

可见-近红外光谱用于鉴别山羊绒与细支绵羊毛的研究

吴桂芳^{1,2}, 朱登胜³, 何勇^{1*}

1. 浙江大学生物工程与食品科学学院, 浙江 杭州 310029
2. 内蒙古农业大学机电工程学院, 内蒙古 呼和浩特 010018
3. 金华职业技术学院, 浙江 金华 321017

摘要 近红外光谱作为快速、无损的检测技术,近年来在国内外越来越受到广泛关注。针对山羊绒与细支绵羊毛的可见/近红外光谱的特点,提出了应用主成分分析(PCA)结合人工神经网络(ANN)进行山羊绒与细支绵羊毛的鉴别,并建立了羊毛、羊绒分析模型。应用可见/近红外反射光谱获取山羊绒与细支绵羊毛的光谱曲线,利用主成分分析对原始光谱数据进行处理,根据主成分的累计贡献率99.8%选取主成分数6,并将所选取的6个主成分作为三层BP神经网络的输入。通过定标集样本对BP神经网络进行训练,用优化的BP神经网络模型对预测集样本进行预测。实验结果表明,16个未知样本的鉴别全部正确,表明可见/近红外光谱结合主成分分析和神经网络技术对山羊绒与细支绵羊毛进行快速鉴别是可行的。

关键词 可见-近红外光谱;山羊绒;细支绵羊毛;主成分分析;BP神经网络

中图分类号: TS102 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-0593(2008)06-1260-04

引言

山羊绒是一种珍贵的动物纤维,有着“软黄金”和“纤维钻石”的美称。企业常常生产山羊绒与不同比例细支绵羊毛的混纺产品。所谓的细支绵羊毛,即人们通常所说的“绵羊绒”,是绵羊毛中较细的无髓毛,主要来源于某些品种的绵羊,这类细支绵羊毛尽管表面形态上与山羊绒有些相似而且越细的绵羊毛形态结构越接近山羊绒,但其在组织结构上、尤其在纤维特性和经济价值上远不如山羊绒^[1-3]。由于山羊绒的特殊性,直到目前,山羊绒的国家标准还不够完善。我国虽然是产绒大国,但我国山羊绒产品经常在国际贸易中陷于被动。为维护消费者权益,保证羊绒产品质量,提高我国羊绒市场在国际贸易中的地位,快速、有效、正确地鉴别山羊绒纤维就显得极为重要^[4,5]。

可见/近红外光谱法是一种快速简便、非破坏性的分析方法。可充分利用全谱或多波长下的光谱数据进行定性或定量分析。由于近红外光谱技术分析具有速度快、效率高、成本低、测试重现性好、方便等特点,已经被越来越多地应用于农产品品质分析^[6-9]、食品品质检测^[10-13]、烟草行业^[14]、石油化工以及药品检测等领域^[15,16]。光谱技术在各个方面尤其是在食品科学和农业科学上已成为一种重要的检测技术。

主成分分析是多元统计中的一种数据挖掘技术。其目的是将数据降维,在不丢失主要光谱信息的前提下选择为数较少的新变量来代替原来较多的变量,以排除众多化学信息共存中相互重叠的信息。BP神经网络是一种基于误差反向传播算法的神经网络,是一个强有力的学习系统,具有高度非线性映射的能力^[17]。由于它可以逼近任何连续的非线性曲线,现已在各领域得到了广泛的应用,取得了令人满意的结果。

本研究的目的是应用可见/近红外光谱技术实现对山羊绒与绵羊毛的快速鉴别。

1 山羊绒与绵羊毛鉴别方法、标准及技术状况

山羊绒与绵羊毛鉴别方法主要有光学投影显微镜法(OM法)、SEM法、伸展液定量分析法、CAT法、电泳法、DNA分析法、比重法及氨基酸分析法等,但采用这些方法鉴别山羊绒与绵羊毛步骤繁琐,检测成本较高,不利于推广使用。

山羊绒与绵羊毛纤维含量的监测标准主要由AA TCC于

收稿日期: 2007-01-08, 修订日期: 2007-04-12

基金项目: 国家“十一五”科技支撑项目(2006BAD10A09), 国家自然科学基金项目(30671213)和高等学校优秀青年教师教学科研奖励计划项目(02411)资助

