

纺织混纺面料里纤维含量的红外光谱法测定

颜 丽, 刘 莉

(武汉科技学院电信学院, 湖北 武汉 430073)

摘 要:利用傅里叶红外光谱仪对棉涤混纺面料进行了衰减全反射实验,采用多元逐步回归法选取了特征波数 $1000 \sim 1400 \text{ cm}^{-1}$ 来做回归分析,对光谱数据采用中心化和一阶导的预处理方法,建立数学模型,其检测精度达到了较高水平,表明用红外全反射光谱对混纺面料纤维含量的无损测定是行之有效的。

关键词:红外全反射;特征波数;纺织纤维;多元线性逐步回归法

中图分类号:O657.33;TS106

文献标识码:A

Test on fibre content of textile mixture materials with IR method

YAN Li, LIU Li

(Wuhan University of Science and Engineering, Wuhan 430073, China)

Abstract: In the article, we do attenuation whole reflection to cotton and terylene mixed textile materials by use of FT-IR, adopt stepwisemultiple linear regression to choose characteristic wavenumber $1000 \sim 1400 \text{ cm}^{-1}$, spectrum datas are disposed by center change and differential coefficient methods in advance. Math modle is built, the test precision has very high level. So it is effective to test cotton and terylene mixed textile materials by attenuation whole reflection.

Key words: infrared whole reflection; characteristic wavenumber; textile fiber; stepwisemultiple linear regression

1 引 言

纺织面料的含量分析已有多种方法,通常采用溶解称重法。溶解称重法是测定纤维含量最为直接的方法^[1],但该方法操作繁琐、费时费力,且在操作中要配置一系列的溶剂来溶解纤维,常常会产生大量有害气体而污染工作环境,影响操作人员健康。尽管出现了红外干燥法^[2]为信息快速采集手段的纤维测定方法。但应用于面料检测时,与传统烘箱法相比,只是缩短了烘干的时间,其实还是要采用溶剂来溶解纤维,仍需要进行较繁锁的溶解处理,来测定纤维的含量。

面料的红外光谱检测是利用不同的面料成分体现出不同的红外光谱吸收峰,不同的含量体现出不同的吸收峰大小,通过化学计量法和面料数据库可获得准确的面料化学成分及含量。近年来,红外技术在仪器、软件和应用领域上获得了高度发展,以其高效和快速的特点,能够显著提高分析工作效率而

倍受人们的关注。在事先建立好校正模型的基础上,红外光谱仪仅需几分钟即可完成一个样品的全性质的测量^[3-4]。

2 实验方法

2.1 实验仪器

实验中使用 FTIR - BRUKER Tensor27 型红外光谱仪(德国)。扫描范围是 $400 \sim 4000 \text{ cm}^{-1}$,测试温度为 $20 \text{ }^{\circ}\text{C}$ 。

2.2 实验样品

涤棉,粘棉;涤麻,粘麻,毛麻;毛涤,毛腈,毛锦,毛粘;粘胶丝,涤纶长丝,锦纶丝等面料样品,试验以一系列不同含量比的棉涤样品为代表样品。

2.3 实验过程与数据处理

在相同的条件下,分别对纤维含量不同的棉涤

混纺面料样品,进行全反射光谱扫描,记录其光谱数据。对光谱数据,采用中心化和一阶导的预处理方法^[5],使用多元逐步回归法来建模^[6]。为了建立数学模型,需要对大量的光谱数据进行提取,采用逐步回归算法选取所需要的波长^[7]。

3 实验结果与讨论

3.1 棉涤混纺面料中棉纤维含量红外光谱建模

为了确定棉纤维的光谱,将充分粉碎均匀的样品置于 10 mm 厚度的样品池内,利用红外光谱仪器对各个棉涤混纺样品进行光谱扫描^[8]。用于预测建立模型的样品 25 个,是由软件挑选出的代表性样品,软件采用文献^[9]中二维主成分网格选择算法来挑选代表性样品;其余 6 个作为检验样品。分析谱区为 1000 ~ 1400 cm⁻¹。

经过多元逐步回归^[10-11],结果如图 1、表 1 所示。

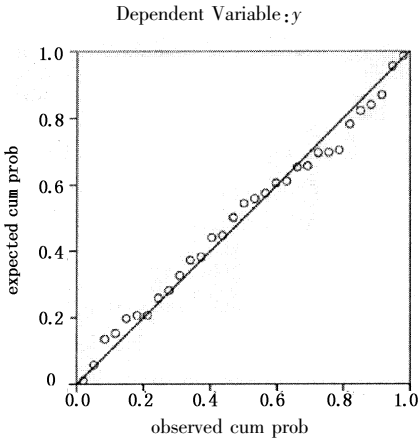


图1 正态概率(P-P)图

由图中可看出散点大多数落在接近直线的点,说明自变量和因变量的相关度极高。

表 1 回归系数

Coefficients ^a					
Unstandardized Coefficients			Standardized Coefficients		
Model	B	Std. Error	Beta	t	Sig.
1 Constant	1.900	101.998		-1.977	0.059
x_1	-25.810	0.813	0.821	4.448	0.000
x_2	76.120	7.340	-0.730	-2.946	0.007
x_3	-43.250	4.228	1.668	6.589	0.000
x_4	-8.660	2.777	-1.277	-6.212	0.000

