

基于近红外光谱分析技术的液态水性油墨印刷品颜色预测模型

doi:10.3969/j.issn.1674-7100.2022.06.007

彭楠¹ 黄新国^{1,2}
白永利¹ 张姗姗¹
钟云飞^{1,2} 瞿小阳²
谢小春²

1. 湖南工业大学

包装与材料工程学院

湖南 株洲 412007

2. 湖南福瑞印刷有限公司

湖南 长沙 410100

摘要: 针对印刷品颜色离线检测存在滞后、检测不精准等问题, 提出基于近红外光谱分析技术的液态水性油墨印刷品颜色预测模型。用多元散射校正(MSC)、标准正态变换(SNV)和卷积平滑滤波器(SG)对原始光谱数据进行预处理, 将原始光谱数据及预处理后的光谱数据分别与印刷品的Lab值建立偏最小二乘回归(PLSR)和主成分回归(PCR)两种预测模型。结果表明, 基于MSC预处理的PLSR预测模型的预测精度最高, L 、 a 、 b 值的 R^2 分别高达0.9885、0.9879和0.9938, 预测颜色的平均色差约为0.71。液态水性油墨的近红外光谱可以精确预测印刷品颜色, 为印刷品的在线检测提供了新思路。

关键词: 近红外光谱分析技术; 水性油墨; 颜色预测; 光谱预处理; 偏最小二乘回归; 主成分回归

中图分类号: O433.4

文献标志码: A

文章编号: 1674-7100(2022)06-0052-05

引文格式: 彭楠, 黄新国, 白永利, 等. 基于近红外光谱分析技术的液态水性油墨印刷品颜色预测模型[J]. 包装学报, 2022, 14(6): 52-56.

印刷品颜色是产品质量评定的重要指标, 进而提高印刷品质量的关键是印刷品颜色的准确预测。如何准确地预测印刷色彩成为印刷领域中的重要研究课题。目前, 印刷色彩预测模型大多是以Kubelka-Munk理论为基础, 利用粒子的光散射系数 S 和光吸收系数 K 描述光的反射或透射进行色彩预测^[1-2]。施国运等^[3]以Kubelka-Munk四能流理论为基础, 利用整体反射率与透射率建立色彩预测模型。该模型能够对双面印刷品进行准确色彩预测。葛惊寰等^[4]以光能的辐射传递理论为基础, 引入荧光激发函数, 建立了一种新的印刷品光谱反射预测模型。该模型预测精度高于经典Kubelka-Munk模型。这些预测模型都需要

经过大量的测量计算得到参数值, 只适合用于油墨配色, 无法用于印刷品色彩预测, 且所用数据都是通过离线检测得到, 无法及时反映生产过程中出现的问题。

目前, 印刷品颜色检测主要是通过印后产品的光谱分析得到。管力明等^[5]用印刷品的近红外光谱及其Lab值建立定量分析模型。该模型能够对印刷品 L 值进行准确检测。此类方法的缺陷是不能在印制前预测印刷品颜色, 检测结果存在滞后性。在线近红外光谱分析技术可以解决此问题。其具有实时在线测量、响应速度快、预测精度高、使用维护方便和维护成本低等优点^[6]。本文提出基于近红外光谱分析技术的液态水性油墨印刷品颜色预测模型。先对印刷前液态水

收稿日期: 2022-10-02

基金项目: 湖南省自然科学基金资助项目(2021JJ30218)

作者简介: 彭楠(1998-), 男, 四川广元人, 湖南工业大学硕士生, 主要研究方向为印刷色彩分析,

E-mail: pengnan9@qq.com

通信作者: 黄新国(1981-), 男, 湖南益阳人, 湖南工业大学讲师, 博士, 主要从事印刷质量控制与颜色测量技术研究,

E-mail: huangxinguo@qq.com

性油墨进行光谱检测,再用光谱检测结果预测印刷品色彩,以提高印刷质量,降低印刷次品率。

1 实验部分

1.1 材料和设备

液态水性油墨(WZ01系列)、红调色剂(PR48系列),均购于珠海市乐通化工有限公司。

光纤光谱分析仪,USB6500-Pro型;卤素灯光源,JY-L2000型,波长范围为300~2500 nm,输入功率为100 W,均购于广州景颐光电科技有限公司。分光密度仪,exact系列,购于爱色丽(上海)色彩仪器商贸有限公司。

1.2 样品制备

1.2.1 水性油墨

将红调色剂的质量分数从2%至30%(按2%递增),分别添加至水性油墨中,再将油墨装入10 mm光程的比色皿中,室温25℃下静置2 h,待水性油墨稳定。共制得15组油墨样本用于后续近红外光谱检测。

