

近红外光谱技术快速预测泡桐活立木年轮密度

江泽慧¹, 王玉荣^{1*}, 费本华¹, 傅峰¹, 许忠允²

1. 中国林业科学研究院木材工业研究所, 北京 100091

2. 美国农业部国家林务局南方实验站, 路易斯安娜州 派恩维尔 71360

摘要 应用近红外光谱分析技术主要对兰考泡桐活立木年轮密度进行了研究。取样时采用无损的方式, 即不伐木, 只从样木胸径处钻取直径为 5 mm 的木芯; 用近红外光谱仪采用自动进级式采集样品光谱, 波谱范围为 350~2 500 nm; 密度值采用水银体积仪测量; 校正模型和预测模型建立与分析采用偏最小二乘和完全交互验证法。研究表明, 中径级和大径级泡桐所选年轮数与近红外光谱值之间均存在很好的相关关系, 预测模型相关系数分别达 0.88 和 0.91; 中径级的泡桐年轮密度与近红外光谱的校正模型和预测模型相关系数分别达到 0.90 和 0.83, 校正标准误差(SEC)和预测标准误差(SEP)分别为 0.012 和 0.016。由此可见, 该法可简单、快速、无损的预测中径级即接近采伐龄泡桐活立木的年轮密度。

关键词 近红外光谱分析; 泡桐; 活立木; 年轮密度

中图分类号: S781.2 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-0593(2007)06-1062-04

引言

近红外(near infrared, 简称 NIR)谱区是指介于可见光(VIS)和中红外(MIR)谱区之间波长范围在 780~2 526 nm 的电磁波^[1]。其光谱信息主要反映的是有机物分子中 C—H, N—H, O—H 等含氢基团的信频与合频吸收^[2]。近红外光谱分析技术是光谱测量技术与化学计量学学科的有机结合, 具有样品制备简单、高速快捷、无破坏样品成分与结构, 可以对样品的成分和结构进行定性和定量分析的特点^[3]。目前, 近红外光谱分析技术已经在农业^[4-6]、石油化工、食品与医药^[7,8]及木材科学^[9-18]得到了广泛应用。但在国内, 将近红外光谱分析技术应用到木材科学研究中则刚刚起步^[19-22]。

木材是具有多孔结构的生物质材料, 其实体物质是细胞壁。细胞壁的主要成分为纤维素、半纤维素和木质素等高分子有机物^[23]。根据近红外光谱漫反射分析技术原理, 漫反射光是分析光与样品内部分子发生作用后的光, 负载了样品的结构和组成方面的信息, 因此, NIR 光谱分析技术可以用于木材的物理及力学等性质的定量分析中。木材密度是衡量木材物理性质及其机械特性的重要指标^[24]。兰考泡桐(*Pau-
lownia elongate* S. Y. Hu)属于阔叶材树种, 细胞孔隙较大, 木材密度较轻, 因此除了做一般的木材使用, 其还可以用于

乐器材料^[25]。尽管在国内已有报道应用近红外光谱技术对木材的密度进行预测研究^[19], 但应用该技术对我国人工林阔叶材树种、且通过少量活立木木芯而非伐倒木、对其年轮密度进行无损地预测和评估, 尚属首例。

1 材料和方法

1.1 样品准备

样品材料取自河南省兰考县兰考泡桐人工林中。采样方法是用内径为 5 mm 的手动生长锥在泡桐活立木的胸径处(距树干基部 1.3 m 处)自北向南方向钻取直径为 5 mm 泡桐木芯, 共钻取 26 株树(样木基本情况见表 1)的木芯。此采样方法不用伐木, 对树木基本没有损害。将钻取的生长锥木芯放入一木槽中, 用圆锯锯出宽度大约为 5 mm 的径切面, 用一黑色模具将木槽周围木材盖住(见图 1), 先进行图谱扫描, 之后进行年轮密度测量。

Table 1 Basic information of sample trees

样木编号	胸径 /cm	平均胸 径/cm	树高 /m	树龄 /y	径级 类别
PT01-PT19	25.5~38.5	31.8	5~12	7~10	中径级
PT21-PT29	43.0~54.8	48.6	7~15.8	13~17	大径级

