

铁矿粉铁含量的高光谱分析和定量反演研究

李孟倩¹, 韩秀丽¹, 汪金花¹, 吴兵^{1,2}

(1. 华北理工大学 矿业工程学院, 河北 唐山 063210;
2. 中国矿业大学(北京) 北京 100083)

摘要: 高光谱检测铁矿粉铁含量是一种新技术, 具有无损、高效的检测优势。为了研究高光谱识别技术对铁矿选矿粉铁含量测定的精确度, 选取了铁矿选矿粉作为测试样本, 采集了不同铁含量铁矿选矿粉的高光谱曲线, 经过平滑去噪和光谱特征提取后, 开展铁含量光谱拟合实验和铁含量的反演研究。研究表明: 选矿粉铁含量与高光谱曲线高度相关性波段为 Fe 的强吸收位置 517~520 nm 和 873~888 nm; 在吸收位置 520 nm 左右, 进行了基于最小二乘的选矿粉铁含量的建模反演, 反演实验结果的拟合度为 0.9885, 相对误差为 7.26%, 说明利用高光谱技术进行铁矿粉铁含量检测准确度较高, 为高光谱检测铁含量的实际应用提供了理论基础。

关键词: 高光谱检测; 铁矿粉铁含量; 最小二乘模型; 定量反演

doi:10.3969/j.issn.1000-6532.2022.04.035

中图分类号: TD952;P23 文献标志码: A 文章编号: 1000-6532(2022)04-0205-06

铁矿粉是钢铁工业的主要原料, 铁含量测定是铁矿交易及生产中重要环节, 快速准确的测定铁含量对企业生产监测、作业调度及制定生产与发展计划有着至关重要的作用。我国铁矿储量中, 贫铁矿占铁矿总储量的 98.1%, 而贫铁矿在采、选、冶过程中均需进行铁含量测定。目前传统测定铁矿石中铁含量测定鉴定大多采用氧化还原滴定法、络合电位滴定法、微量滴定法和 X-射线荧光光谱法等方法^[1-3]。这些传统方法测定铁含量精度较高, 如重铬酸钾滴定法的重复性标准差一般不超过 0.2, 但测定过程操作繁杂, 检测周期较长, 还存在大量二次化学的环境污染等问题。高光谱检测具有快捷、高效、无损特点, 已经作为多种行业的元素含量检测定量分析的初步检测手段之一。例如将高光谱技术检测土壤、植物叶片铁含量^[4]。曹兰杰^[5], 汪金花^[6]利用高光谱技术研究了铁尾矿砂高光谱特征, 分析了不同区域铁尾矿光谱差异, 这些前期研究表明, 铁矿中铁含

量与光谱曲线吸收位置和反射率具有强相关性, 但是利用高光谱技术来检测铁矿粉铁含量还鲜有研究。本文选取了不同铁含量铁矿粉样本进行高光谱检测分析实验, 开展了铁含量高光谱特征的提取分析、光谱拟合和建模反演, 为铁矿粉铁含量的快速检测提供基础理论。

1 实验材料与方法

1.1 铁矿粉样品制备

实验样本主要来源于铁矿粉样本取自河北省的某两个铁矿。铁矿 1 位于华北地台北缘大型多金属成矿带, 主要矿石矿物有磁铁矿、闪锌矿、黄铁矿、辉钼矿。铁矿 2 为铁硅质沉积建造受变质铁矿床, 矿石自然类型为石英岩型磁铁矿石, 主要矿石矿物有磁铁矿、假象赤铁矿。

铁矿石在进行选矿时需测定铁含量, 选矿过程中有铁精矿、中矿和尾矿三种选矿产品, 某些给矿环节的中间产品也需要测定铁含量。实验共

收稿日期: 2020-07-13; 改回日期: 2020-08-08

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51574105, 51774140); 河北省钢铁联合基金资助项目(E2021209147); 河北省钢铁联合基金资助项目(E2016209299); 省属高校基本科研项目(JQN2020037)

