

文章编号 1004-924X(2026)03-0365-11

基于近红外-X射线融合光谱与非线性残差校正的大粒度煤热值 PLS-AE-RR 预测模型

乔一帆^{1,2}, 刘若楠^{1,2}, 李 斌⁴, 高 睿^{1,2}, 李佳轩^{3*}, 马维光^{1,2}, 张 雷^{1,2*}

(1. 山西大学 光量子技术与器件全国重点实验室 激光光谱所, 山西 太原 030006;

2. 山西大学 极端光学协同创新中心, 山西 太原 030006;

3. 山西大学 计算机与信息技术学院, 山西 太原 030006;

4. 新疆维吾尔自治区地质局 乌鲁木齐地质大队, 新疆维吾尔自治区 乌鲁木齐 830000)

摘要:针对工业现场大粒径煤样难以研磨所导致的基体效应增强与光谱非线性响应加剧的问题,提出一种基于近红外光谱(Near-Infrared Spectroscopy, NIRS)与X射线荧光光谱(X-ray Fluorescence, XRF)融合的PLS-AE-RR混合预测模型,旨在提升对煤炭热值的在线分析精度。该方法构建了“线性基线+非线性特征提取+残差校正”三级混合架构:先采用偏最小二乘回归(Partial Least Squares, PLS)建立光谱与热值间的全局线性关系,再利用自编码器(Autoencoder, AE)从融合光谱中提取PLS难以捕获的低维非线性表征,最后通过岭回归(Ridge Regression, RR)对非线性偏差进行残差校正。实验结果表明,该方法在大粒度煤样热值预测上取得突破进展,褐煤和烟煤的测试集决定系数 R^2 分别达到0.974和0.938,平均绝对误差分别为0.233 MJ/kg和0.216 MJ/kg,性能显著优于单一PLS及其他非线性校正模型,验证了岭回归在残差拟合中的泛化优势。本文为燃煤电厂提供了免研磨、高精度的原煤热值在线分析手段,为燃料精细化管理与优化运行提供了关键技术支撑。

关键词:光谱分析;近红外光谱;X射线荧光光谱;热值预测;大粒度煤样;非线性校正;自编码器

中图分类号:O433.4;O657.34 文献标识码:A

doi:10.37188/OPE.20263403.0365 CSTR:32169.14.OPE.20263403.0365

PLS-AE-RR prediction model for calorific value of large-particle-size coal based on NIRS-XRF spectral fusion and nonlinear residual correction

QIAO Yifan^{1,2}, LIU Ruonan^{1,2}, LI Bin⁴, GAO Rui^{1,2}, LI Jiaxuan^{3*}, MA Weiguang^{1,2}, ZHANG Lei^{1,2*}

(1. Institute of Laser Spectroscopy, State Key Laboratory of Quantum Optics and Quantum Optics Devices, Shanxi University, Taiyuan 030006, China;

2. Collaborative Innovation Center of Extreme Optics, Shanxi University, Taiyuan 030006, China;

3. School of Computer and Information Technology, Shanxi University, Taiyuan 030006, China;

4. Urumqi Geological Team, Bureau of Geology and Mineral Resources of Xinjiang

收稿日期:2025-11-11;修订日期:2025-12-22.

基金项目:国家自然科学基金资助项目(No. 12374377, No. 627010407, No. 12504483);长江学者和创新团队发展计划(No. IRT_17R70);高等学校学科创新引智计划(No. D18001);山西省研究生教育创新计划支持(No. 2025SJ063)

Uygur Autonomous Region, Urumqi 830000, China)

* Corresponding author, E-mail: lijx157@foxmail.com; k1226@sxu.edu.cn

Abstract: To address the enhanced matrix effects and intensified nonlinear spectral responses caused by the difficulty of grinding large-particle coal in industrial settings, this study proposes a hybrid PLS-AE-RR predictive model based on the fusion of near-infrared spectroscopy (NIRS) and X-ray fluorescence (XRF) spectra, aimed at improving the accuracy of on-line calorific-value analysis. The method implements a three-stage hybrid framework --linear baseline + nonlinear feature extraction + residual correction-- where partial least squares regression (PLS) first models the global linear relationship between the fused spectra and calorific value; an autoencoder (AE) then extracts low-dimensional nonlinear representations that PLS cannot capture; and finally ridge regression (RR) fits and corrects the nonlinear residuals. Experimental validation using 153 blended coal samples from power plants demonstrates breakthrough performance in calorific value prediction for large-particle-size coal. On the test set, determination coefficients (R^2) for lignite and bituminous coal reached 0.974 and 0.938, respectively, with mean absolute errors of 0.233 MJ/kg and 0.216 MJ/kg. The proposed method significantly outperforms standalone PLS and alternative nonlinear correction models, confirming the generalization advantage of ridge regression in residual fitting. Consequently, this achievement provides a grinding-free, high-precision online analysis solution for raw coal calorific value in coal-fired power plants, offering critical technical support for refined fuel management and operational optimization.

Key words: spectral analysis; NIRS spectra; XRF spectra; calorific value prediction; large-particle coal samples; nonlinear correction; autoencoder

1 引言

现代化燃煤电厂不仅面临降低燃料成本的压力,还需满足日益严格的环保排放标准^[1]。因此,推进燃料管理的精细化与智能化转型,已成为电厂可持续发展的必然要求。传统的煤质分析技术主要依赖实验室离线化验,该方法需对煤样进行破碎、制粉等复杂前处理,操作流程繁琐,耗时较长,且存在明显的滞后性,难以及时、准确地反映入厂煤或入炉煤的实际特性^[2-3]。

近年来,基于光谱技术的快速煤质分析方法得到了广泛发展,主要包括激光诱导击穿光谱(Laser Induced Breakdown Spectroscopy, LIBS)、近红外光谱(Near Infrared Spectroscopy, NIRS)及X射线荧光光谱(X-ray Fluorescence, XRF)等单一或联用技术。Xiong等^[4]基于LIBS技术,结合主成分分析(Principal Component Analysis, PCA)降维与粒子群优化支持向量回归(Particle Swarm Optimization-Support Vector Regression, PSO-SVR)算法,在减少模型计算量的