收稿日期: 2006-05-22, 修订日期: 2006-08-26

基金项目: 国家林业局“948”引进项目(2002-45, 2003-4-27)和国家科技支撑计划课题(2006BAD19B07)资助

作者简介: 江泽慧, 女, 1939 年生, 中国林业科学研究院教授 * 通讯联系人 e-mail: yurwang@caf.ac.cn



Fig. 1 Collection and process of the sample

1.2 近红外光谱采集

近红外光谱仪采用美国 ASD 公司生产的 Field spec 光谱仪, 光谱的波长范围在 350~2 500 nm。每个光谱是由 30 次扫描平均所得, 扫描光斑直径为 3 mm, 采用自动进极采样方式, 每隔 3 mm 扫点, 以年轮为单位, 根据年轮宽度确定光谱数据归属于各个年轮。

1.3 密度测量

对两种径级的生长锥木芯从树皮端开始至髓心处每隔 2 个年轮进行密度测定。由于样品的形状特点较不规则, 采用水银体积仪测量各年轮的气干密度, 该法较直接测量法更为精确。测试的年轮数共 100 个, 其中中径级 51 个, 大径级 49 个。

1.4 多变量数据分析与模型建立

数据预处理及分析软件分别采用的是 ASD 公司的 Viewspecpro 和 CAMO 公司的多变量统计分析软件 Unscrambler, 建立定标模型和预测模型采用偏最小二及完全交叉验证法。

2 结果与讨论

2.1 泡桐木材年轮近红外光谱

从树皮端到髓心处, 每隔 2 个年轮进行选择, 对于中径级的 7 年至 10 年的泡桐木芯, 本文共选择了其中的 3 个年轮, 大径级的 13 年至 17 年的泡桐木芯, 选择了其中的 5 或者 6 个年轮进行研究。研究表明: 无论是中径级还是大径级泡桐木芯其吸收光谱的谱区范围是相一致的, 但 2 个径级各个年轮的光谱吸收强弱不同, 有的样品, 靠近树皮的年轮光谱吸收较强, 靠近髓心的年轮光谱吸收次之, 中间年轮的光谱吸收较弱(见图 2 和图 3), 但对于中径级木芯年轮也会出现靠近树皮的年轮光谱吸收较弱、靠近髓心的年轮其光谱吸收居中, 或树皮与髓心之间的年轮其光谱吸收居中。

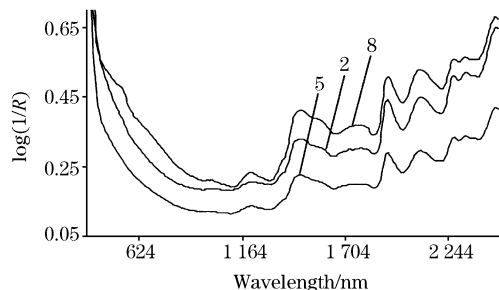


Fig. 2 Absorption spectra of annual rings of middle-diameter of the *Paulownia elongate*

2, 5, 8 show the annual ring of the PT06 tree

对于大径级木芯其不同年轮光谱吸收强度情况更为多样, 没有明显的规律性。

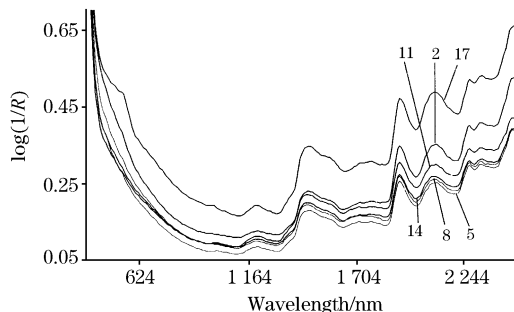


Fig. 3 Absorption spectra of annual rings of bigger-diameter of the *Paulownia elongate*

