

文章编号 1004-924X(2008)11-2051-04

# 棉-涤混纺面料中棉含量的近红外光谱分析

王动民<sup>1</sup>, 金尚忠<sup>1</sup>, 陈华才<sup>1</sup>, 陈星旦<sup>2</sup>

(1. 中国计量学院 光学与电子科技学院, 浙江 杭州 310018;

2. 中国科学院 长春光学精密机械与物理研究所, 吉林 长春 130033)

**摘要:**建立了分析精度较高的用于检测棉-涤混纺面料里含棉量的近红外光谱分析模型。选择了50个棉-涤混纺面料作为对象,自行设计采样装置,采集其近红外光谱;然后,经一阶导数、二阶导数、Savitzky-Golay滤波等方法预处理,结合偏最小二乘法,建立了4个棉成分的定量分析模型。结果表明:Savitzky-Golay滤波对定标结果几乎没有影响;经一阶导数预处理后的光谱数据结合偏最小二乘法建立的模型具有较高的分析精度,定标均方差和预测均方差分别达到了0.022和0.018,分析误差控制在 $\pm 0.05$ 以内,基本满足了纺织领域快速定量检测的精度需求。同时,还分析了近红外光谱技术在该应用领域的研究重点。

**关键词:**近红外光谱;纺织面料;棉含量;偏最小二乘法;预处理

**中图分类号:**O433.4 **文献标识码:**A

## Quantitative analysis of cotton content in cotton-terylene textile by near infrared technique

WANG Dong-min<sup>1</sup>, JIN Shang-zhong<sup>1</sup>, CHEN Hua-cai<sup>1</sup>, CHEN Xing-dan<sup>2</sup>

(1. *College of Optical and Electronic Technology, China Jiliang University, Hangzhou 310027, China;*

2. *Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics,  
Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China)*

**Abstract:** A calibration model for determining the cotton content in cotton-terylene textile precisely was established. The near infrared spectra of 50 cotton-terylene textile samples were collected using self-designed accessory, and Savitsky-Goaly filter smoothing, first order derivative and second order derivative were used to pretreat the spectra. Calibration models for cotton content were established with Partial Least Square(PLS). The experimental results indicate that Savitsky-Goaly filter smoothing spectral treatments can not affect the performance of the model in this case, but NIR technique can analyze the cotton content in the textile precisely. The Root Mean Square Error of Calibration (RMSEC) and Root Mean Square Error of Prediction(RMSEP) are 0.022 and 0.018 respectively, and the error of analysis is restricted in  $\pm 0.05$ . In addition, several key aspects of this application were expressed.

**Key words:** near infrared spectroscopy; textile; cotton content; Partial Least Square(PLS) method; pretreatment

收稿日期:2008-03-26;修订日期:2008-06-30.

基金项目:浙江省科技计划重点资助项目(No. 2004C21043)

## 1 引言

在纤维和纺织品加工以及选用衣料时,常常需要确定面料的成分含量<sup>[1]</sup>。通常纺织纤维的鉴别可以分为物理方法、化学方法;然而纺织纤维的理化分析法存在不少缺陷:(1)需用化学试剂,有毒、有污染、有危险;(2)过程复杂、劳动强度大、耗时,测一个样品通常需要几个小时甚至一天;(3)要求检测人员有丰富的经验,检测结果受主观因素影响。

近红外光谱(NIRS)记录的主要是分子中含氢基团 C-H、N-H、O-H 的倍频与合频振动信息<sup>[2]</sup>。不同基团产生的光谱在吸收峰位置和强度上有所不同,随着样品成分组成或者结构的变化,其光谱特征也将发生变化。利用这种变化信息,就可以对样品中的有关组分做定量或定性分析。近些年,该技术以其分析速度快、无损、操作简单、无污染等优点,已经成为农业、食品、化工、制药等行业的快速物质成分定量及定性分析的重要手段<sup>[3-4]</sup>。

棉-涤混纺面料为生活中最常见也是最常检测的样品。本文采用近红外光谱技术对 50 个棉-涤混纺面料进行了分析,利用一阶导数、二阶导数、Savitzky-Golay<sup>[5-6]</sup>滤波等方法对光谱预处理,分析了纺织面料中棉成分的吸收特征,同时,结合偏最小二乘法,建立了定量分析面料中棉含量的模型。

## 2 实验

实验仪器:CONTROL DEVELOPMENT 公司的 NIR-256L-1.7T1 型近红外光纤光谱仪,InGaAs 阵列探测器,自行设计的光纤采样支架,其结构及采样如图 1 所示:

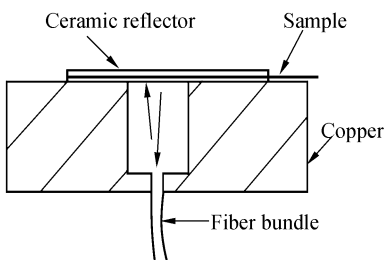


图 1 采样装置

Fig. 1 Fixture for sample

实验样品:50 个含棉量有一定梯度分布的棉-涤混纺面料。样品中含棉量用国标方法测定(GB/T2910-1997)。从中选出 40 个含棉量有代表性分布的样品用作定标,另外 10 个作为验证使用。