a. Dependent Variable: y

经过多元逐步回归,最后选取了四个回归波段,分别为 1050 cm⁻¹, 1340 cm⁻¹, 1370 cm⁻¹, 1434 cm⁻¹,这四个波段都通过了显著性检验,线性回归方程即为:

$$y = 1.9 - 25.81x_1 + 76.12x_2 - 43.25x_3 - 8.66x_4$$

3.2 棉涤混纺面料中棉纤维含量校正检验及预测
根据以上的多元逐步回归分析,对模型予以校正和预测,结果如表 2 所示。

表 2 棉校正结果

编号	化学值/%	预测值/%	绝对误差/%
0001	78.4	79.7	1.3
0002	55.1	53.5	-1.6
0003	77.6	77.1	-0.5
0004	20	21.5	1.5
0005	17.2	16.1	-1.1
0006	85.0	80.5	-4.5
0010	30	29.8	-0.2
0011	63.1	65	1.9
0012	40	40.6	0.6
0013	70.5	68.3	-2.2
0014	90	90.5	0.5
0015	23.1	21.8	-1.3
0016	45.8	46.2	0.4
0017	58.7	59	0.3
0018	22.4	23.4	1
0019	82.8	81.1	-1.7
0020	70.5	75.1	4.6
0021	55	55.3	0.3
0025	60	56.6	-3.4
0026	29.5	31.3	1.8
0027	82.2	83.8	1.6
0028	15	13.4	-1.6
0029	21.6	23.6	2
0030	45.6	46.2	0.6
0031	73.3	74.8	1.5

对误差比较大的几号样品 6,20,25 予以剔除,这三个样品可能由于纯度不高或机器上污染的存在造成绝对误差比较大,对误差较小的其余棉涤混纺样品重新回归,校正模型。并用抽取的六个样品进行检验和预测,如表 3 所示。

表 3 棉检验与预测结果

编号	化学值/%	预测值/%	绝对误差/%	相对误差/%
0007	19	18.7	-0.3	1.3
0008	19	18.8	-0.2	0.8
0009	19	18.8	-0.2	0.9
0022	24	24.2	0.2	1.2
0023	24	24.5	0.5	2.3
0024	24	23.8	-0.2	0.5

模型建立采用多元线性逐步回归法,实验数据

可靠,实验结果满足要求。说明本研究选择用红外光谱全反射分析方法,可以达到测定纺织面料里纤维含量的要求。

4 结 论

在红外 $1000 \sim 1400 \text{ cm}^{-1}$ 范围获得纺织面料的红外光谱,应用多元线性逐步回归法对相同组分纺织面料样品中的棉纤维含量进行建模,并给出校正和检验结果。研究表明,应用红外光谱对纺织面料进行棉纤维的检测是可行的。采用逐步回归方法挑选出几个最佳有效波数组合用于棉纤维含量的检测,为红外光谱法测定纤维含量奠定基础^[12]。此方法同样适合于其他混纺面料样品里纤维含量的测定,准确度比较高,具有广泛的应用价值。

参考文献:

- [1] 冯年红,甘彬,金尚忠. 棉涤混合纺织面料含量的近红外光谱检测[J]. 激光与红外,2005,35(10):768-770.
- [2] 石红,汪蓉,等. 应用红外干燥法快速测定纺织产品纤维含量的研究[J]. 纺织学报,1998,(3):5.

- [3] 王文真. 红外光谱定量分析[J]. 现代科学仪器,1996,(1):24-25.
- [4] 陆婉珍,袁永福,等. 现代近红外光谱分析技术[M]. 北京:中国石化出版社,2001:73-79.
- [5] 严衍禄,赵龙莲,等. 现代近红外光谱分析的信息处理技术[J]. 光谱学与光谱分析,2000,20(6):777-780.
- [6] 梁逸曾,俞汝勤. 化学计量学[M]. 北京:高等教育出版社,2003:264-265.
- [7] 裴鑫德. 多元统计分析及其应用[M]. 北京:北京农业大学出版社,1991:156-160.
- [8] R G J 密勒,B C 斯特斯. 红外光谱学的实验方法[M]. 北京:机械工业出版社,1998:300-302.
- [9] 严衍禄,赵龙莲,等. 近红外光谱分析基础与应用[M]. 北京:中国轻工业出版社,2005:132-133.
- [10] 谭荣波,梅晓仁. SPSS 统计分析实用教程[M]. 北京:科学出版社,2007:149-157.
- [11] 阮桂海,蔡建平,苏红. 数据统计与分析——SPSS 实用教程[M]. 北京:电子工业出版社,2000:176-180.
- [12] Da Chen, Xue-guang Shao, Bin Hu, et al. Simultaneous wavelength selection and outlier detection in multivariate regression of near-infrared spectra [J]. Analytical Sciences,2005,(9):21-22.