2, 5, 8, 11, 14, 17 show the annual ring of the PT23 tree

分析认为主要原因是由于从树皮到髓心各个年轮由于当年的气候不同及其本身的遗传因子不同, 从而其结构及组成成分是不同的, 其表现为各年轮吸收光谱强度不同; 另一方面, 目前国内研究木材性质所用生长锥钻取的木芯仍采用手动的方式, 由于心材和边材本身材质不同, 该法存在用力不均等因素, 从树皮到髓心的木芯可能会发生扭曲, 因而造成在同一方向有不同的切面出现。木材的不同切面其光谱吸收强度是有所差异的^[6]。但总的来看, 泡桐不同年轮其吸收光谱图的不同主要是由其本身的结构与组成成分的不同而决定。

2.2 泡桐木材年轮与近红外光谱的相关关系

将 17 株(树龄 7 年至 10 年)中径级泡桐木芯所选择的 3 个年轮以及 9 株(树龄 13 年至 17 年)大径级的泡桐木芯所选择的 5 或者 6 个年轮的年轮数与各年轮相应的光谱数据进行多变量统计分析, 发现两种径级的泡桐活立木在全光谱区内年轮数与光谱数据之间均呈现较好的相关关系。两种径级的校正及预测模型相关系数(r), 校正及预测均方根误差(RMSEC 及 RMSEP), 校正及预测标准误差(SEC 及 SEP)列于表 2 中。由表 2 数据得知, 大径级的泡桐生长锥各年轮的年轮数与其各年轮的光谱特征值的相关性较中径级的更高, 达到 0.91 以上。年轮本身反应的是树木在此一年中的一个生长状况, 其不仅代表了树木本身的遗传因子, 还反应了当年的气候条件, 从而表现在其年轮宽度、早晚材的比率及其各部分的结构及组成的不同, 其各年轮的光谱信息也反应了年轮的这一综合特征。

2.3 泡桐木材年轮密度测定模型建立

将上述各年轮的年轮密度与各年轮的光谱数据应用偏最

Table 2 Predicted result of annual rings of different diameter

类别	校正模型			预测模型		
	r	RMSEC	SEC	r	RMSEC	SEC
中径级	0.97	0.60	0.60	0.88	1.23	1.24
大径级	0.96	1.29	1.30	0.91	1.96	1.98

小二乘和完全交互验证法进行分析,结果表明:中径级的年轮密度与其光谱数据存在较好的相关关系,而大径级的年轮密度与其光谱数据间的相关性较差。分析其原因主要是大径级泡桐样本量偏少,并且泡桐成为成熟材之后,其各年轮密度值变化较小,使得建模数据之间差异缩小,另外,可能的原因是取材时由于其胸径较大,钻取木芯时造成年轮内部结构上破坏。因此,目前认为,利用该技术对大径级泡桐活立木年轮密度预测有待于进一步深入研究。

中径级的泡桐活立木,已接近采代龄,其各个年轮的密度值变化较大,应用近红外技术对中径级的泡桐年轮密度进

行预测研究中,去除了 6 个偏离正常值较大的样品,而且在全波谱 350~2 500 nm 范围内,屏蔽了 1 774~1 874, 2 284~2 344, 2 414~2 444 nm 等几处信噪比差,对模型相关系数呈负贡献的谱区。最后,其校正模型和预测模型相关系数分别达到 0.90 和 0.83,校正标准误差(SEC)和预测标准误差(SEP)分别为 0.012 和 0.016。样品预测值和实测值的详细数据列于表 3 中,由表 3 可看出,其大部分预测值和实测值的残差较小。

虽然将近红外光谱分析技术应用到木材性质研究中,特别是应用到活立木的材性指标检测中,还需要不断地研究与探索,但本文也初步证明了用快速无损的取样方式钻取活立木木芯,通过简单加工,再利用近红外这种高效无损地现代检测技术,能对采代龄前后的泡桐活立木的年轮密度进行较为理想地预测与评估,这必将为深入开展木材材性与培育和增值利用之间关系的研究以及人工林木材的高效利用提供科学依据。

Table 3 Comparison between practical measure values and near infrared prediction values of annual ring density of the middle diameter