作者简介: 李孟倩(1986-), 女, 讲师, 研究方向为遥感在地质学中的应用、高光谱数据分析等。

通信作者: 韩秀丽(1966-), 女, 教授, 研究方向为工艺矿物学, 矿产资源高效利用及固废资源化等。

选取铁矿粉样本 30 个，包含含量低于 15% 的铁尾矿和含量高于 50% 的铁精矿及中间含量中矿。将总体样本分为两类，其中后期建模反演的训练样本 18 个，验证检验样本 12 个。所有样本过

0.074 mm 筛后，通过化学方法精确测定铁含量，再次干燥置放于黑色盒内，测定其高光谱特征曲线。样本编号、铁含量见表 1。

表 1 铁矿粉样本实测铁含量
Table 1 Measured iron content of iron ore powder samples

名称	编号	HFe1	HFe2	HFe3	HFe4	HFe5	HFe6
训练样本	含量/ %	67.34	64.25	63.68	62.50	54.97	52.51
	编号	MFe 1	MFe2	MFe3	MFe4	MFe5	MFe6
	含量/ %	49.99	47.50	42.53	39.99	37.72	34.99
	编号	LFe1	LFe2	LFe3	LFe4	LFe5	LFe6
	含量/ %	30.05	27.57	22.59	20.16	14.94	12.66
	验证样本	编号	T1	T 2	T3	T4	T5
含量/ %	65.42	60.00	57.50	51.84	45.00	41.77	
	编号	T7	T8	T9	T10	T11	T12
	含量/ %	38.46	32.50	28.64	24.91	17.54	13.25

1.2 光谱采集与预处理

实验使用 ASD FieldSpec4 地物光谱仪，在暗室内进行光谱数据采集。该光谱仪光谱范围是 350~2500 nm，光谱分辨率在 350~1000 nm 为 3 nm，在 1000~2500 nm 为 6 nm。测量时将铁矿粉样本铺平在 10 cm*10 cm 的黑色不反光纸板上，同时将参考白板水平放置，探头光纤末端位于样本正上方，采用接触式测量方式。为了保证光谱数据可靠性，每个样本均匀搅拌后分为 10 份，每份重复测量 5 次。当重复测量反射率差异在 5% 以内时，认定为测量数据合格，不合格数据剔除。取合格数据实测光谱数据的平均值作为样本实测光谱。为了突出光谱特征，抑制随机噪声，需要对实测光谱数据进行包络线去除后作为实验分析原始数据。

1.3 光谱数据处理与建模

1.3.1 相关性分析

原始光谱曲线经过光谱一阶微分变换 (SD)、包络线去除 (SR) 等处理后，进行 Fe 离子吸收位置与铁含量的相关性分析。利用相关系数 r 大小来判定数学建模的强线性相关波段，见式 (1)。

$$r(X, Y) = \frac{Cov(X, Y)}{\sqrt{Var[X]Var[Y]}} \quad (1)$$

其中， X 是铁矿样本光谱曲线的吸收位置光谱反射率， Y 是铁矿样本的铁含量； $Cov(X, Y)$ 为 X 与 Y 的协方差， $Var[X]$ 为 X 的方差， $Var[Y]$ 为 Y 的方

差。当相关系数大于设定阈值时，认定该吸收位置 P_i 为强线性波段，区间宽度 (P_i+V , P_i-V)， V 通常取 20 nm。

1.3.2 模型建立

由于实验样品纯度较高，含量明确，实测高光谱反射率与铁含量之间是强线性相关，选取多元线性回归方法，进行光谱反射率与铁含量的数学建模，见式 (2)。

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \dots + \beta_n X_n + \varepsilon \quad (2)$$

其中， Y 表示铁矿样本的铁含量； X_j 表示对应吸收位置的光谱反射率； β_n 即对应于第 n 个自变量的回归系数； ε 为回归方程式的随机误差。

参数估计选取最小二乘、偏最小二乘等方法进行对比分析。建模评价指标选取拟合度 (R^2)、相对误差 (RE) 和均方根误差 (RMSE) 来评价。

2 实验结果与分析

2.1 选矿粉的高光谱特征分析

图 1 为不同铁含量铁矿石选矿粉的原始高光谱曲线，图 2 为包络线去除后的不同铁含量铁矿石选矿粉高光谱曲线。从图 2 中可以看出，选矿粉高光谱的反射率随着选矿粉的铁含量升高而降低，有明显线性关系。由常见选矿粉的化学分析可知，铁矿石选矿粉主要由含铁矿物和脉石组成，其中含铁矿物主要为铁的化合物。