1.2.2 印刷品

将液态水性油墨通过凹版打样机均匀印制于镀铝纸上。每次打样前清洁橡皮滚筒和凹版网纹辊压印,并保持滚轴位置一致。打样机参数如下:滚筒与印版滚筒之间的压力为0.4 MPa,印刷速度为30 r/min,印刷时间为2 s。

1.3 数据采集

1.3.1 光谱数据

用光纤光谱分析仪采集水性油墨样本的近红外光谱数据。数据采集前,将光纤光谱分析仪与卤素灯预热30 min,使用标准反射白板进行光谱校准。对同一目标连续采集10条光谱,取均值作为样本的原始光谱数据。光谱获取范围为131.7~1023.1 nm。因光谱两端存在部分噪声,故截取495~905 nm波段的光谱数据用于分析。

1.3.2 Lab数据

使用分光密度仪采集网格深度为30 μm的印刷品色块Lab值。为避免采样部位不同导致的误差,选择印刷品色块中心的3个点进行测量,取均值作为样品Lab值。

1.4 光谱预处理

近红外光谱属于弱信号。在测量过程中,仪器、样本状态和测量环境会给光谱带来较大噪声,若直接将测得的光谱用于模型中,模型的可靠性和

准确性则很难满足实际需求。因此,需对测得的光谱进行预处理,用以消除基线或者噪声干扰。常用的光谱预处理方法有光谱增强算法(标准化、均值中心化等)、多元散射校正(multiplicative scatter correction, MSC)、平滑算法、导数算法等^[7-9]。本文分别采用多元散射校正、标准正态变换(standard normal variate, SNV)和卷积平滑滤波器(savitzky-golay filter, SG)对液态水性油墨的原始近红外光谱进行预处理。卷积平滑滤波器采用二次多项式,窗口尺寸为13×13,步长为2。

1.5 模型建立与评价

常用的校正方法有:多元线性回归法(multiple linear regression, MLR)、主成分分析法(principal component analysis, PCA)、偏最小二乘回归(partial least square regression, PLSR)等。MLR要求波长数小于样本数,然而在实际光谱分析中,光谱的波长数一般远大于样本数,这会造成病态矩阵。所以本文分别采用偏最小二乘回归和主成分回归法(principal component regression, PCR)建立预测模型。偏最小二乘回归对测量参数进行分解的同时,对响应参数进行正交分解,并在2个参数间建立定量关系,利用测量值预测响应值^[10-11]。主成分回归法则是将数据降维,从数据中抽取少数的主成分进行分析。利用主成分与相应参数进行建模,能够简化计算^[12-13]。

决定系数(R^2)和均方根误差(root mean square error, RMSE)可以评价模型性能。决定系数反映预测值和实际值之间的相关程度。 R^2 越接近1,说明模型预测值和实际值之间的相关程度越好。均方根误差是数据集样品中预测值与实际值之间的偏差。RMSE值越小,说明模型对未知样本的预测能力越强^[14]。

2 结果与分析

2.1 样本校正集与测试集划分

构建光谱多元校正模型之前要进行样本校正集与测试集的划分。校正集用于构建光谱模型,测试集则用于验证模型的光谱预测性能。校正集数据需要有较好的代表性,其直接影响校正模型的准确性。得到的Lab值与其对应的光谱数据共15组,按照2:1的比例划分,校正集有10组数据,测试集有5组数据(见表1)。由表1可知,校正集样本的Lab值分布范围较宽,涵盖了测试集样本的Lab值,这有利于构建稳定可靠的预测模型。

表1 校正集和测试集中印刷样本 Lab 值划分
Table 1 Lab value division of printed samples in training set and test set

Lab 值	统计量	校正集	测试集
<i>L</i>	最大值	30.68	27.47
	最小值	20.75	20.88
	平均值	24.47	23.51
	标准差	3.43	2.62
<i>a</i>	最大值	30.74	29.51
	最小值	9.58	15.72
	平均值	21.95	24.39
	标准差	6.73	5.89
<i>b</i>	最大值	31.14	27.56
	最小值	19.72	19.92
	平均值	23.85	22.79
	标准差	3.99	3.16

2.2 光谱预处理

为了消除高频噪声、基线漂移、光散射等对光谱数据的影响,本文采用 MSC、SNV 和 SG 对原始光谱数据进行预处理。SG 主要消除光谱噪声,提高光谱信号信噪比;MSC 和 SNV 主要用来消除由于样本表面散射、样本颗粒大小及光程对光谱的影响。图 1 为采用不同光谱预处理后 495~905 nm 波段的近红外光谱图。