同时提高了模型预测的性能,最终对煤发热量预测的均方根误差为0.289 MJ/kg,平均绝对误差为0.231 MJ/kg,并且对碳质量分数、灰分和挥发分预测的效果也都比较理想。Gao等^[5]提出基于NIRS与XRF的融合检测技术,通过NIRS测量与热值正相关的C-H, N-H等有机组分, XRF检测与热值负相关的Na, Al, Si等无机元素,结合偏最小二乘(Partial Least Squares, PLS)整体-分段预测模型,实现了煤炭热值的高精度测量,最终预测热值的均方根误差(Root Mean Square Error of Prediction, RMSEP)为0.71 MJ/kg、平均相对误差(Absolute Relative Error, ARE)为1.18%、标准偏差(Standard Deviation, SD)为0.07 MJ/kg,各项指标均满足国家标准要求。Li等^[6]采用NIRS-XRF融合光谱技术,先用PCA与t分布随机邻域嵌入(t-SNE)相结合进行可视化与分类,再利用支持向量机(Support Vector Machine, SVM)实现自动识别,最终为不同煤种建立偏最小二乘回归(Partial Least Squares Regression, PLSR)子模型,对灰分、挥发分和硫分的预

测 R^2 分别达到0.998 7、0.995 5和0.999 7,预测均方根误差较未分类模型降低达40%以上,提升了复杂煤种场景下煤质的分析准确性。然而,这些方法通常要求将煤样研磨至约0.2 mm甚至压片成型,这在工业现场应用中需要引入额外的烘干与研磨设备,不仅挤占空间、延长检测周期,还易因研磨环节堵塞引发故障,增加了系统复杂性、降低了运行可靠性及维护成本。因此,探索直接针对大粒度原煤的光谱检测技术一直是该领域的研究热点与难点。

相较于煤粉,大粒度煤样在光谱测量中会引入更多不稳定因素^[7]。粒径增大通常会导致光谱测量精度恶化^[8]。在NIRS测量中,颗粒度增大会增强光散射效应,导致基线漂移和非线性响应^[9-10]。Begum等^[7]研究调查了颗粒大小对4种煤(褐煤、次烟煤、烟煤、半无烟煤)在近红外(350~2 500 nm)内光谱特征的影响,研究表明,随着煤样粒度从1 000 μm 减小至74 μm ,煤样的平均反射率显著增加约61%,且光谱曲线形态趋于凹形;粒度进一步细化至44 μm 以下时,反射率变化不再显著,可见粒度对近红外光谱的影响呈非线性。在LIBS技术中,大颗粒则会影响等离子体的稳定性与信号重复性^[11]。而在XRF测量中,煤样表面的粗糙纹理与空隙会使测量距离发生波动,引发荧光强度变化与测量误差。Zhang等^[12]通过理论推导与实验验证,明确了XRF强度与测量距离之间存在显著的非线性关系,煤样粒度越大,其表面起伏越显著,由此引发的光谱非线性效应越强,使得传统线性模型难以实现目标变量的准确预测。在当前大粒度煤样校正研究中,已有研究人员采用机器视觉方法进行探索。Yin等^[13]结合分割模型(Segment Anything Model, SAM)与视觉Transformer(DeiT),分析了1 mm粒径煤样与灰分测量误差的关联,使灰分预测的标准偏差与均方根误差均降低22%,图像处理与深度学习技术的融合有效削弱了亚毫米级粒度效应。该方法虽准确性高,但存在建模成本高、耗时长的问题,且其对更大粒度(如6 mm)的适用性尚未可知。

针对以上问题,本研究拟开展大粒度煤样光谱非线性校正方法研究,提出一种基于近红外与X射线荧光光谱融合的PLS-AE-RR联合建模框

架。该方法以PLS建立线性基线,利用自编码器AE自动提取融合光谱中的深层非线性特征,并进一步采用岭回归(Ridge Regression, RR)对线性模型的残差进行精准校正。通过设计对比实验,验证所提方法在0~6 mm混合粒度煤样上对热值指标的预测性能,旨在为燃煤电厂燃料管理与运行优化提供一种高精度、强稳定性的在线分析手段。

2 实验

2.1 实验装置

本研究采用的NIRS-XRF联用在线煤质分析装置如图1所示,主要由近红外光谱模块、X射线荧光光谱模块和样品传送模块3部分构成。

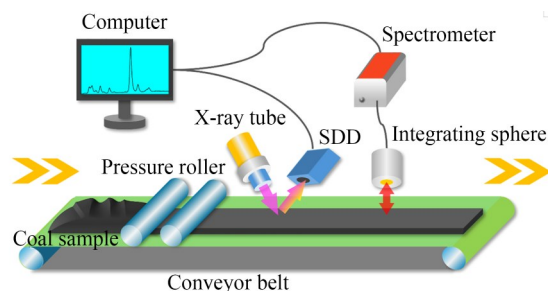


图1 在线煤质分析系统

Fig. 1 On-line coal quality analysis system

NIRS模块配备近红外光谱仪(AvaSpec-NIR256)和积分球形光源(AvaSphere-50-LS),光源波长为360~2 500 nm,光谱仪响应为1 000~2 500 nm,分辨率为4.4~85.0 nm。

XRF模块包括高压电源(SPELLMAN, MNX50P50)、铑靶X射线管(VARIAN, VF50J)、硅漂移探测器(KETEK, SDD)及数字脉冲处理器。X射线管工作条件为30 kV/mA,铍窗至样品表面距离固定为27 mm,探测器能量分辨率为133 eV。

样品传送模块采用4 m皮带机与双压辊整平装置,将煤流压实至30 mm恒定厚度,皮带运行速度为30 mm/s。测量过程中,NIRS积分时间为1 s,XRF积分时间为3 s,单样品全程测量约4 min。