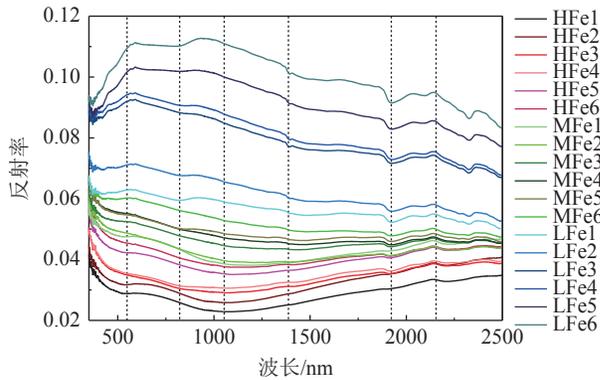


图1 铁矿石选矿粉的高光谱曲线

Fig.1 Hyperspectral curve of iron ore beneficiation powder

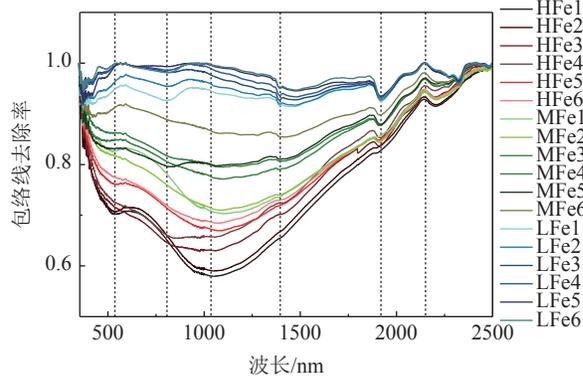


图2 铁矿石选矿粉的包络线去除后高光谱曲线

Fig.2 Hyperspectral curve of iron ore beneficiation powder after the envelope removed

由于晶体场效应，电子在原子或离子能级之间或元素之间的存在电核跃迁，因此，形成特定的光谱特征，常见的 Fe^{2+} 吸收位置为 430、450、510、550，1000~1100、1800~1900 nm； Fe^{3+} 吸收位置 400、450、490、520、700、870 nm 左右。

图中不同铁含量的高光谱曲线总体走势基本一致，符合含铁矿物的光谱曲线特征。在 400~1000 nm 区间内存在较强的 Fe 光谱吸收带，不同样本之间光谱反射率区分度明显。特别是在 520 nm、880 nm 附近有光谱吸收强线性相关带。整体上随着样本铁含量的增高，铁吸收率增加，光谱反射率数值减小。因此表现出随着样本矿物混合物中的铁含量增大，其光谱反射率呈现降低的趋势。

2.2 铁含量相关性分析

图 3、4 为样本原始高光谱曲线、包络线去除后光谱曲线、一阶微分光谱曲线与对应铁含量的相关性分析模型。从图 3、4 中可以看出，原始光谱数据与铁含量相关性平均值为 -0.8968，

在 354 nm 处相关性最高，整体相关性较为稳定；光谱一阶微分数据与铁含量相关性平均值为 0.783905331，相关性波动性较大，总体相关性较弱，在 1339 nm 处相关性最强；选矿粉高光谱曲线的包络线去除值与铁含量的相关性曲线较为稳定，总体相关性较强，它与铁含量相关性平均值为 -0.968703204，其中最高的相关系数 -0.98953，在波长 400~2100 nm 相关性很稳定，在波长 2100~2500 nm 间相关性较弱。