作者简介: 吴桂芳, 女, 1972年生, 内蒙古农业大学机电工程学院讲师

*通讯联系人 e-mail: yhe@zju.edu.cn

2004 年发布的 AATCC TM20A—2004《纤维定量分析标准》，ASTM 于 2005 年发布的 ASTM D2816—2005《开士米毛线中粗毛节含量的测量方法》和 ASTM D2817—2005《开士米毛线中最粗大毛节含量的测定》。AATCC 还开发出包括 5 g 纯山羊绒和 5 g 纯绵羊毛纤维的标准对照样。但均无助于山羊绒与绵羊毛纤维的鉴别。

我们采用可见/近红外光谱漫反射方法对山羊绒和细支绵羊毛进行光谱数据的采集，选用主成分分析(PCA)和基于误差反向传播算法(back propagation, BP)多层前馈神经网络建立山羊绒和细支绵羊毛的近红外光谱鉴别模型。通过 PCA 得到主成分的累计贡献率和各个主成分的得分，将选出的主要主成分得分作为多层前馈神经网络的输入，对未知的山羊绒和细支绵羊毛样本的预测作为输出，建立 BP 神经网络模型^[18, 19]。

2 材料与方法

2.1 仪器设备

美国 ASD (analytical spectral device) 公司的 Handheld FieldSpec 光谱仪，其测定范围在 325 ~ 1 075 nm 之间，分辨率 3.5 nm，探头视场角 20°，光谱仪垂直放置于距离样本表面 12 cm 处，光源与水平位置成 60° 照射。分析软件为 ASD View Spec Pro, Unscrambler V9.6 和 DPS V8.01 (Data procession system for practical statistics)。

2.2 样品来源及光谱的获取

山羊绒采用内蒙古自治区的阿盟、锡盟等主要产绒地区随机采取山羊绒样 38 份，并从锡盟、乌盟、赤峰等地采取当地土种蒙古绵羊和小尾寒羊的绵羊毛样各 38 份，将羊毛或羊绒样品放在样品架上，采用反射模式采集 NIR 光谱图，光谱扫描稳定后进行光谱数据的采集，扫描次数设为 30。扫描所得原始图谱如图 1 所示。

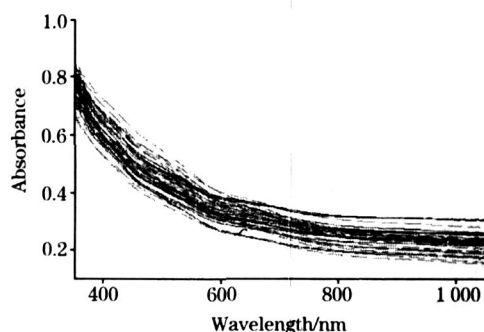


Fig 1 Vis/ NIR absorbance spectra of sheep wool and cashmere
—: cashmere;: sheep wool

2.3 光谱数据的预处理

为了去除来自高频随机噪音、基线漂移、样本不均匀、光散射等影响，需要进行光谱预处理来消除。采用 Savitzky-Golay 平滑法，平滑点数为 3，再进行 (standard normal variate, SNV) 处理，所有的预处理过程在 Unscrambler V9.6 软

件中进行^[20]。

2.4 山羊绒与细支绵羊毛 PCA

为消除光谱曲线的首端和末段噪声的影响，选取 350 ~ 1 050 nm 波段的光谱进行研究。实验采用主成分分析法对山羊绒与细支绵羊毛光谱数据进行分析。图 2 中 X 轴表示样本的第一主成分得分 (PC1)，Y 轴表示样本第二主成分得分 (PC2)。图 2 显示了山羊绒与细支绵羊毛分类效果，定性的描述了山羊绒与细支绵羊毛的特征差异，但是边缘样品区分不明显。为提高预测精度，我们用 BP 神经网络结合 PCA 建立山羊绒与细支绵羊毛的检测分析模型。

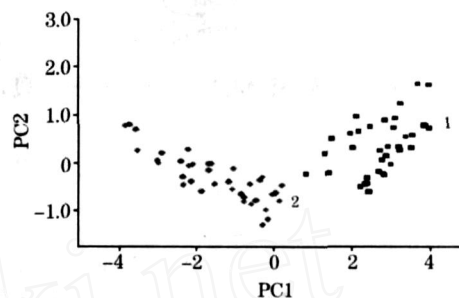


Fig 2 Principal component scores scatter plot (PC1 × PC2) of fine wool and cashmere
1: Cashmere; 2: Sheep wool