2.2 样品和数据收集

2.2.1 样品收集

本研究采用的煤样来源于两家燃煤电厂,覆

盖褐煤与烟煤两类当前电厂燃料结构中占比最高,且具有代表性的燃煤煤种,共计 153 个样品(褐煤 77 个,烟煤 76 个)。单个样品质量约为 2 kg,粒度均不大于 6 mm。受电厂采制样流程及设备差异的影响,不同来源煤样的粒度分布存在一定区别。为系统分析该差异,从两家电厂分别选取代表性煤样进行筛分实验,结果如图 2 所示。可以看出,两种煤样的粒度分布均呈现不均匀特征,且均以粒径 1~3 mm 的颗粒为主。样品的标准热值由电厂化验分析室按国家标准 GB/T 213-2008(氧弹量热法)测定给出。

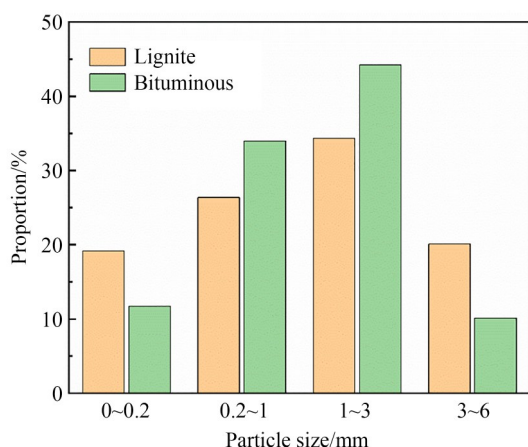


图 2 褐煤及烟煤粒度分布

Fig. 2 Particle size distribution of lignite and bituminous coal

2.2.2 实验方案

实验开始前,预先测量并保存近红外光谱的参考瓦光谱与暗背景光谱,为后续计算样品吸光度提供基准。在正式采集煤样光谱时,将待测煤样倒入皮带输送装置的进料口,当煤流平稳经过各检测模块下方时,同步触发并采集 NIRS 与 XRF 光谱。最终,对平整煤流区域采集到的所有光谱分别进行平均处理,得到每个样品具有代表性的一条 NIRS 光谱和一条 XRF 光谱,用于后续建模分析。

为评估所提方法模型对煤样热值的预测准确性,按煤种对全部样本进行分层抽样,以 8:2 的比例划分训练集与测试集。最终,褐煤与烟煤的训练集样本数分别为 62 个和 61 个,测试集样本数均为 15 个。此外,还与其他几种常用回归方法的结果进行了对比。

3 方法

图 3 展示了 PLS-AE-RR 模型的数据处理与建模流程。为兼顾统计可解释性与非线性拟合能力,采用“线性基线+非线性特征提取+残差校正”的三级混合架构:首先,对采集的近红外光谱与 X 射线荧光光谱进行针对性预处理并在特征层面融合;其次,并行将融合特征输入偏最小二乘回归与自编码器,其中,PLS 用于拟合谱-热值的主导线性关系并产出基线预测,AE 在无监督条件下学习低维的非线性潜在表征;然后,计算 PLS 的预测残差,并将 AE 的隐藏层变量作为非线性特征输入岭回归在残差域进行正则化拟合以校正非线性偏差;最后,预测由 PLS 的线性输出与 RR 给出的残差校正项相加得到。下文将分别对光谱预处理、PLS 建模、AE 结构与训练以及 RR 超参数选择等实现细节给出完整说明。

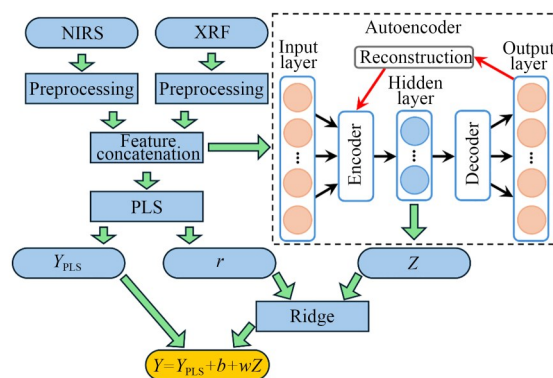


图 3 定量分析过程

Fig. 3 Quantitative analysis process

3.1 光谱预处理

为提升光谱数据的可靠性与准确性,分别对 NIRS 和 XRF 数据进行了预处理。

NIRS 数据的处理流程如下:

(1) 截除光谱两端的边缘波段,以消除边缘效应;

(2) 数据线性化,即利用实验前测量的参考瓦光谱与暗背景光谱,按式(1)将原始反射率数据(R)转换为吸光度(A):

$$A = -\lg \left(\frac{R_{\text{sample}} - R_{\text{dark}}}{R_{\text{reference}} - R_{\text{dark}}} \right). \quad (1)$$

(3) 采用 Savitzky-Golay (SG) 平滑算法(五点

三次多项式)进行卷积拟合,以抑制高频噪声;

(4)应用标准正态变量变换,以消除由散射引起的光谱基线漂移;

(5)计算一阶导数,进一步突出光谱特征并消除基线影响,并将其作为NIRS的输入特征。

XRF数据的处理流程如下:

(1)剔除低能区域的噪声信号;

(2)采用与NIRS相同的SG平滑算法进行滤波,提高信噪比;

(3)对每个样本的能谱进行行内面积归一化处理。

完成上述预处理后,将NIRS与XRF数据在特征维度上进行拼接,融合为一个联合光谱矩阵。鉴于两类光谱在强度上存在显著量级差异,最后对融合后的数据实施Min-Max缩放,将其数值统一至 $[0,1]$ 区间,便于后续建模分析。

3.2 定量分析

3.2.1 PLS线性回归

采用偏最小二乘为主要的线性回归模型^[14],作为工业分析中常采用的定量分析算法,具有高效性、准确性和稳定性^[15-16]。主成分 k 的确定采用对训练集10折交叉验证,按MSECV最小原则选取最优主成分数,确保模型的简约性与稳定性。在用PLS建立线性模型后,得到训练集预测值 y_j ,与训练集中对应样本的标准值 Y_j 做差可得残差 r_j ,作为后续残差回归的参考值输入,即:

$$r_j = Y_j - y_j. \quad (2)$$

3.2.2 AE自编码器特征提取

为获得PLS模型未能捕获的非线性特征,采用自编码器^[17-18](Autoencoder, AE)在无监督条件下从拼接后的光谱特征中学习非线性低维表示,并以此作为后续残差校正的输入。AE在不依赖标注的前提下,通过非线性编码-解码过程逼近数据流形,能在保持主要信息的同时压缩冗余与噪声^[19],为后续模型提供可回归的表示。