实验方法:将纺织面料平压在高反射率的陶瓷标准板上,透过样品的光信号经反射板重新透过样品,与直接从样品下表面反射回的漫反射光一同进入光纤,以增强样品信息的信号,提高吸光度数据的可靠性。同时,设定光谱仪扫描的波长间隔为 1 nm,不同位置扫描 50 次求平均,波长取 1 100~2 100 nm。室内温度为(25±2)℃。整个实验装置固定在光学防震平台上,保证光路不受外界震动的影响。

数据处理:利用商业软件包 TQ Analyst V7.1.0.32 进行数据预处理并建立预测模型。由定标均方差(RMSEC)、预测均方差(RMSEP)及回归值与实测值的相关系数  $R$  来评价模型质量,一个好的模型应该具有较低的 RMSEC、RMSEP 及较高的  $R$  值,此外, RMSEC、RMSEP 值的差也要相对较小,避免出现过拟合现象。

## 3 结果与讨论

图 2 示出了 50 个棉-涤混纺样品的近红外光谱。由图可以看出:(1)样品在各个波长处的吸光度都有较大差别,这主要是由各个样品的厚度、纺织方式、样品松散状态等与成分无关的因素造成的,在对光谱进行分析时应当尽量消除。一阶导数、二阶导数处理分别可以消除吸光度随波长的漂移和旋转,但是导数处理对噪声极为敏感,阶数越高,影响也就越显著。(2)由于采样光纤材料的吸收,导致 1 100~1 200 nm、1 350~1 500 nm 的

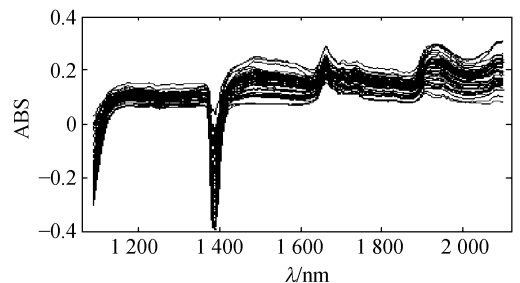


图 2 50 个样品的原始光谱

Fig. 2 Raw spectra of 50 textile samples

吸光度很大程度上为负值。从理论上讲,这些区域的吸光度不应参与含棉量的定标运算。因此,选择 1 500~2 050 nm 的光谱数据参与定标运算。(3)1 700、1 950 nm 附近分别有一相对较窄和一相对较宽的两个吸收峰。由于天然纤维棉比人工合成纤维涤内部分子结构复杂得多,因此,涤的吸收峰会相对窄一些,棉的吸收峰会相对宽一些,从而可知,1 700 nm 附近的吸收峰为涤成分的吸收,1 950 nm 附近的吸收峰为棉成分的吸收,这与图 3 所示纯棉样品、图 4 所示纯涤样品的光谱图进行比对分析的结论一致。

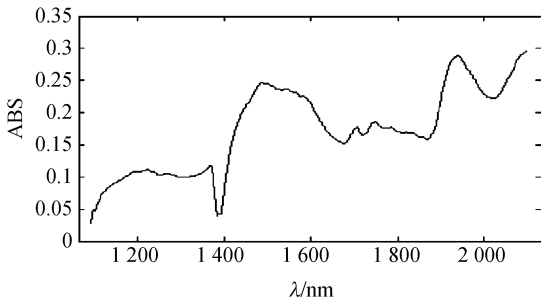


图 3 纯棉面料的光谱图

Fig. 3 Raw spectrum of pure cotton textile

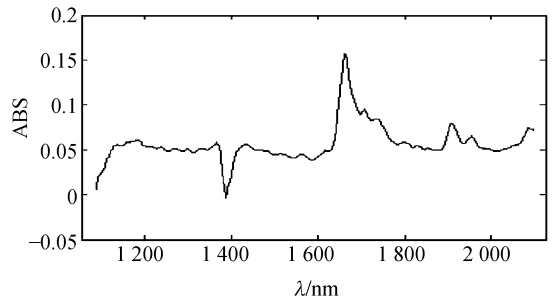


图 4 纯涤面料的光谱图

Fig. 4 Raw spectrum of pure terylene textile

偏最小二乘(PLS)<sup>[7-10]</sup>回归能更有效地识别与化学成分相关的有用信息,消除无关信息的干扰。Savitzky-Golay 滤波器通过多项式来对移动窗口内的数据进行多项式最小二乘拟合,是目前应用较广泛的去噪方法。利用不同的光谱预处理方法结合偏最小二乘回归建模,得到的几种结果如表 1 所示。

从表 1 中可以看出:(1)前两个使用一阶导数处理得到的模型具有相同且较高的分析性能。(2)应用中,由于光谱是通过重复扫描 50 次求平均后得到的,随机噪声相对较小。因此,Savitzky-Golay 平滑处理对定标结果几乎没有影响。

