

近红外光谱法预测粗皮桉木材气干密度的影响因素分析

赵荣军, 霍小梅, 上官蔚蔚, 王玉荣*

中国林业科学研究院木材工业研究所, 北京 100091

摘要 采用近红外光谱分析技术,对粗皮桉木材气干密度校正模型的影响因素进行比较研究。使用直接测量法测量了粗皮桉木材的气干密度,并用近红外光谱仪采集试样的近红外漫反射光谱,对不同切面、厚度、含水率和粗糙度的粗皮桉木材试样的原始光谱进行二阶导数预处理并选择一定光谱段建立回归模型。以50~140个试样作为校正集建立木材气干密度的偏最小二乘法校正模型,使用外部验证法进行验证。结果表明,试样切面、厚度、粗糙度和含水率对粗皮桉木材气干密度的预测结果均有影响,其中分别是选取试样横切面、厚度为2~5 mm、含水率为12%和粗糙度较细致时的木材试样所建立的各个近红外光谱预测模型效果最好。

关键词 近红外光谱;粗皮桉木材;气干密度;影响因素

中图分类号: O657.3; S781.3 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2011)11-2948-04

引言

近红外光谱技术以其快速、无损、操作简便、绿色环保等众多优点被应用于针叶材密度等材性快速预测研究^[1-4]。然而,由于近红外漫反射光谱是经过多次反射、折射并吸收返回木材试样表面的光,通常利用这些光谱吸收值与木材性质的真值进行回归分析,建立预测模型,预测结果的准确性会因为样品种类、样品表面状况等因素而影响预测效果^[5-8],因此近红外光谱的木材性质预测的实际应用研究就受到限制^[9]。尤其阔叶材,与针叶材相比,种类多,结构复杂多变,木材性质差异大,导致阔叶材的近红外光谱有别于针叶材,光谱信息会更为复杂。有鉴于此,应针对不同阔叶树种建立预测模型,同时考虑到各种影响因素,在利用近红外光谱方法预测同一树种木材气干密度时,基于木材不同切面、含水率、表面粗糙度等因素进行近红外光谱方面的研究非常必要。而目前基于多种影响因素研究木材性质近红外光谱预测模型的研究报道较少。本文主要考察了阔叶材粗皮桉木材试样切面、厚度、表面粗糙度、含水率对近红外光谱预测粗皮桉木材气干密度的影响,为将来应用近红外光谱技术开展粗皮桉木材性质预测研究时提供借鉴。

1 实验部分

1.1 材料

试验材料采自广东遂溪县城月镇雷州林业局迈进林场。按照测试项目的不同,试样尺寸规格有所不同。不同切面的试样尺寸规格为:20 mm(R)×20 mm(T)×20 mm(L),试样数量为210个;不同厚度试样规格为:20 mm(R)×20 mm(T)×20 mm(L),20 mm(R)×20 mm(T)×10 mm(L),20 mm(R)×20 mm(T)×5 mm(L),20 mm(R)×20 mm(T)×2 mm(L),试样数量均为210个;不同含水率试样规格为:10 mm(R)×10 mm(L)×10 mm(T),试样数量为210个;不同粗糙度试样规格:20 mm(R)×20 mm(T)×10 mm(L),试样数量为75个。

1.2 仪器

美国ASD公司生产的LabSpec Pro近红外光谱仪,恒温恒湿试验箱,天平。

1.3 NIR光谱采集及数据分析

近红外光谱仪的波长范围为350~2500 nm。详细扫描步骤见文献。在试验过程中,实验室内温度和相对湿度稳定。

1.4 气干密度

粗皮桉木材气干密度是按照国家标准《木材物理力学性

收稿日期:2011-06-28,修订日期:2011-09-20

基金项目:中国林业科学研究院基本科研业务费专项项目(CAFYBB2008008)和国家自然科学基金重点项目(30730076)资助

作者简介:赵荣军,1966年生,中国林业科学研究院木材工业研究所副研究员 e-mail: rongjun@caf.ac.cn

* 通讯联系人 e-mail: yurwang@caf.ac.cn

质试验方法》(GB1933—2009)进行测定。气干密度是先在试样三个切面的相对中心位置,分别测出弦向、径向和纵向方向尺寸,计算并得到试样体积;其次用天平称取试样重量;最终计算试样气干密度值。