自编码器由两层编码器 $f(R^p) = R^H$ 和两层解码器 $g(R^H) = R^p$ 组成^[20],编码端采用逐元非线性激活函数^[21]形成低维瓶颈表示 H ,解码端重构输入^[22]。每一层自编码器以重构误差、权重L2正则与稀疏约束为联合目标,解码器把重构误差反向传回编码器以更新参数,迫使编码器学到对输入变量可还原的非线性特征来做后续的残

差校正。AE参数如下:

$$\min_{w_1, b_1, w_2, b_2} \frac{1}{N} \|x_i - g(f(x_i))\|_2^2 +$$

$$\frac{\lambda}{2} (\|W_1\|_F^2 + \|W_2\|_F^2) + \beta \sum_{j=1}^h \text{KL}(\rho | \hat{\rho}_j), \quad (3)$$

$$f(x) = \sigma(W_1 x + b_1), \quad (4)$$

$$g(h) = W_2 h + b_2, \quad (5)$$

$$\hat{\rho}_j = \frac{1}{N} \sum_i [f(x_i)]_j, \quad (6)$$

其中:式(3)的第一项为重构误差项,第二项为L2权重正则项,第三项为稀疏约束项; $f(x)$ 为编码器, σ 为逐元Sigmoid, W_1, b_1 为编码端权重和偏置; $g(h)$ 为解码器, W_2, b_2 为解码端权重和偏置; $\hat{\rho}_j$ 为瓶颈层第 j 个神经元的平均激活输出。

对每个煤种使用固定的训练超参数(λ 为L2正则强度, β 为稀疏正则强度, ρ 为期望稀疏度)潜在变量 H 维度远小于光谱特征 p 输入维度为4 167。该机制使隐藏空间保留与重构相关的关键信息结构,为后续回归任务提供稳定且有泛化性的表征^[23]。

3.2.3 RR非线性残差校正

在完成AE对拼接光谱的无监督学习后,在残差域建模以校正非线性误差。采用岭回归^[24](Ridge Regression, RR)拟合PLS的样本残差,通过回归系数 w 和截距 b 拟合残差并利用L2正则^[25]来抑制多重共线性并提升泛化能力。岭回归通过引入正则化系数 λ ,在最小化残差平方和的同时对回归系数的大小进行惩罚,其目标函数如下:

$$\min_{w, b} (w, b) \frac{1}{n} \|r - b - Zw\|_2^2 + \lambda \|w\|_2^2, \quad (7)$$

其中: w 为岭回归模型的系数向量, b 为标量截距项, λ 为正则化超参数,用于控制惩罚项的强度。为确保超参数选择的客观性和稳定性,采用5折交叉验证策略对 λ 进行优化。在区间 $(10^{-6}, 10^{-1})$ 内,以对数尺度均匀选取8个候选值,并以交叉验证集中MAECV最小化为准则,确定最优的正则化系数 λ 。最终,预测值由PLS的输出与残差校正项求和得到:

$$y_{\text{test}} = y_{\text{PLS}}(X_{\text{test}}) + (wZ_{\text{test}} + b). \quad (8)$$

3.3 评价指标

为客观评估所建模型的预测性能,本研究采用 R^2 、MAE和RMSE作为核心评价指标。其中,

R^2 用于衡量模型对目标变量变异性的解释程度,其值越接近 1,表明模型的拟合优度越高;MAE 直观反映预测值的平均偏差大小,而 RMSE 则用于更敏感地反映预测值的异常波动。

4 结果与讨论

4.1 光谱预处理效果分析与评估

在近红外光谱预处理中,一阶导数处理被证明是关键步骤。如图 4(a)和图 4(b)所示,经标准正态变量变换(Standard Normal Variate, SNV)校正后的原始吸光度光谱显示,褐煤与烟煤在 1 400 nm 与 1 900 nm 附近均存在与 O-H 键伸缩振动相关的强吸收谷,褐煤在此处的吸收谷深度及样本间离散度均显著大于烟煤,这与其本身含水量更高且变异性更大的特性相符。需要指出的是,1 500~1 600 nm 区间对应的 N-H 键及 1 100~1 250 nm 区间对应的 C-H 键(第二阶或弱组合带)吸收相对较弱,且两煤种间的差异并不显著,相比之下,1 650~1 750 nm (C-H 键)及 2 200~2 350 nm (C-H 键)波段,有可见波峰,对

应了两煤种的有机可燃物成分。对比图 4(a)和图 4(b)的一阶导数光谱可知,导数处理消除了基线漂移,并锐化了特征峰,使得上述与煤质相关的诊断性波段在两煤种间的差异更为凸显^[26-27]。

为定量评估该预处理步骤对模型性能的贡献,在完全相同的建模框架下,对比了以原始吸光度和一阶导数数据作为输入的预测结果。由表 1 可知,采用一阶导数后,PLS-AE-RR 模型(隐藏层维度 $H=32$)对于褐煤和烟煤的预测精度均获得显著提升: R^2 分别从 0.952 和 0.856 提升至 0.974 和 0.938,MAE 与 RMSE 也相应大幅降低。这一定量证据表明,一阶导数处理通过抑制散射干扰、增强特征对比度,提升了 NIRS 数据与热值之间的可回归性。

在 XRF 光谱方面,图 5 展示了经 SG 平滑及面积归一化后的能谱。可以看到,烟煤在 Fe,Ti,Mn 等过渡金属的特征谱线处表现出更高的相对强度,而褐煤则是 K,Ca 等碱金属及碱土金属谱线相对更强。这种元素分布模式的差异与两类煤种在成煤环境与灰分组成上的固有特征高度