3 试验结果与分析

3.1 主成分分析结果

经主成分分析光谱数据后得到前 10 个主成分累计贡献率如表 1 所示，前 6 个主成分的累计贡献率已经达到了 99.8%。

Table 1 Reliabilities of principal components

主成分	累计可信度/ %	主成分	累计可信度/ %
PC1	79.543	PC6	99.828
PC2	97.467	PC7	99.879
PC3	99.460	PC8	99.918
PC4	99.603	PC9	99.933
PC5	99.741	PC10	99.942

Table 2 Prediction result for 16 unknown samples by BP-ANN model

样本序号	实际值	预测值	样本序号	实际值	预测值
1	1	1.013	9	2	1.999
2	1	1.000	10	2	2.000
3	1	1.011	11	2	2.000
4	1	1.002	12	2	2.000
5	1	1.000	13	2	2.000
6	1	1.000	14	2	1.999
7	1	1.000	15	2	1.999
8	1	1.000	16	2	1.998

Notes: 1: Sheep wool; 2: Cashmere

3.2 基于神经网络的山羊绒与绵羊毛的鉴别

将 6 个主成分的得分输入神经网络,通过反复训练得到三层最佳网络结构:6 个输入层节点,8 个隐含层节点和 1 个输出层节点,目标误差设定为 0.000 1,限定最大迭代次数为 1 000。表 2 为预测结果,拟合误差为 9.92×10^{-5} ,设定品牌预测结果偏差在 ± 0.1 内为预测正确。采用山羊绒和细支绵羊毛各 30 个样本用来建模,余下的 16 个样本作为未知样本,利用已建立的主成分分析结合神经网络模型对 16 个未知样本进行预测,预测结果全部正确。

来一直受到广泛的关注。山羊绒与绵羊毛在直径、表面鳞片高、表面鳞片厚、鳞片倾斜角以及鳞片边缘形态等方面都有区别,国内外众多的科研人员在鉴别山羊绒与绵羊毛这个研究领域里做了大量的理论研究和实验验证,但误判概率一直未能达到理想的地步。本文应用可见/近红外光谱方法并结合主成分分析和人工神经网络,建立了山羊绒与绵羊毛的鉴别模型。该模型的预测效果较好,说明应用该模型可以提高对山羊绒与绵羊毛鉴别的速度和准确率,为开发简单、低成本、高精度的仪器奠定了基础。

