

羊毛/羊绒的定性定量分析模型研究

刘军红,蔡宗群,李军法

(泉州出入境检验检疫局,福建泉州 362000)

摘要:采用近红外光谱技术并结合支持向量机,分别建立了羊毛、羊绒的定性和定量分析模型,利用这两种模型对未知样品进行了预测实验。结果表明,定性分析模型能够准确地鉴别出羊绒与羊毛纤维,定量分析模型具有较好的预测结果。

关键词:羊毛羊绒;预测模型;支持向量机;集成算法

中图分类号:TS101.9

文献标识码:A

文章编号:1673-0356(2015)05-0073-03

0 引言

在纺织服装领域羊毛与羊绒的成分鉴别及其含量检测一直都是研究的难点,其原因在于羊毛与羊绒同属于天然蛋白质纤维,两者的化学组成、组织结构和理化性质非常相近。而羊绒纤维具有光泽好、细度均匀、滑糯柔软、富有弹性等优良特性,是一种稀有的动物纤维,产量少、价格贵,素有“软黄金”的美称;羊毛尽管和羊绒具有相近的化学成分,但在组织结构上,尤其在纤维特性和经济价值上远不如羊绒^[1-3]。我国虽然是生产羊毛羊绒的大国,但是因为羊毛羊绒的国家标准还不够完善,使得我国的羊毛羊绒产品经常在国际贸易中陷于被动。因此如何准确鉴别羊毛与羊绒,以及如何准确确定纺织品中羊毛、羊绒的含量就显得极为重要。这既是保证产品质量,维护消费者权益,提高我国毛纺织品国际贸易地位的需要,也是摆在出入境检测机构面前的一大课题。

红外测试技术是1800年由物理学家W.Herschel发现红外辐射以后逐渐建立和发展起来的^[4],是一种依据某一物质成分对电磁波的吸收特性而进行的定性、定量的分析技术,是20世纪90年代以来发展最快、最引人注目的光谱分析技术。化学计量学可视为数学、统计学、计算机科学与化学化工的“接口”,支持向量机(Support Vector Machine, SVM)是20世纪90年代Vapnik基于统计学习理论提出的一种新的机器学习方法^[5-7]。它以统计学习理论为基础,采用结构风险最小化准则和VC维理论,根据有限数据信息在

模型的复杂度和学习能力之间寻找最佳折衷,从而获得最好的推广能力;能较好地解决小样本、非线性、高维数和局部极小点等实际问题^[8-10]。

本研究将基于支持向量的集成算法与近红外光谱结合,以研究羊毛、羊绒的定性和定量分析。通过选取不同的羊毛、羊绒标准样品,测量其红外光谱图,经数据预处理后使用基于支持向量机的集成算法建立分析模型,对羊毛、羊绒进行定性分析。选取不同含量的羊毛、羊绒标准混合样品,通过测量其红外光谱图,经数据预处理后使用基于支持向量机的集成算法建立分析模型,对羊毛、羊绒进行定量分析。该方法与目前常用的羊毛、羊绒测定方法相比,具有无需化学试剂、样品无需预处理、制样简单、检测速度快,准确性高等特点,可为开发一种可靠、高效、无损的羊毛羊绒检测手段奠定基础。

1 试验部分

1.1 材料和仪器

定性分析样品:不同产地的羊绒30份,羊毛纤维30份(内蒙古自治区鄂尔多斯,辽宁丹东,吉林白山,山东临沂,河北沧州等产地)。定量分析样品:将收集到的羊绒与羊毛纤维按质量分数称重,羊绒质量分数从0%到100%,间隔2%,共51份样品,每份样品均重0.4g,精确到0.0001g。

仪器设备:Antaris II近红外光谱仪(美国赛默飞世尔公司);积分球检测器。

1.2 实验方法

将样品置于样品池中,采用反射模式采集样品光谱。光谱采集条件为波数范围12 000~4 000 cm^{-1} ,对每份样品进行32次扫描,所有样品均重复采集4次光谱。由于羊绒与羊毛的物质组成和化学结构几乎相

收稿日期:2015-06-26;修回日期:2015-09-16

基金项目:福建出入境检验检疫局青年人才基金(FK2011-64)

作者简介:刘军红(1980-),女,工程师,研究生,主要从事纺织品检测, E-mail:liujunhong626@163.com。

同,其内部的化学基团对近红外光的吸光度相近,在同一谱图上表现为谱形相似,吸收峰值一致,而且近红外光谱区域的峰较宽,峰与峰常常重叠;因此直接通过谱图很难鉴别羊绒与羊毛,需要对原始光谱进行合理的处理,减弱甚至消除各种非目标因素对光谱信息的影响,为稳定、可靠的校正模型的建立奠定基础。对光谱求导可以消除基线平移,强化谱带特征,克服谱带重叠,是常用的光谱预处理方法。本研究采用对原始谱图求取二阶导数的方法,以去除与波长线性相关的漂移,强化光谱信号。