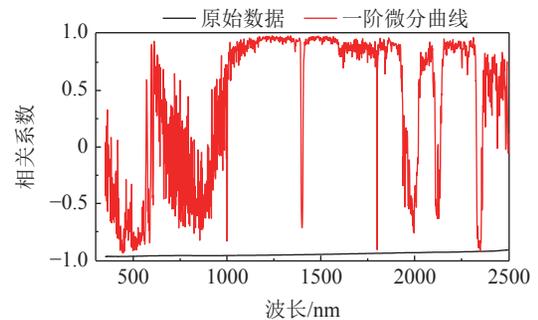


图3 原始数据及一阶微分数据与铁含量相关性
Fig.3 Correlation between original data and first-order differential data and iron content

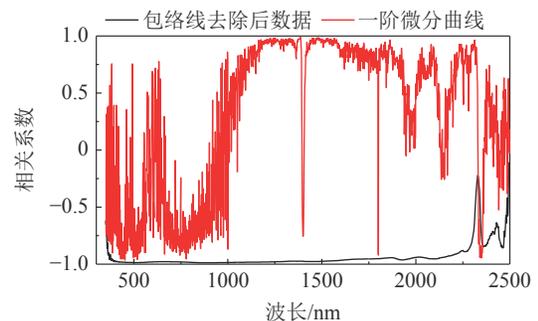


图4 包络线去除数据及一阶微分数据与铁含量相关性
Fig.4 Correlation between envelope removal data and first-order differential data and iron content

由于铁矿石选矿粉一般由铁及铁的化合物、二氧化硅及其他杂质成分共同组成，会产生了光谱吸收特征位置微小偏移。综合对比，选择相关性较强的包络线去除后光谱曲线的 517~550 nm 和 873~913 nm 波长范围为主要分析波段，见表 2。设定吸收位置相关性系数越接近 1，为强线性识别波段，表中相关系数大于 0.98 的波段有 517~520 nm 和 873~888 nm，可作为铁矿粉铁含量高光谱检测的敏感识别波段。

2.3 铁含量高光谱建模反演

选取 18 个建模集样本的敏感波段的高光谱反射率值及相对应的 Fe 含量数据，并对其进行一元

表 2 铁矿石选矿粉的高光谱曲线包络线去除值和铁含量相关系数

Table 2 Hyperspectral curve envelope removal value and iron content correlation coefficient of iron ore beneficiation powder

吸收位置	相关系数	吸收位置	相关系数
517 nm	0.983319	879 nm	0.984586
518 nm	0.983504	880 nm	0.984677
519 nm	0.983682	881 nm	0.984684
520 nm	0.983319	882 nm	0.984686
873 nm	0.98461	883 nm	0.984663
874 nm	0.984607	884 nm	0.984653
875 nm	0.984621	885 nm	0.984687
876 nm	0.984606	886 nm	0.984713
877 nm	0.98455	887 nm	0.984727
878 nm	0.984507	888 nm	0.984689

线性回归，最终得到拟合效果排名前 2 的反演模型所对应的敏感波段 $X_1=520\text{ nm}$ ， $X_2=880\text{ nm}$ ，其回归模型见图 5。从图中可以看出，铁矿粉的铁含量与反射光谱呈负相关性，随着铁矿粉铁含量的

增加，反射率呈下降趋势，并且不同铁含量的铁矿粉的反射曲线走势具有一致性。样本在 520 nm 和 880 nm 处光谱反射率随着铁含量升高，数值逐渐降低，表现出强关联性。

对敏感波段 $X_1=520\text{ nm}$ 、 $X_2=880\text{ nm}$ 构建对应的二元线性回归模型，可得 Fe 含量预测模型 $y = 155.1347 - 60.3236X_1 - 76.9701X_2$ ，该模型的拟合度 $R^2 = 0.9667$ 。与单敏感波段 $X_1=520\text{ nm}$ 、 $X_2=880\text{ nm}$ 所构建预测模型相比二元线性模型拟合度没有优势，反而略小。

利用高光谱仪采集 12 个验证集样本的高光谱曲线，对高光谱数据进行处理后，利用上述预测模型计算 Fe 含量，得到实测值与估测值的比较值，铁含量反演模型验证集的预测值与实测值的散点图，各样点较为均匀的分布在预测模型附近，预测值与铁矿粉的铁含量的实测值基本接近，模型精度较高。用拟合度 (R^2)、相对误差 (RE) 和标准误差 (RSME) 判断估测模型的精度水平。