编号	实测值	预测值	残差	编号	实测值	预测值	残差
PT0107	0.261	0.277	0.016	PT1108	0.301	0.278	-0.023
PT0104	0.266	0.247	-0.019	PT1105	0.25	0.257	0.007
PT0101	0.278	0.271	-0.007	PT1102	0.256	0.257	0.001
PT0205	0.29	0.282	-0.008	PT1204	0.275	0.248	-0.027
PT0202	0.254	0.254	0	PT1201	0.249	0.279	0.03
PT0308	0.292	0.311	0.019	PT1307	0.302	0.291	-0.011
PT0305	0.257	0.273	0.016	PT1304	0.273	0.259	-0.014
PT0302	0.258	0.258	0	PT1508	0.284	0.311	0.027
PT0408	0.298	0.31	0.012	PT1505	0.249	0.264	0.015
PT0405	0.282	0.275	-0.007	PT1502	0.256	0.242	-0.014
PT0402	0.253	0.265	0.012	PT1608	0.307	0.301	-0.006
PT0505	0.294	0.284	-0.01	PT1605	0.291	0.273	-0.018
PT0502	0.229	0.245	0.016	PT1602	0.236	0.252	0.016
PT0605	0.25	0.256	0.006	PT1708	0.344	0.312	-0.032
PT0602	0.258	0.258	0	PT1705	0.275	0.285	0.01
PT0706	0.268	0.26	-0.008	PT1702	0.237	0.243	0.006
PT0703	0.264	0.246	-0.018	PT1809	0.308	0.3	-0.008
PT0807	0.28	0.281	0.001	PT1806	0.265	0.268	0.003
PT0804	0.231	0.246	0.015	PT1803	0.274	0.249	-0.025
PT0801	0.256	0.255	-0.001	PT1908	0.388	0.369	-0.019
PT0907	0.281	0.268	-0.013	PT1905	0.263	0.296	0.033
PT0904	0.297	0.274	-0.023	PT1902	0.256	0.278	0.022
PT0901	0.267	0.273	0.006				

3 结 论

应用手动生长锥钻取阔叶材兰考泡桐活立木木芯,取材方法对树木本身基本是无损的;然后应用近红外光谱无损检测技术对其进行研究,结果表明泡桐活立木年轮本身与其光谱数据具有较高的相关关系,并以碾轮中其一材性指标——年轮密度进行预测研究,发现中径级的泡桐年轮密度与近红

外光谱的校正模型和预测模型相关系数分别达到 0.90 和 0.83,校正标准误差(SEC)和预测标准误差(SEP)分别为 0.012 和 0.016。从而证明应用近红外光谱技术可以实现对中径级即接近采伐龄泡桐活立木的年轮密度进行快速预测和评估。

致谢:在样品锯制过程中得到了国际竹藤网络中心覃道春博士的大力协助,在此表示衷心感谢!