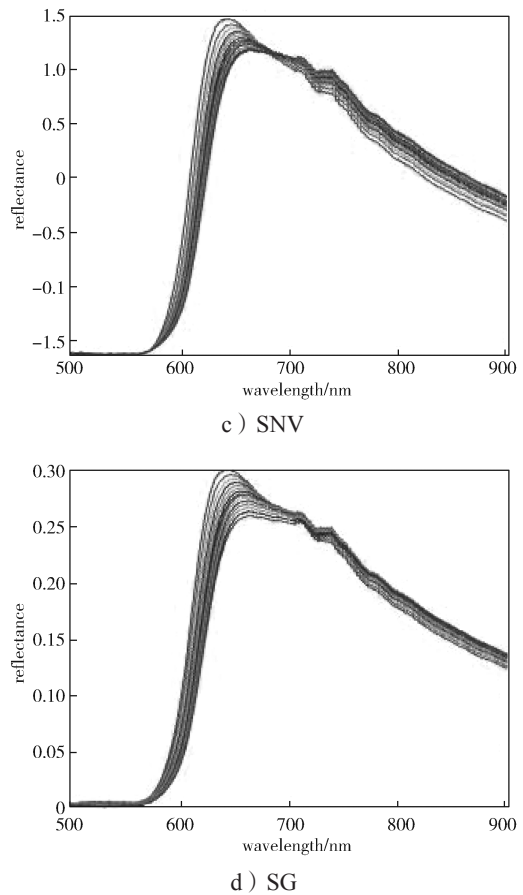
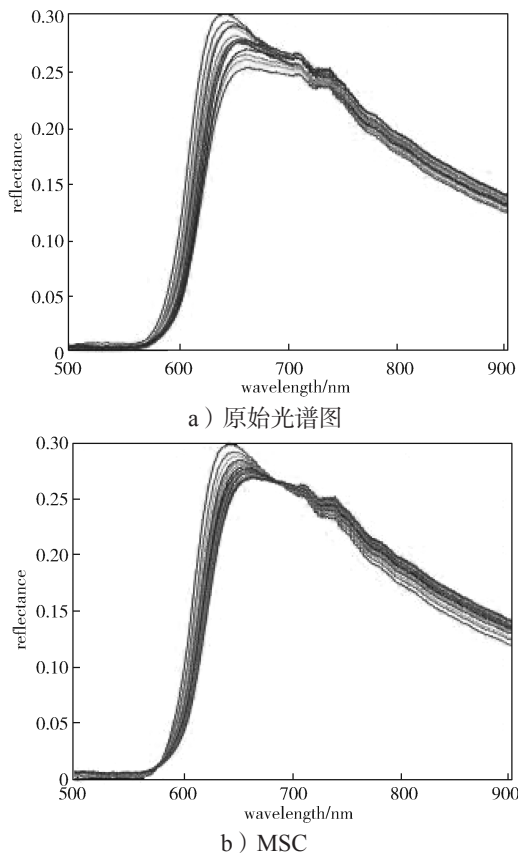


图1 经不同预处理的近红外反射光谱图

Fig. 1 Near infrared reflectance spectra with different pretreatment

由图 1 可知,经 MSC 和 SNV 预处理的光谱图相似,且与原始光谱图相比,光谱基线漂移有所改善。经 SG 预处理后,光谱噪声减少,光谱曲线变得更加平滑。

2.3 最优模型选择

为比较不同预处理方法的去噪效果以及模型性能,将原始光谱数据和预处理后的光谱数据分别与印刷品 Lab 值建立 PLSR 和 PCR 预测模型,几种模型的 R^2 和 RSME 值如表 2 所示。由表 2 可知,有预处理的水性油墨印刷品颜色预测模型性能比无预处理的好;基于 MSC 和 SNV 预处理的水性油墨印刷品颜色预测模型性能接近,均优于基于 SG 预处理的,这说明样本本身对光谱的影响大于测量中随机误差所造成的影响。对比 MSC 和 SNV 两种预处理方法,发现基于 MSC 预处理的 PLSR 预测模型对 L 、 a 、 b 三者的预测效果更好, R_2 分别达到了 0.9885, 0.9879, 0.9938, RSME 分别为 0.1692, 0.2445, 0.1190。

表2 PCR和PLSR模型对Lab值的预测性能
Table 2 Prediction performance of PCR and PLSR models for lab values