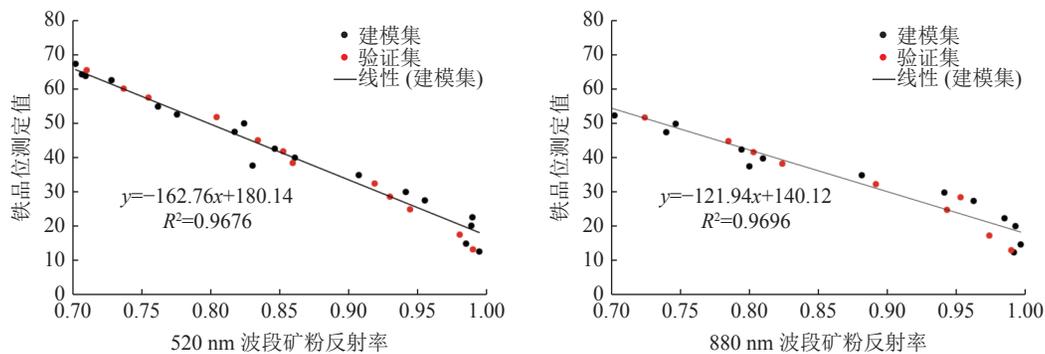


图 5 不同铁含量预测模型
Fig.5 Different iron content prediction models

在 95% 的置信区间的标准下，以敏感波段 517~520 nm 和 873~888 nm 中每一个波长所对应的反射率与铁含量关系建立的模型的决定系数 R^2 均在 0.9 以上，相对误差 RE 小于 8.5%，说明各反演模型具有较强的稳定性，总体反演精度较好，见表 3。但是其中验证样本 T10、T11、T12 的实测铁含量与预测铁含量之间差值较为明显，约大于 3% 而小于 5% 左右。说明铁矿粉样本混合物多种成分光谱反射值之间存在明显干扰。当样本铁含量较高时，铁离子光谱特征明显，其他相近离子光谱扰动不明显；当铁含量小，低于某个阈值

时，低含量矿粉高光谱测量受到矿粉中其他物质的影响较大，其检测准确度会大大降低。另外，根据验证集样本的铁含量与各模型的预测铁含量统计结果显示，520 nm 波段回归模型的拟合度、相对误差和标准误差均优于 880 nm 波段模型和二元模型，可作为优选检测模型。

3 结论

铁含量是决定铁矿石选矿产品的关键指标，铁矿石选矿粉的铁含量越高，铁矿石冶炼成本、

表3 铁含量反演模型预测分析
Table 3 Prediction analysis of iron content inversion model

样本编号	520 nm波段模型		880 nm波段模型		二元模型	
	实测铁含量/%	预测铁含量/%	实测铁含量/%	预测铁含量/%	实测铁含量/%	预测铁含量/%
T1	65.42	64.37	65.42	64.48	65.42	64.48
T2	60.00	59.99	60.00	59.54	60.00	59.74
T3	57.50	57.06	57.50	56.89	57.50	56.98
T4	51.84	49.06	51.84	51.71	51.84	50.75
T5	45.00	44.20	45.00	44.33	45.00	44.29
T6	41.77	41.23	41.77	42.11	41.77	41.79
T7	38.46	40.14	38.46	39.56	38.46	39.77
T8	32.50	30.50	32.50	31.29	32.50	30.98
T9	28.64	28.70	28.64	23.82	28.64	25.60
T10	24.91	26.31	24.91	25.04	24.91	25.48
T11	17.54	20.51	17.54	21.30	17.54	20.97
T12	13.25	18.95	13.25	19.35	13.25	19.16
拟合度 R^2	0.9885		0.9778		0.9845	
相对误差 $RE_{总}/\%$	7.26		8.10		7.64	
去掉后两组样本后相对误差 $RE_{高}/\%$	2.72		2.97		2.75	
标准误差RMSE/%	2.23		2.57		2.30	