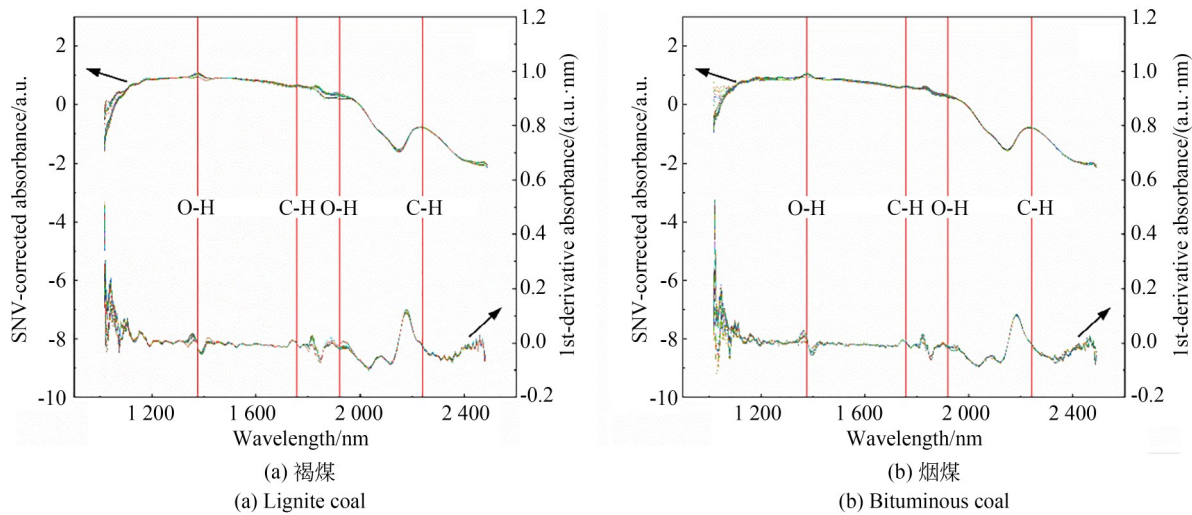


图 4 近红外吸收光谱一阶导数处理前后对比

Fig. 4 Comparison of NIR absorbance before and after first-derivative processing

表 1 应用一阶导数前后近红外吸光度结果对比

Tab. 1 Comparison of results before and after applying first derivative to NIR absorbance

近红外预处理	R^2		MAE/(MJ·kg ⁻¹)		RMSE/(MJ·kg ⁻¹)	
	褐煤	烟煤	褐煤	烟煤	褐煤	烟煤
吸光度	0.952	0.856	0.310	0.347	0.357	0.390
一阶导	0.974	0.938	0.233	0.216	0.263	0.256

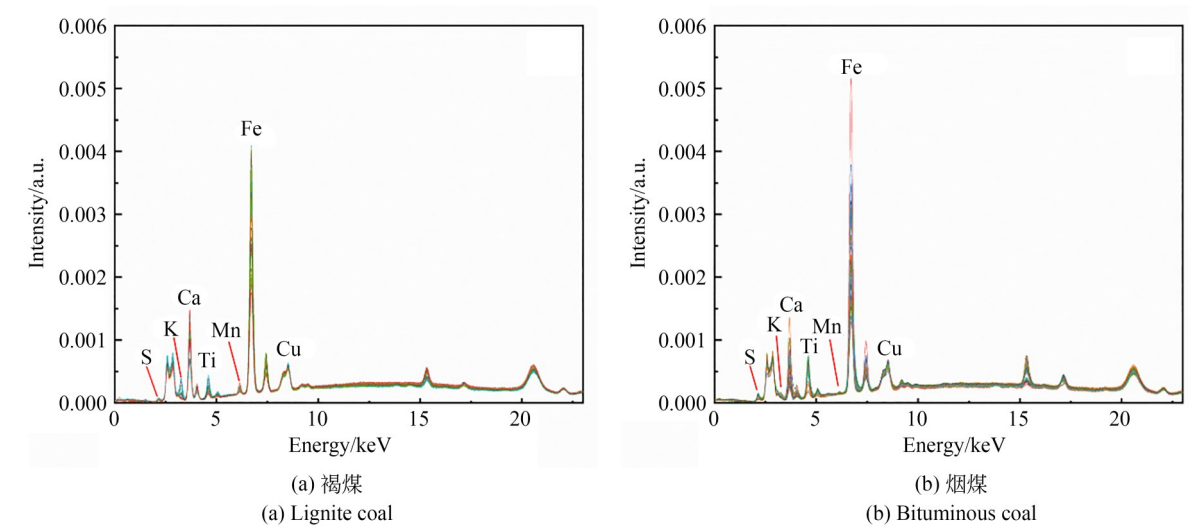


图5 归一化XRF能谱
Fig. 5 Normalized XRF energy spectra

吻合^[28],证明了XRF数据能有效反映煤的无机矿物组成信息,为热值预测提供了互补的特征维度。

4.2 模型结构优化与确定

自编码器的隐藏层维度是控制其非线性特征提取能力与泛化性能的关键超参数。为确定最优结构,在保持PLS-AE-RR框架其他参数不变的条件下,系统对比了隐藏层维度为16,32和64时的模型性能,结果如表2所示。可以看出,对于两种煤种,当隐藏层维度 $H=32$ 时,模型在

测试集上均取得了最优的综合预测性能,褐煤、烟煤的 R^2 分别达到0.974和0.938,而MAE则分别低至0.233 MJ/kg和0.216 MJ/kg。当 $H=16$ 时,模型可能因表征能力不足,导致对光谱中复杂非线性关系的学习不充分,性能次之。而当 $H=64$ 时,模型性能的轻微下降则可能源于潜在过拟合风险,即过高的自由度使得自编码器学习到了部分与目标变量无关的噪声特征。因此,在后续所有对比实验中,均采用 $H=32$ 作为PLS-AE-RR模型的固定参数。

表2 两个煤种不同隐藏层维度的预测效果比较

Tab. 2 Comparison of prediction performance with different hidden layer dimensions for two coal types						
隐藏层维度	R^2		MAE/(MJ·kg ⁻¹)		RMSE/(MJ·kg ⁻¹)	
	褐煤	烟煤	褐煤	烟煤	褐煤	烟煤
16	0.949	0.890	0.331	0.295	0.367	0.341
32	0.974	0.938	0.233	0.216	0.263	0.255
64	0.953	0.913	0.287	0.259	0.355	0.304