参 考 文 献

- [1] Bokobza L. Journal of Near Infrared Spectroscopy, 1998, 6(1): 3.
- [2] QU Hai-bin, LIU Quan, CHENG Yi-yu(瞿海斌, 刘全, 程翼宇). Chin. J. Anal. Chem. (分析化学), 2004, 32(4): 477.
- [3] LU Wan-zhen, YUAN Hong-fu, XU Guang-tong, et al(陆婉珍, 袁洪福, 徐广通, 等). Modern Near Infrared Spectroscopy Analysis Technology(现代近红外分析技术). Beijing: China Petrochemical Press(北京: 中国石化出版社), 2001. 10.
- [4] Batten G D. Journal of Near Infrared Spectroscopy, 1998, 6(1): 105.
- [5] Ciurczak E W. Food Testing and Analysis, 1995, (5): 35.
- [6] HE Xu-sheng(何绪生). Chinese Journal of Soil Science(土壤通报), 2004, 35(4): 487.
- [7] Conway J M, Norris K H, Bodwell C E. American Journal of Clinical Nutrition, 1984, 40(6): 1123.
- [8] YANG Nan-lin, CHEN Yi-yu, QU Hai-bin(杨南林, 程翼宇, 瞿海斌). Acta Chimica Sinica(化学学报), 2003, 61(5): 742.
- [9] Kelley S S, Rials T G, Groom L R. Wood Sci. Technol., 2004, 38: 257.
- [10] Hauksson J B, Bergqvist G. Wood Sci. Technol., 2001, 35: 475.
- [11] Michell A J. Appita Journal, 1995, 48(6): 425.
- [12] Wright J A, Birkett M D, Gambino M J T. TAPPI Journal, 1990, 73(8): 164.
- [13] Lwamoto M, Kawano S, Ozaki Y. Journal of Near Infrared Spectroscopy, 1995, 3(4): 179.
- [14] Rials T G, Kelley S S, So C L. Wood and Fiber Science, 2002, 34(3): 398.
- [15] Schimleck L R, Evans R. IAWA Journal, 2002, 23(3): 225.
- [16] Tsuchikawa S. Journal of Near Infrared Spectroscopy, 1998, 6(1): 41.
- [17] Sefara N L, Conradie D, Turner P. TAPPSA Journal, 2000, 11: 15.
- [18] Thumm A, Meder R. Journal of Near Infrared Spectroscopy, 2001, 9(3): 117.
- [19] JIANG Ze-hui, HUANG An-min, WANG Bin(江泽慧, 黄安民, 王斌). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2006, 26(6): 1034.
- [20] JIANG Ze-hui, HUANG An-min, FEI Ben-hua, et al(江泽慧, 黄安民, 费本华, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2006, 26(7): 1230.
- [21] JIANG Ze-hui, HUANG An-min(江泽慧, 黄安民). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2006, 26(8): 1464.
- [22] YANG Zhong, JIANG Ze-hui, FEI Ben-hua, et al(杨忠, 江泽慧, 费本华, 等). Scientia Silvae Sinicae(林业科学), 2005, 41(4): 177.
- [23] LI Jian(李坚). Wood Science(木材学). Haierbin: Northeast Forestry University Publishing House(哈尔滨: 东北林业大学出版社), 1994. 32.
- [24] CHENG Jun-qing(成俊卿). Wood Science(木材学). Beijing: China Forestry Publishing House(北京: 中国林业出版社), 1985. 463.
- [25] Olson, J R, Carpenter, S B. Wood and Fiber Science, 1985, 17(4): 428.

Rapid Prediction of Annual Ring Density of *Paulownia elongate* Standing Tress Using Near Infrared Spectroscopy

JIANG Ze-hui¹, WANG Yu-rong^{1*}, FEI Ben-hua¹, FU Feng¹, HSE Chung-yun²

1. Research Institute of Wood Industry, Chinese Academy of Forestry, Beijing 100091, China

2. Southern Research Station, USDA Forestry Service, Pineville LA 71360, USA

Abstract Rapid prediction of annual ring density of *Paulownia elongate* standing trees using near infrared spectroscopy was studied. It was non-destructive to collect the samples for trees, that is, the wood cores 5 mm in diameter were unthreaded at the breast height of standing trees instead of fallen trees. Then the spectra data were collected by autoscan method of NIR. The annual ring density was determined by mercury immersion. And the models were made and analyzed by the partial least square (PLS) and full cross validation in the 350-2 500 nm wavelength range. The results showed that high coefficients were obtained between the annual ring and the NIR fitted data. The correlation coefficient of prediction model was 0.88 and 0.91 in the middle diameter and bigger diameter, respectively. Moreover, high coefficients of correlation were also obtained between annual ring density laboratory-determined and the NIR fitted data in the middle diameter of *Paulownia elongate* standing trees, the correlation coefficient of calibration model and prediction model were 0.90 and 0.83, and the standard errors of calibration(SEC) and standard errors of prediction(SEP) were 0.012 and 0.016, respectively. The method can simply, rapidly and non-destructively estimate the annual ring density of the *Paulownia elongate* standing trees close to the cutting age.

Keywords Near infrared spectral analysis; *Paulownia elongate*; Standing trees; Annual ring density

* Corresponding author

(Received May 22, 2006; accepted Aug. 26, 2006)