运输成本越低，对铁资源的利用将越充分。本文根据不同铁含量的铁矿石选矿粉的高光谱反射率数值分析和反演建模，研究不同铁矿石选矿粉的高光谱反射率和铁含量的变化规律，分析铁矿石选矿粉高光谱反射率的光谱特征及其与铁含量的相关关系，发现高光谱曲线的517~550 nm和873~913 nm的吸收位置反射率有利于铁含量检测和识别，可以为预测铁含量提供理论基础。

参考文献：

[1] 汪金花, 曹兰杰, 白洋, 等. 铁尾矿粒径和湿度因子对高光谱特征参量影响[J]. *矿产综合利用*, 2019(2):128-133.
WANG J H, CAO L J, BAI Y, et al. Influence of iron tailings' particle size and humidity factor on hyperspectral characteristic parameters[J]. *Multipurpose Utilization of Mineral Resources*, 2019(2):128-133.

[2] 王卫忠. 铁矿石中全铁含量的检测方法对比研究[D]. 南京: 南京理工大学, 2011.
WANG W Z. Comparative study on detection methods of total iron content in iron ore[D]. Nanjing: Nanjing University of Science and Technology, 2011.

[3] 汪金花, 曹兰杰, 徐国强, 等. 混凝土硫酸钠腐蚀产物的高光谱检测方法研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2016, 39(6):

1724-1730.
WANG J H, CAO L J, XU G Q, et al. Research on the hyperspectral detection method of concrete sodium sulfate corrosion products[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2016, 39(6):1724-1730.

[4] 李园, 王振锡, 刘玉霞, 等. 不同时期香梨叶片铁元素含量高光谱反演模型[J]. *西南农业学报*, 2019, 32(1):167-174.
LI Y, WANG Z X, LIU Y X, et al. Hyperspectral inversion model of iron content in fragrant pear leaves in different periods[J]. *Southwest Agricultural Journal*, 2019, 32(1):167-174.

[5] 汪金花, 曹兰杰, 郭云飞, 等. 铁尾矿高-多光谱遥感特征分析与信息识别[J]. *云南大学学报*, 2019, 41(5):974-981.
WANG J H, CAO L J, GUO Y F, et al. Feature analysis and information recognition of iron tailings high-multispectral remote sensing[J]. *Journal of Yunnan University*, 2019, 41(5):974-981.

[6] 曹兰杰, 汪金花, 赵礼剑, 等. 不同矿床类型铁尾矿遥感监测的识别窗口研究[J]. *矿业研究与开发*, 2018, 38(7):104-108.
CAO L J, WANG J H, ZHAO L J, et al. Research on the identification window of remote sensing monitoring of iron tailings of different deposit types[J]. *Mining Research and Development*, 2018, 38(7):104-108.

Study on Hyperspectral Analysis of Iron Ore Powder and Quantitative Inversion of Iron Grade

Li Mengqian¹, Han Xiuli¹, Wang Jinhua¹, Wu Bing^{1,2}

(1.North China University of Science and Technology, Tangshan, Hebei, China;

2.China University of Mining and Technology(Beijing), Beijing, China)

Abstract: Hyperspectral detection of iron grade in iron ore dressing powder is a new technology, which has the advantages of nondestructive and efficient test. Some iron ore powders with different grades were selected as test samples in order to test the accuracy of identifying iron grade of iron ore dressing powder by hyperspectral spectroscopy. The hyperspectral curves of the samples were collected, after smoothing denoising and spectral feature extraction, the iron grade spectrum fitting test and iron grade inversion modeling were carried out. The results show that the high correlation between iron grade of iron ore powder and hyperspectral curve is the strong absorption position of Fe, about 517~520 nm and 873~888 nm; The modeling inversion of iron ore grade at about 520 nm based on the least square method is carried out. The determination coefficient of the inversion test results is 0.9885, and the relative error is 7.26%, it shows that the detection accuracy of iron grade of iron ore powder by hyperspectral technology is high, which provides a theoretical basis for the practical application of hyperspectral test of iron grade.

Keywords: Hyperspectral measurement; Iron grade of iron ore powder; Least square model; Quantitative inversion

欢 迎 投 稿 欢 迎 订 阅