表 1 利用不同种预处理方法得到的定标结果

Tab. 1 PLS calibration results for cotton using different preprocess methods

预处理方法	PLS 因子数	相关系数/R	定标均方差	预测均方差
Savitzky-Golay 5 点二次平滑+一阶导	4	0.989	0.022	0.018
一阶导	4	0.989	0.022	0.018
Savitzky-Golay 5 点二次平滑+二阶导	3	0.969	0.039	0.033
二阶导	3	0.969	0.039	0.034

利用一阶导数预处理结合偏最小二乘法定标,含棉量的定标与验证散点图如图 5 所示。

图 5 中,两条斜线分别表示±0.05 的偏差。不难发现,各样品含棉量的化学值与回归值的偏差都分布在±0.05 之内。

同时,研究中发现,利用成分相同,含量不同的样品定标时,模型才具有相对较高的分析精度。而利用成分不同的样品参与定标时,很难建立分析精度较高的模型。因此,在预测过程中,为了获得较高的分析精度,首先要确定样品中含有何种成分,即定性分析,然后再利用相应的模型进行定

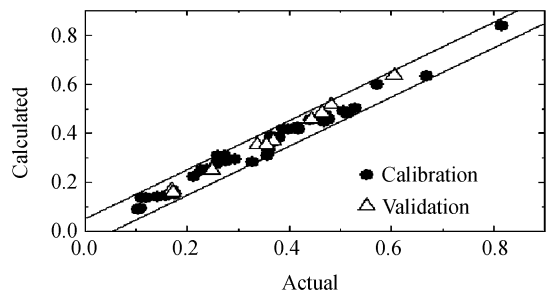


图 5 含棉量的定标与验证散点图

Fig. 5 Scatter plot of calibration and validation of cotton

量分析。

## 4 结 论

通过对面料的近红外光谱数据的解析处理,比较了几种不同预处理方法对建模结果的影响,得出了用于分析棉-涤混纺面料中棉含量的近红外光谱分析模型, RMSEC、RMSEP 分别达到了

0.022 和 0.018;为纺织品成分的定量分析提供了可靠、高效、绿色无损的检测手段。根据实际需求,进一步的研究需从以下几个方面考虑:(1)设计良好的采样装置,消除纺织面料的织纹导致的样品不均匀性所带来的影响。(2)收集更多具有代表性的样品,这是建立优秀定标模型的必备条件。(3)在保证分析精度的情况下,消除定标、预测样品要具有相同的成分这一条件限制。

## 参考文献:

- [1] 李青山, 纺织纤维鉴别手册[M]. 北京:中国纺织出版社,2003.  
LI Q SH. *Handbook of Discrimination of Textile Fibre*[M]. Beijing: China Textile Press,2003. (in Chinese)
- [2] 陆婉珍,袁洪福. 现代近红外光谱分析技术[M]. 北京:中国石化出版社,2001.  
LU W ZH, YUAN H F. *Modern Near Infrared Spectroscopy Analysis Technology*[M]. Beijing: China Petrochemical Press, 2001. (in Chinese)
- [3] PASQUINI C. Near infrared spectroscopy: fundamentals, practical aspects and analytical applications [J]. *J. Braz. Chem. Soc.*, 2003,14(2):198-219.
- [4] CHALMERS M, GRIFFITHS R. *Handbook of Vibrational Spectroscopy* [M]. Hohn Wiley&Sons, Ltd, 2003.
- [5] O'NEIL A J, JEE R D, MOFFAT A C. Measurement of the percentage volume particle size distribution of powdered microcrystalline cellulose using reflectance near-infrared spectroscopy[J]. *Analyst*, 2003,128:1326-1330.
- [6] SOHN M, BARTON F E, MCCLUNG A M, *et al.*. Near-infrared spectroscopy for determination of protein and amylose in rice flour through use of derivatives[J]. *Cereal Chemistry*, 2004,81(3): 341-344.
- [7] HAALAND D M, THOMAS E V. Partial least squares methods for spectral analyses [J]. *Anal. Chem.*, 1988, 60 (11): 1193-1217.
- [8] MCSHANE M J, COTE G L, SPIEGELMAN C H. Assessment of partial least-squares calibration and wavelength selection for complex near-infrared spectra [J]. *Appl. Spectrosc.*, 1998, 52 (6): 878-884.
- [9] 张玲. PLS 定标法在近红外光谱分析仪中的应用研究[J]. 光学 精密工程, 2000, 8 (3): 238-241.  
ZHANG L. Partial least-squares method for calibration with NIR spectrophotometer[J]. *Opt. Precision Eng.*, 2000, 8(3): 238-241. (in Chinese)
- [10] 赵强,张工力,陈星旦. 多元散射校正对近红外光谱分析定标模型的影响[J]. 光学 精密工程, 2005, 13(2): 253-258.  
ZHAO Q, ZHANG G L, CHEN X D, Effects of multiplicative scatter correction on a calibration model of near infrared spectral analysis[J]. *Opt. Precision Eng.*, 2005, 13(2): 253-258. (in Chinese)

作者简介:王动民(1980—),河南扶沟人,讲师,主要从事近红外光谱技术方面的研究。E-mail: wangdongmin@cjlu.edu.cn