Lab 值	模型	预处理方法	R^2	$RSME$
L	PCR	无预处理	0.9742	0.5171
		MSC	0.9719	0.5155
		SNV	0.9711	0.5013
		SG	0.9777	0.5168
	PLSR	无预处理	0.9868	0.1712
		MSC	0.9885	0.1692
		SNV	0.9885	0.1756
		SG	0.9863	0.2818
a	PCR	无预处理	0.9851	0.8382
		MSC	0.9863	0.4294
		SNV	0.9865	0.4318
		SG	0.9858	0.5249
	PLSR	无预处理	0.9802	0.3437
		MSC	0.9879	0.2445
		SNV	0.9876	0.2520
		SG	0.9862	0.3229
b	PCR	无预处理	0.9748	0.2257
		MSC	0.9828	0.2159
		SNV	0.9825	0.2254
		SG	0.9776	0.2790
	PLSR	无预处理	0.9907	0.1755
		MSC	0.9938	0.1190
		SNV	0.9936	0.1196
		SG	0.9849	0.1898

2.4 预测值与测量值色差

利用基于MSC预处理的PLSR预测模型对测试集样本的Lab值进行预测,并用CIE1976 Lab色差公式计算预测值与测量值(测量值由分光密度仪测得)之间的色差 ΔE ,结果见表3。按国家标准GB/T 7707—2008《凹版装潢印刷品》中规定,当 $L \leq 50$ 时, $\Delta E \leq 4$ 即符合同批同色色差的要求。由表3可知,样本预测值与测量值的色差在0.4~1.2之间,说明此印刷品颜色预测模型具有较高的精度,预测颜色的色差符合印刷行业标准。

表3 印刷品预测值和测量值色差
Table 3 Color difference between predicted value and true value of printed material

编号	ΔE	编号	ΔE
1	0.5134	4	0.5399
2	0.4791	5	1.2024
3	0.7904		

3 结论

本文提出液态水性油墨的近红外光谱预测印刷品

Lab值的方法。先用不同预处理方法即多元散射校正、标准正态变换和卷积平滑滤波器对原始光谱进行处理,再分别构建PLSR和PCR模型。结果表明,基于MSC预处理的PLSR预测模型对于印刷品Lab值的预测精度均好于其他模型。利用该模型预测预测集样本的Lab值,并计算其色差。预测集样本的预测值与测量值色差的最大值为1.2024,最小值为0.4791,说明近红外光谱分析技术可以准确预测印刷品的颜色参数,通过油墨光谱在线预测印刷品颜色是一种有效方法。

参考文献:

- 吕伟,牟竞晓.基于Kubelka-Munk理论的颜色预测模型[J].印刷杂志,2020(3): 51-55.
LÜ Wei, MOU Jingxiao. Color Forecasting Model Based on Kubelka-Munk Theory[J]. Printing Field, 2020(3): 51-55.
- 赵德方,黄新国.基于Kubelka-Munk理论的光谱配色算法研究[J].包装学报,2017,9(1): 46-52.
ZHAO Defang, HUANG Xinguo. Research of Spectral Color Matching Algorithm Based on Kubelka-Munk[J]. Packaging Journal, 2017, 9(1): 46-52.
- 施国运,董娜,张逸新.双面半色调印刷品Kubelka-Munk色彩预测模型[J].光散射学报,2009,21(1): 13-17.
SHI Guoyun, DONG Na, ZHANG Yixin. The Color Prediction for Halftone Recto-Verso Print Based on Kubelka-Munk Model[J]. The Journal of Light Scattering, 2009, 21(1): 13-17.
- 葛惊寰,王庆娟.基于辐射传递理论的印刷品光谱反射预测模型[J].包装工程,2011,32(9): 77-80.
GE Jinghuan, WANG Qingjuan. Spectral Reflection Prediction Model for Print Based on Radiant Transfer Theory[J]. Packaging Engineering, 2011, 32(9): 77-80.
- 管力明,胡更生,卢红伟,等.近红外光谱在印刷品颜色检测中的应用[J].中南大学学报(自然科学版),2009,40(6): 1655-1659.
GUAN Liming, HU Gengsheng, LU Hongwei, et al. Application of Color Detection by Near Infrared Spectroscopy in Color Detection of Printing[J]. Journal of Central South University (Science and Technology), 2009, 40(6): 1655-1659.
- 褚小立,袁洪福,陆婉珍.在线近红外光谱过程分析技术及其应用[J].现代科学仪器,2004(2): 3-21.
CHU Xiaoli, YUAN Hongfu, LU Wanzhen. The On-