4.3 模型预测性能综合对比

为全面评估所提出的PLS-AE-RR框架的优越性,将其与多种基线及对照模型进行了系统对比,包括传统的偏最小二乘回归、以及将残差校正器替换为随机森林回归和支持向量回归的混合模型。

4.3.1 传统线性模型对比

图6直观地展示了PLS-AE-RR模型与单一

PLS模型在训练集和测试集上的预测结果。可以清晰地看到,对于褐煤和烟煤,无论是在训练集还是测试集上,PLS-AE-RR的预测点更紧密地分布在理想拟合线($y=x$)附近。定量结果(表3)进一步证实了这一优势:相较于PLS,PLS-AE-RR将褐煤的 R^2 从0.921提升至0.974,MAE和RMSE分别降低了43.5%和42.7%;对于烟煤, R^2 从0.881提升至0.938,MAE和RMSE分

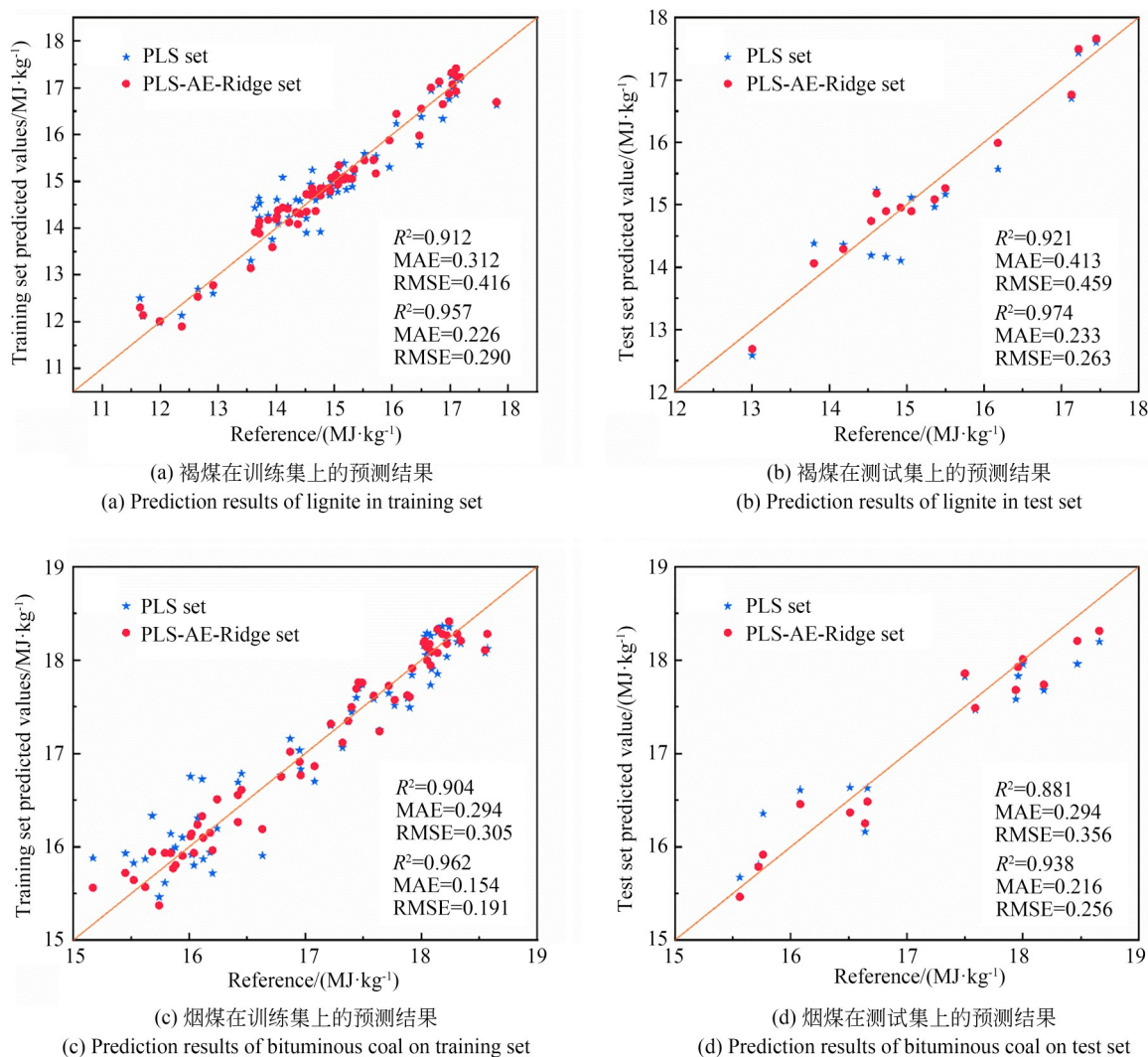


图 6 热值预测结果对比

Fig. 6 Comparison of calorific value prediction results

别降低了 26.5% 和 28.4%。褐煤的 ARE 从 PLS 的 2.827% 降至 1.560%，相对下降约 44.8%；烟煤的 ARE 则由 1.712% 降至 1.250%，相对下降约 27.0%。这一显著的性能提升充分证明，单一的线性模型难以充分捕捉大粒度煤样带来的复

杂光谱响应，而引入非线性校正机制至关重要。

4.3.2 不同非线性校正模型对比

在确认了非线性校正的必要性后，进一步对比了不同校正器的效果。如表 3 所示，采用岭回归作为校正器的 PLS-AE-RR 模型，在两个煤

表 3 两个煤种热值定量预测方法的比较

Tab. 3 Comparison of different methodologies for quantitatively predicting calorific value of two coal ranks

模型	R^2		MAE/(MJ·kg ⁻¹)		RMSE/(MJ·kg ⁻¹)		ARE/%	
	褐煤	烟煤	褐煤	烟煤	褐煤	烟煤	褐煤	烟煤
PLS-AE-RR	0.974	0.938	0.233	0.216	0.263	0.255	1.560	1.250
PLS	0.921	0.881	0.413	0.294	0.459	0.356	2.827	1.712
PLS-AE-RF	0.942	0.894	0.338	0.268	0.392	0.336	2.354	1.559
PLS-AE-SVR	0.940	0.909	0.350	0.244	0.400	0.310	2.420	1.419