2 结果与讨论

2.1 定性分析模型

在使用支持向量机进行分类时,对训练结果影响最大的参数组是 (C, σ) ,过大或过小都会使误差增大。 C 是惩罚因子,它控制对错分样本的惩罚程度, C 越大表示对错误的惩罚越大, σ 是核函数的宽度。最初将 C 和 σ 分别在 $C = 2^{-1}, 2^0, 2^1, 2^2, 2^3, \dots, 2^{10}$, $\sigma = 2^{-1}, 2^0, 2^1, 2^2, 2^3, \dots, 2^{10}$ 之间调整,对所有 (C, σ) 组,支持向量机使用训练集训练之后,都要经预测集预测一下精度。经过这样一个循环,就可得到最佳的参数区间组 (C_1, σ) ;然后在 (C_1, σ) 附近调整 (C, σ) ,再寻找最佳的参数区间组 (C_2, σ) ;然后在 (C_2, σ) 附近调整 (C, σ) ,经过这样几个循环可得到 C 和 σ 的最佳值。随机选取24个羊毛和24个羊绒样品作为训练集,其余的样品作为预测集,对羊毛羊绒进行分类,在支持向量机的目标输出中,“1”表示羊毛,“-1”表示羊绒。经过调试, C 为10, σ 为2时,预测效果最好。预测结果如表1所示,预测结果全部正确。

表1 定性模型预测结果

序号	样品属性	鉴定结果	预测结果
1	羊毛	羊毛	正确
2	羊毛	羊毛	正确
3	羊毛	羊毛	正确
4	羊毛	羊毛	正确
5	羊毛	羊毛	正确
6	羊毛	羊毛	正确
7	羊绒	羊绒	正确
8	羊绒	羊绒	正确
9	羊绒	羊绒	正确
10	羊绒	羊绒	正确
11	羊绒	羊绒	正确
12	羊绒	羊绒	正确

2.2 定量分析模型

在使用支持向量机回归时,对训练结果影响很大

的参数组是 (σ, C) ,过大或者过小都会使误差增大。 ϵ 是不敏感损失函数,太小易产生过拟合现象,太大易产生欠拟合。 C 是惩罚因子,它控制对错分样本的惩罚程度, C 越大表示对错误的惩罚越大, σ 是核函数的宽度。根据经验将 σ, C 分别在0.1—512之间调整,以寻找最佳的参数组 (σ, C) ,使得回归有最好的预测能力。选用41个混合样品为训练集,其余10个样品为预测集,经过调试 ϵ 为0.01, C 为274, σ 为3时其预测效果最好。预测结果如表2所示。

表2 定量模型预测结果

序号	羊毛实际含量 /%	羊绒实际含量 /%	差值 /%
1	96	97.24	1.24
2	86	84.57	-1.43
3	76	77.03	1.03
4	66	68.26	2.26
5	56	56.14	0.14
6	46	45.19	-0.81
7	36	37.98	1.98
8	26	26.42	0.42
9	16	14.55	-1.45
10	6	2.08	-3.92

由表2可见,对大部分样品预测模型具有较好的预测结果,对个别样品的预测值和真实值的结果偏差较大,这可能与样品的混匀程度有关。

3 结论

以不同产地的羊绒与羊毛纤维为研究对象,采用近红外光谱技术并结合支持向量机所建立的羊毛、羊绒定性和定量分析模型,被用于对未知样品进行预测。可得出的结论是,定性分析模型能够准确地鉴别出羊绒与羊毛纤维,定量分析模型具有较好的预测结果;验证了近红外光谱技术用于羊绒、羊毛定性及定量分析的可行性,为开发一种可靠、高效、无损的羊绒、羊毛检测手段奠定了基础。

本研究中建立的数学模型还具有一定的局限性,如果要将近红外光谱技术真正应用到实际检测工作中,还需要进一步考虑的方面是:收集更多不同产地、不同种类的羊绒和羊毛样品,不断充实数据库,完善定性分析模型;增加羊绒和羊毛混合比数量,扩充定量分析模型的样品量;设计更为有效的混纺工具,尽量减少因纤维混合不均匀对模型预测产生的影响,尽可能减少实验误差。

参考文献:

[1] 李维红,席 斌,郭天芬,等.绵羊毛与山羊绒的鉴别[J].湖

- 北农业科学, 2011, 50(3): 544—545.
- [2] 彭伟良, 蒋耀兴, 袁长泰. 山羊绒和细绵羊毛纤维的形态特征分析[J]. 上海纺织科技, 2005, 33(11): 11—12.
- [3] 王柏华, 胡志宇, 葛顺顺, 等. 基于光镜条件下绵羊毛与山羊绒的鉴别[J]. 毛纺科技, 2011, 39(4): 42—45.
- [4] 王学琳, 孙淑萍, 铁梅. 傅立叶变换近红外光谱进展[J]. 现代仪器, 1999, (6): 1—3, 7.
- [5] Luinge H J, Van der Maas J H, Visser T. Partial least squares regression as a multivariate tool for the interpretation of infrared spectra[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1995, 28(1): 129—138.
- [6] Belousov A I, Verzakov S A, Von Frese J. A flexible classification approach with optimal generalisation performance: support vector machines[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2002, 64(1): 15—25.
- [7] Vapnik V N. 统计学习理论[M]. 许建华, 张学工, 译. 北京: 电子工业出版社, 2004.
- [8] Li S T, Kwok J T, Zhu H L, *et al*. Texture classification using the support vector machines[J]. *Pattern Recognition*, 2003, 36(12): 2 883—2 893.
- [9] 陈念贻, 陆文聪, 武海顺, 等. 支持向量机算法在氮化铝薄膜生长过程控制中的应用[J]. *计算机与应用化学*, 2002, 19(6): 726—728.
- [10] Burbidge R, Trotter M, Buxton B, *et al*. Drug design by machine learning: support vector machines for pharmaceutical data analysis [J]. *Computers and Chemistry*, 2001, 26(1): 5—14.

Study of the Qualitative and Quantitative Analysis Model of Wool/Cashmere

LIU Jun-hong, CAI Zong-qun, LI Jun-fa

(Quanzhou Exit-entry Inspection and Quarantine, Quanzhou 362000, China)

Abstract: The qualitative and quantitative analysis model of wool and cashmere based on support vector machine and infrared spectra technology was studied. The unknown samples were predicted using the models. The results indicated that the qualitative analysis model could accurately identify wool and cashmere, and the quantitative analysis model had good predictive effects.

Key words: wool/cashmere; prediction model; support vector machine; integrated algorithm

2016年《棉纺织技术》征订启事

《棉纺织技术》是由中国纺织信息中心和陕西省纺织科学研究所主办, 全国棉纺织科技信息中心、《棉纺织技术》期刊社编辑出版, 国内外公开发行的专业技术月刊。以从事棉纺织生产技术各个层面的技术人员为主要对象, 兼顾科研、教学需要, 坚持理论与实践相结合、技术与经济相结合、普及与提高相结合、当前与长远相结合、国内与国外相结合为办刊方针, 形成了“前瞻性, 适用性, 操作性”的独特风格, 在纺织行业 and 教学、科研单位拥有最广泛的读者群。多次获得省、部、委的奖励, 连年被国内三大科技信息源选列为“全国中文核心期刊”、“中国科技核心期刊”, 已连续四次被选列为“RCCSE 中国权威学术期刊”。2001 年以来成为“中国期刊方阵双效期刊”, 荣获“第三届国家期刊奖提名奖”。自 1973 年创刊以来, 发行量一直居全国纺织工业系统科技期刊之首。

《棉纺织技术》已被《中国学术期刊(光盘版)》、《中国学术期刊网》、《万方数据资源系统数字化期刊群》、《中国学术期刊文摘(中文版)》、《中国学术期刊文摘(英文版)》、《中国期刊全文数据库》、《中国核心期刊(遴选)数据库》、《中文科技期刊数据库》等收录。近年来, 又成为国际知名检索系统美国《化学文摘》、英国《科学文摘》、俄罗斯《文摘杂志》等的收录期刊。

2014 年起《棉纺织技术》编辑部正式开通稿件在线采编

系统(<http://gaojian.ctsti.cn>), 欢迎投稿!

2015 年起《棉纺织技术》正式启用“棉纺织技术”(微信号为 sf-mfzjs)微信公众平台, 关注后可查询稿件进程、浏览近期目次和摘要等, 欢迎关注!

2016 年《棉纺织技术》期刊全彩色印刷, 由邮局向全国发行, 邮发代号 52—43, 请广大读者到当地邮局订阅, 亦可向编辑部直接办理订阅手续。每册 10 元, 全年 120 元。

电话: (029) 83553540 83553538

传真: (029) 83553519

官方微信号: sf-mfzjs, mfzjsxcm

E-mail: sf-mfzjs@ctsti.cn

邮局付款

单位: 《棉纺织技术》编辑部

地址: 西安市纺织城西街 138 号

邮编: 710038

银行付款

开户行: 农行西安市纺一路支行

户名: 陕西棉纺织技术期刊社

帐号: 120101040001043