4 结 论

近红外光谱技术作为一种快速、无损的分析手段,近年

参 考 文 献

- [1] PENG Wei-liang, JIANG Yao-xing(彭伟良,蒋耀兴). Research and Exploration in Laboratory(实验室研究与探索), 2005 24(4): 28.
- [2] DENG Li-li, JIANG Feng-qin(邓丽丽,姜风琴). Journal of Dalian Institute of Light Industry(大连轻工业学院学报), 2003, 22(3): 203.
- [3] LIU Qi-guo, HOU Xi-liang(刘启国,侯秀良). Journal of Nantong Institute of Technology(南通工学院学报), 1999, 15(4): 25.
- [4] PENG Wei-liang, JIANG Yao-xing, YUAN Chang-tai(彭伟良,蒋耀兴,袁长泰). Shanghai Textile Science & Technology(上海纺织科技), 2005, 33(11): 11.
- [5] QIN Shi-zhong(秦士忠). Inspection and Quarantine(检验检疫科学), 2005, 15(6): 58.
- [6] Alan M L, Moon S K, Chen Y R, et al. Computers and Electronics in Agriculture, 2006, 54(1): 22.
- [7] Baye T M, Pearson T C, Settles A M. Journal of Cereal Science, 2006, 43(2): 236.
- [8] WANG Duo-jia, ZHONG Jiao-e, HU Xiang-na, et al(王多加,钟娇娥,胡祥娜,等). Chinese Journal of Analytical Chemistry(分析化学), 2003, 31(7): 892.
- [9] WANG Duo-jia, ZHOU Xiang-yang, JIN Tong-ming, et al(王多加,周向阳,金同铭,等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2004, 24(4): 447.
- [10] Andersen C M, World J P, Mortensen G. International Dairy Journal, 2006, 16: 1483.
- [11] Lachenmeier D W. Food Chemistry, 2007 101: 825.
- [12] Carlomagno G, Capozzo L, Attolico G Distant. Infrared Physics & Technology, 2004, 46: 23.
- [13] Sereg Z, Farkas J, Tuboly E, et al. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2006, 82(1): 115.
- [14] CHEN Da, WANG Fang, SHAO Xue-guang, et al(陈达,王芳,邵学广,等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2004, 24(6): 672.
- [15] CHU Xiao-li, YUAN Hong-fu, LU Wan-zhen(褚小立,袁洪福,陆婉珍). Analytical Instrumentation(分析仪器), 2006, (2): 1.
- [16] TIAN Li-rong, TANG Zhen, LIU Fu-qiang, et al(田丽容,汤真,刘富强,等). Analytical Laboratory(分析实验室), 2001, 20(1): 79.
- [17] HE Yong, LI Xiao-li, SHAO Yong-ni(何勇,李晓丽,邵咏妮). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2006, 26(5): 850.
- [18] JI Hai-yan, YAN Yan-lu(吉海彦,严衍禄). Journal of Instrumental Analysis(分析测试学报), 1999, 18(3): 12.
- [19] HE Yong, LI Xiao-li(何勇,李晓丽). Journal of Infrared and Millimeter Waves(红外与毫米学报), 2006, 25(3): 192.
- [20] CHU Xiao-li, YUAN Hong-fu, LU Wan-zhen(褚小立,袁洪福,陆婉珍). Progress in Chemistry(化学进展), 2004, 16(4): 528.

Identification of Fine Wool and Cashmere by Using Vis/ NIR Spectroscopy Technology

WU Gui-fang^{1,2}, ZHU Deng-sheng³, HE Yong^{1*}

1. College of Biosystems Engineering and Food Science, Zhejiang University, Hangzhou 310029, China

2. College of Mechanical and Electrical Engineering, Inner Mongolia Agriculture University, Huhhot 010018, China

3. Jinhua College of Profession and Technology, Jinhua 321017, China

Abstract As a rapid and non-destructive methodology, near infrared spectroscopy technique has been attracting much attention recently. The present study applied Vis/ NIR spectra to the identification of cashmere and fine wool fiber. Cashmere and fine wool are resemble in superficies, but they differs in diameter, height, thickness, angle of inclination, and marginal morphology of surface scale. Although researchers both at home and abroad did a lot researches and experiments to distinguish fine wool from cashmere, the resolution of cashmere and fine wool is still not satisfactory, and it is always a challenging task to differentiate and recognize fine wool and cashmere. This paper presents an automatic recognition scheme for the fine wool fiber and cashmere fiber by Vis/ NIR spectroscopy technique, aiming at the characteristics of Vis/ NIR spectra of cashmere and fine wool. One mixed algorithm was presented to discriminate cashmere and fine wool with principal component analysis (PCA) and artificial neural network (ANN). Preliminary qualitative analysis model has been built: Vis/ NIRS spectroscopy diffuse techniques were used to collect the spectral data of cashmere and fine wool, and two kinds of data pretreatment methods were applied: the standard normal variate (SNV) was used for scatter correction. Savitzky-Golay with the segment size 3 was used as the smoothing way to decrease the noise processed. Following the pretreatment, spectral data were processed using principal component analysis, 6 principal components (PCs) were selected based on the reliabilities of PCs of 99.8%, and the scores of these 6 PCs would be taken as the input of the three-layer back-propagation (BP) artificial neural network (BP-ANN). The BP-ANN was trained with samples in calibration collection and predicted the samples in prediction collection were predicted. Experiments demonstrate that the system works quickly and effectively, and has remarkable advantages in comparison with the previous systems. The result indicated that a model had been built to discriminate cashmere from fine wool using Vis/ NIR spectra method combined with PCA-BP technology.

Keywords Vis/ NIR spectroscopy; Cashmere; Fine wool; Principal component analysis(PCA); BP neural networks

(Received Jan. 8, 2007; accepted Apr. 12, 2007)

* Corresponding author