种的3个评价指标上均一致性地优于采用随机森林的PLS-AE-RF和采用支持向量回归的PLS-AE-SVR。由此表明,在自编码器提供的低维非线性特征基础上,简单的岭回归因其L2正则化项能有效约束解空间,防止在有限的残差样本上过拟合,从而表现出更优的稳健性和泛化能力^[29]。相比之下,更为复杂的RF和SVR模型可能引入不必要的模型方差,导致其综合性能稍为逊色。

4.4 方法有效性讨论与分析

为进一步验证本方法对其他煤种的适用性,对少量无烟煤样本进行了补充测试(共39个,粒度范围同样为0~6 mm)。其处理流程与褐煤、烟煤保持一致,预测结果如图7所示,可见PLS-AE-RR在无烟煤上的表现亦优于单一PLS:在测试集上,PLS-AE-RR的 R^2 达到0.963,MAE为 $0.387 \text{ MJ} \cdot \text{kg}^{-1}$,RMSE为0.482,均优于单一PLS。该结果说明,尽管无烟煤在有机组分上与褐煤、烟煤存在差异,本方法仍能有效捕捉不同煤种的非线性偏差并实现稳健校正。

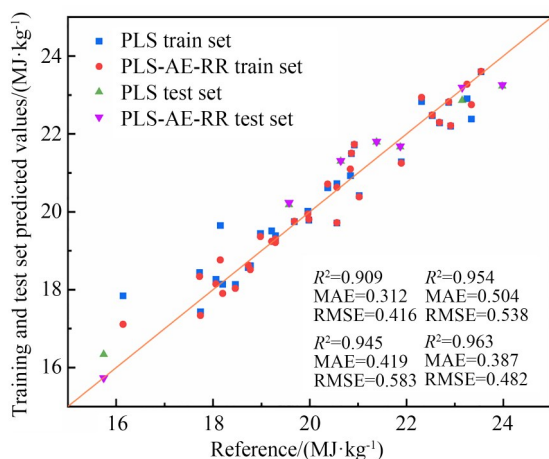


图7 无烟煤热值预测结果对比

Fig. 7 Comparison of calorific value prediction results for anthracite

基于上述实验结果,PLS-AE-RR框架的有效性得到了验证。从设计逻辑上看,该框架的优势源于按“先线性、后非线性、在残差域局部化非线性建模”的有序分解:PLS负责捕捉融合光谱与热值间的全局、主导线性关系,提供稳定且具

物理解释性的基线预测;AE在无监督条件下从高维融合光谱自动学习低维、稠密的非线性表征,用以表征PLS难以表达的粒度效应、散射与几何耦合等复杂模式;RR则将非线性拟合限定于PLS残差域,并通过L2正则化抑制过拟合,从而在残差信号较弱且样本规模受限时保持良好泛化性。

综上所述,该三级联动既保留了线性模型的物理可解释性,又通过受控的非线性校正显著提升了多煤种热值的预测精度。

5 结 论

本文针对工业现场大粒度(0~6 mm)原煤难以研磨、光谱非线性强等问题,提出了一种基于近红外与X射线荧光光谱融合的PLS-AE-RR模型。该模型构建了“PLS线性回归+AE非线性特征提取+RR残差校正”三级架构,将非线性建模约束于PLS残差域,在控制复杂度的同时提升泛化能力。基于153份电厂煤样的实验表明,模型在大粒度煤热值预测上效果显著:测试集上,褐煤 R^2 从0.921提升至0.974,MAE降低43.6%;烟煤 R^2 从0.881提升至0.938,MAE降低26.5%。模型性能优于PLS-AE-RF,PLS-AE-SVR等方法,体现了岭回归在残差拟合中的泛化优势。SNV结合一阶导数的预处理方法有效增强特征鉴别力。本研究为电厂原煤热值在线检测提供了免研磨、高精度的解决方案,支撑燃料精细化管理与配煤优化。后续将扩展样本与煤种范围,融合视觉先验信息,推进系统跨场站适配与轻量化校准。

作者贡献说明:

乔一帆:方法提出,实验设计与数据处理,论文构思与撰写;

刘若楠:实验设计,数据采集;

李斌:资源支持;

高睿:方法论,方法调研,资源支持;

李佳轩:方法调研,资源支持;

马维光:形式分析,资源支持;

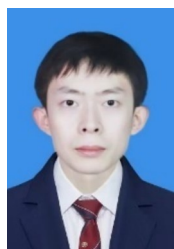
张雷:方法论,论文指导,项目管理,资源支持,论文审核和编辑。

参考文献:

- [1] BAI F Y, FAN M Q, YANG H L, *et al.* Rapid ash content determination method for coal particles through images captured under multiple ring light sources with various incident angles [J]. *Fuel*, 2021, 296: 120528.
- [2] ESPOSITO VINZI V, RUSSOLILLO G. Partial least squares algorithms and methods [J]. *WIREs Computational Statistics*, 2013, 5(1): 1-19.
- [3] WEN Z P, LIU H T, ZHOU M Q, *et al.* Explainable machine learning rapid approach to evaluate coal ash content based on X-ray fluorescence [J]. *Fuel*, 2023, 332: 125991.
- [4] 熊凯, 邹祥波, 陈创庭, 等. 激光诱导击穿光谱结合机器学习的煤质多指标同步快速检测 [J]. *热力发电*, 2025, 54(4): 129-139.
- XIONG K, ZOU X B, CHEN CH T, *et al.* Simultaneous rapid determination of multiple coal quality indicators using laser-induced breakdown spectroscopy combined with machine learning [J]. *Thermal Power Generation*, 2025, 54(4): 129-139. (in Chinese)
- [5] GAO R, LI J X, WANG S Q, *et al.* Ultra-repeatability measurement of calorific value of coal by NIRS-XRF [J]. *Analytical Methods*, 2023, 15(13): 1674-1680.
- [6] LI J X, GAO R, ZHANG Y, *et al.* Research on accurate analysis of coal quality using NIRS-XRF fusion spectroscopy in complex coal type scenarios [J]. *Optics & Laser Technology*, 2025, 181: 111734.
- [7] BEGUM N, CHAKRAVARTY D. Effect of particle size on the spectral properties of coal across the Visible-NIR-SWIR range (350-2 500 nm) [J]. *Fuel*, 2025, 381: 133351.
- [8] 雷萌, 李明, 吴楠, 等. 煤粒度对煤质近红外定量分析模型的影响 [J]. *光谱学与光谱分析*, 2013, 33(1): 65-68.
- LEI M, LI M, WU N, *et al.* Influence of different coal particle sizes on near-infrared spectral quantitative analytical models [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2013, 33(1): 65-68. (in Chinese)
- [9] SZALAY A, ANTAL I, ZSIGMOND Z, *et al.* Study on the relationship between particle size and near infrared diffuse reflectance spectroscopic data [J]. *Particle & Particle Systems Characterization*, 2005, 22(3): 219-222.
- [10] BARRA I, MOATASSEM TEL, KEBEDE F, *et al.* Soil particle size thresholds in soil spectroscopy and its effect on the multivariate models for the analysis of soil properties [J]. *Sensors*, 2023, 23(22): 9171.
- [11] DE CARVALHO G G A, SANTOS D Jr, SILVA GOMES MDA, *et al.* Influence of particle size distribution on the analysis of pellets of plant materials by laser-induced breakdown spectroscopy [J]. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 2015, 105: 130-135.
- [12] ZHANG Y, JIA W B, GARDNER R, *et al.* A distance correction method for improving the accuracy of particle coal online X-ray fluorescence analysis - Part 1: Theoretical dependence of XRF intensity on the distance [J]. *Radiation Physics and Chemistry*, 2018, 147: 118-121.
- [13] YIN J X, LIU R N, YIN W B, *et al.* DeiT and image deep learning-driven correction of particle size effect: a novel approach to improving NIRS-XRF coal quality analysis accuracy [J]. *Sensors*, 2025, 25(3): 928.
- [14] GELADI P, KOWALSKI B R. Partial least-squares regression: a tutorial [J]. *Analytica Chimica Acta*, 1986, 185: 1-17.
- [15] ZHENG J H, SONG Z H, GE Z Q. Probabilistic learning of partial least squares regression model: Theory and industrial applications [J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2016, 158: 80-90.
- [16] HELLAND I S, SAEBØ S, ALMØY T, *et al.* Model and estimators for partial least squares regression [J]. *Journal of Chemometrics*, 2018, 32(9): e3044.
- [17] WANG X X, WANG Z Y, ZHANG Y S, *et al.* Latent representation learning based autoencoder for unsupervised feature selection in hyperspectral imagery [J]. *Multimedia Tools and Applications*, 2022, 81(9): 12061-12075.
- [18] TAO C, PAN H B, LI Y S, *et al.* Unsupervised spectral-spatial feature learning with stacked sparse autoencoder for hyperspectral imagery classification [J]. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters*, 2015, 12(12): 2438-2442.

- [19] BERAHMAND K, DANESHFAR F, SALEHI E S, *et al.* Autoencoders and their applications in machine learning: a survey [J]. *Artificial Intelligence Review*, 2024, 57(2): 28.
- [20] XU Q Y, ZHANG C X, ZHANG L, *et al.* The learning effect of different hidden layers stacked autoencoder [C]. 2016 *8th International Conference on Intelligent Human-Machine Systems and Cybernetics (IHMSC)*. August 27-28, 2016, Hangzhou, China. IEEE, 2016: 148-151.
- [21] JUSTIN S, WAOO A, WAOO A A. Performance analysis of activation functions in neural networks[J]. *ShodhKosh: Journal of Visual and Performing Arts*, 2024, 5(1).
- [22] REFINETTI M, GOLDT S. The dynamics of representation learning in shallow, non-linear autoencoders [J]. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2023, 2023 (11): 114010.
- [23] ANDRIC V, KVASCEV G, CVETANOVIC M, *et al.* Deep learning assisted XRF spectra classification[J]. *Scientific Reports*, 2024, 14: 3666.
- [24] HOERL A E, KENNARD R W. Ridge regression: biased estimation for nonorthogonal problems [J]. *Technometrics*, 2000, 42(1): 80-86.
- [25] EMMERT-STREIB F, DEHMER M. High-dimensional LASSO-based computational regression models: regularization, shrinkage, and selection [J]. *Machine Learning and Knowledge Extraction*, 2019, 1(1): 359-383.
- [26] DE X H, LI H M, ZHANG J C, *et al.* Prediction of the calorific value and moisture content of caragana korshinskii fuel using hyperspectral imaging technology and various stoichiometric methods[J]. *Agriculture*, 2025, 15(14):1557.
- [27] MAO J H, ZHAO H Q, XIE Y, *et al.* Fast and nondestructive proximate analysis of coal from hyperspectral images with machine learning and combined spectra-texture features[J]. *Applied Sciences*, 2024, 14(17):7920.
- [28] RUAN R H, ZHANG K J, CUI B C, *et al.* Effect of primary air and coal properties on the formation of fine mode particles during low NO gasification-combustion of coal in a self-sustaining furnace [J]. *Process Safety and Environmental Protection*, 2024, 186: 1106-1119.
- [29] WANG Y, WANG Q Q, GUO X C, *et al.* Optimization and performance analysis of extreme learning machine by L2-norm regularization [C]. 2020 *International Conference on Applications and Techniques in Cyber Intelligence*. Cham: Springer, 2021: 405-413.

作者简介:



乔一帆(1998—),男,山西大同人,硕士研究生,2020年于山西大学获得学士学位,主要从事多光谱融合检测方面的研究。E-mail: qiaoyifan22@163.com

通讯作者:



李佳轩(1996—),男,山西晋城人,博士,2025年于山西大学获得博士学位,主要从事利用XRF, NIRS及LIBS技术在能源材料的定性与定量分析中的应用研究。E-mail: lijx157@foxmail.com

通讯作者:



张雷(1981—),男,山西运城人,教授,博士生导师,2003年于沈阳航空航天大学获得学士学位,2008年于山西大学获得博士学位,主要从事激光诱导击穿多光谱融合检测、激光复合光谱立体侦察、机器视觉等技术的研究。E-mail: k1226@sxu.edu.cn