完善,以便下一步

可以有效地解决硫分分析结果误差大的问题。

参考文献:

- [1] 施玉英. 我国煤炭检测方法标准化现状及其发展[J]. 煤质技术, 2006(2): 4-5.
SHI Yu-ying. Present status and development of standardization work of coal detection methods[J]. *Coal Quality Technology*, 2006(2): 4-5.
- [2] 郑忠. 运用近红外光谱分析煤质硫含量[J]. 洁净煤技术, 2014(11): 74-79.
ZHENG Zhong. Analysis of sulfur in coal with near infrared spectroscopy[J]. *Clean Coal Technology*, 2014(11): 74-79.
- [3] 李凤瑞, 肖宝兰, 唐玉国, 等. 应用近红外光谱方法在线测定煤中水分[J]. 电站系统工程, 2003(6): 19-20.
LI Feng-Rui, XIAO Bao-lan, TANG YU-guo, et al. Application of NIR spectrum method at analysis of coal water[J]. *Power System Engineering*, 2003(6): 9-20.
- [4] 袁继俊, 董培芝. 中国红外产品与应用[M]. 北京: 长城出版社, 2004: 22-33.
YUAN Jijun, DNG Peizhi. *Chinese infrared products and application*[M]. Beijing: The Great Wall Press, 2004: 22-33.
- [5] 杜洁海, 辛德胜, 闫维和, 等. 近红外漫反射式谷物成分分析系统的研究[J]. 仪器仪表学报, 1997, 18(1): 60-63.
DU De-hai, XIN De-sheng, YAN Wei-he, et al. Research of NIR diffuse reflection analysis system of grain ingredient[J]. *Chinese Journal of Scientific Instrument*, 1997, 18(1): 60-63.
- [6] 陈仁厚, 冯刚, 马晓东, 等. 硫化铅红外探测器自动测试系统设计[J]. 激光与红外, 2010, 40(9): 1001-1005.
CHEN Ren-hou, FENG Gang, MA Xiao-dong, et al. Design of the optoelectric performance automatic test system for PbS infrared detector[J]. *Laser & Infrared*, 2010, 40(9): 1001-1005.
- [7] 冯刚, 贾涛, 魏小梅, 等. 光导型红外传感器低噪声前置放大器的设计[J]. 物联网技术, 2014(9): 22-24.
FENG Gang, JIA Tao, WEI Xiao-mei, et al. Design of the low noise pre-amplifier for photoconductive infrared sensor[J]. *Internet of Things Technologies*, 2014(9): 22-24.
- [8] 孙涵芳, 徐爱卿. MCS-51/96 系列单片机原理及应用[M]. 北京: 北京航空航天大学出版社, 1988.
SUN Hanfang, XU Aiqing. *MCS-51/96 series single chip microcomputer principle and application*[M]. Beijing: Beihang university press, 1988.
- [9] 范逸之, 陈立元, 孙德萱, 等. 利用 Visual Basic 实现串并行通信技术[M]. 北京: 清华大学出版社, 2001.
FAN Yi-zhi, CHENG Li-yuan, SUN De-xuan, et al. *Use Visual Basic to realize serial parallel communication technologies*[M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2001.