- Line Near Infrared Spectroscopy Process Analytical Technique and Its Applications[J]. Modern Scientific Instruments, 2004(2): 3–21.
- [7] RINNAN Å, VAN DEN BERG F, ENGELSEN S B, et al. Review of the Most Common Pre-Processing Techniques for Near-Infrared Spectra[J]. Trends in Analytical Chemistry, 2009, 28(10): 1201–1222.
- [8] GERRETZEN J, SZYMAŃSKA E, JANSEN J J, et al. Simple and Effective Way for Data Preprocessing Selection Based on Design of Experiments[J]. Analytical Chemistry, 2015, 87(24): 12096–12103.
- [9] 白永利, 黄新国, 彭楠, 等. 基于可见/近红外光谱分析技术的水性油墨黏度预测模型[J]. 包装学报, 2022, 14(5): 49–56.
- BAI Yongli, HUANG Xinguo, PENG Nan, et al. The Model for Predicting the Viscosity of Water-Based Ink by Vis/NIR Spectroscopy[J]. Packaging Journal, 2022, 14(5): 49–56.
- [10] 田叶. 稀疏化 PLS 回归方法在光谱学中的应用与实现[D]. 扬州: 扬州大学, 2018.
- TIAN Ye. The Application and Implementation of Sparse PLS Regression in Spectroscopy[D]. Yangzhou: Yangzhou University, 2018.
- [11] 苗雪雪, 苗莹, 龚浩如, 等. 不同偏最小二乘法的近红外光谱技术测定大米中水分的研究[J]. 分析科学学报, 2019, 35(5): 643–649.
- MIAO Xuexue, MIAO Ying, GONG Haoru, et al. Determination of Moisture Content in Rice by Near Infrared Spectroscopy with Different Partial Least Squares[J]. Journal of Analytical Science, 2019, 35(5): 643–649.
- [12] 杨拉蒂, 毕建武, 贾进章. 基于主成分回归分析的瓦斯含量预测[J]. 世界科技研究与发展, 2013, 35(6): 694–696, 732.
- YANG Ladi, BI Jianwu, JIA Jinzhang. Prediction of Coal Seam Gas Content Based on Principal Component Regression Analysis[J]. World Sci-Tech R & D, 2013, 35(6): 694–696, 732.
- [13] 曾远文. 基于主成分回归的土壤有机质高光谱特性分析[J]. 北京测绘, 2022, 36(4): 379–385.
- ZENG Yuanwen. Hyperspectral Analysis of Soil Organic Matter Based on Principal Component Regression[J]. Beijing Surveying and Mapping, 2022, 36(4): 379–385.
- [14] 于智海, 罗华平, 孔德国, 等. 基于近红外光谱技术的南疆骏枣动态水分模型研究[J]. 新疆农机化, 2022(2): 35–38.
- YU Zhihai, LUO Huaping, KONG Deguo, et al. Study on Dynamic Moisture Model of Red Jujube in Southern Xinjiang Based on Near-Infrared Spectroscopy Technology[J]. Xinjiang Agricultural Mechanization, 2022(2): 35–38.

(责任编辑: 邓彬)

Color Prediction Model of Liquid Water-Based Ink Based on Near-Infrared Spectroscopy

PENG Nan¹, HUANG Xinguo^{1,2}, BAI Yongli¹, ZHANG Shanshan¹,

ZHONG Yunfei^{1,2}, QU Xiaoyang², XIE Xiaochun²

(1. College of Packaging and Materials Engineering, Hunan University of Technology, Zhuzhou Hunan 412007, China;

2. Hunan Luck Printing Co., Ltd., Changsha 410100, China)

Abstract: Aiming at the problems of lag and imprecision in off-line color detection of printed material, a color prediction model of liquid water-based ink based on near-infrared spectroscopy was proposed. Multivariate Scatter Correction (MSC), Standard Normal Variate (SNV) and Savitzky-Golay filter (SG) were used to preprocess the original spectral data. Partial Least Squares Regression (PLSR) and Principal Component Regression (PCR) prediction models were established for the original spectral data and the preprocessed spectral data with the Lab value of the printed material respectively. The results show that the prediction accuracy of PLSR prediction model based on MSC preprocessing is the highest, R^2 of L , a and b are up to 0.9885, 0.9879 and 0.9938 respectively, and the average color difference of predicted colors is 0.71. Near infrared spectroscopy of liquid water-based ink can accurately predict the color of printed material, which provides a new idea for online detection of printed material.

Keywords: near infrared spectroscopy; water-based ink; color prediction; spectral prediction; partial least squares regression; principal component regression