2 结果与讨论

2.1 试样切面对近红外光谱预测木材气干密度的影响

基于木材的生物结构和天然属性,它是由不同种类(如导管、木纤维、木射线、轴向薄壁细胞等)、不同大小、不同形状、不同排列和比例的细胞所组成的有机复合体材料。木材的解剖构造特征与主要组成成分的信息在三个切面上有不同体现。横切面是与树干主轴(或木材纹理)垂直的切面,反映了木材的心边材、生长轮、早晚材、厚壁与薄壁组织等信息;弦切面是与木材纹理或生长轮正切、与木射线垂直的切面;径切面是与木材纹理平行,与木材射线平行的切面,实际上,径切面是弦切面通过髓心的一个特殊的切面,主要反映心材和边材、生长轮、木射线等信息^[10,11]。因为木材三个切面细胞构造与组成成分的不同,导致了近红外吸收光谱吸收峰值有所不同,进而影响了近红外方法对粗皮桉木材气干密度模型的预测结果。

采用近红外漫反射光谱法对粗皮桉木材三个切面采集光谱,如图 1 所示。从图中可以看出,粗皮桉木材横切面的近红外光谱吸收峰最高,信息最强,而径切面和弦切面的近红外光谱吸收峰较低,光谱信息相对较弱。近红外漫反射光谱在横切面上主要反映了粗皮桉木材导管、纤维、木射线等细胞的细胞壁、细胞腔、早晚材以及主要化学组分的各种信息,而在径切面或弦切面上,这种信息相比横切面来说较弱,甚至有可能出现仅仅反映细胞壁,或者全部是早材、晚材或者是早晚材中间过渡处的信息,因此信息较弱^[13]。

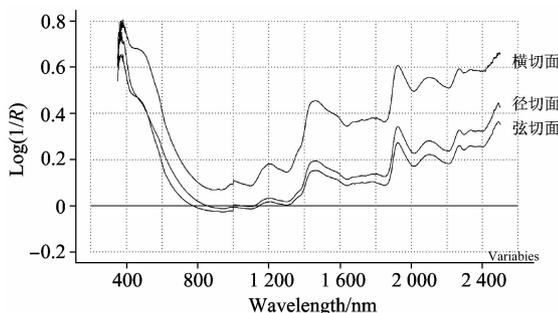


Fig. 1 NIR spectra of wood different sections in *E. pellita*

通过对粗皮桉木材近红外光谱吸收峰值进行导数预处理,并使用偏最小二乘法,在波长范围为 350~2 500 nm 的近红外光谱区域,建立粗皮桉木材三个切面的气干密度近红外光谱校正模型,结果见表 1。

由表 1 可知,试样横切面近红外光谱气干密度校正模型的相关系数最高,为 0.90,校正标准误差最低,为 0.036。分析认为,在解剖构造上,木材气干密度主要与木材细胞壁率、晚材率、孔隙率、木材组织比率等相关,这些组成信息集中体现在木材的横切面上,所以近红外光谱吸收峰最高,

预测效果最好;而径切面和弦切面上这些细胞的组成信息相对不明显,使得近红外光谱信息相对较弱,预测结果也稍差。同时,将三个切面的近红外光谱值进行平均,用此平均值与粗皮桉木材气干密度建立的模型预测效果也较好。因此建议,在进行近红外光谱木材性质预测时,采集的三个切面近红外光谱会全面反映木材的细胞组成信息,但比较费时,研究者可以根据自己的研究目的,选择试样的横切面、纵切面或三个切面来采集光谱以建立理想的预测模型。

Table 1 Air-dry density calibration of wood different sections in *E. pellita*

模型	评价指标	横切面	径切面	弦切面	三个切面
校正模型	R	0.90	0.88	0.87	0.89
	SEC	0.036	0.039	0.040	0.037

2.2 试样厚度对近红外光谱预测木材气干密度的影响

按照我国国家标准木材无疵小试样气干密度的尺寸、依据近红外漫反射光谱穿透原理和上述研究结果,本节探讨试样厚度对粗皮桉木材气干密度近红外光谱预测模型的影响。在横切面采集光谱,选取 20, 10, 5 和 2 mm 厚的木材试样,分析不同厚度对粗皮桉木材气干密度分析模型预测结果的影响,详见表 2。

Table 2 Air-dry density calibration and validation set of different thickness samples for *E. pellita* wood

模型	评价指标	厚度/mm			
		20	10	5	2
校正模型	R	0.92	0.93	0.98	0.98
	SEC	0.029	0.028	0.017	0.017
预测模型	R	0.91	0.91	0.95	0.95
	SEP	0.031	0.031	0.024	0.026
	RPD	2.42	2.45	3.11	3.21

由表 2 可知,利用近红外光谱方法预测粗皮桉木材无疵小试样气干密度时,2 mm 厚和 5 mm 厚的木材试样建立的校正模型相关系数为 0.98,而预测模型的相关系数为 0.95。10 和 20 mm 厚木材试样的校正模型和预测模型的相关系数相比较小,标准偏差又较高。从相对分析误差(RPD)来看,2 和 5 mm 厚的木材试样的校正与预测模型相对分析误差均大于 3,而 10 和 20 mm 厚木材试样模型的 RPD 也都大于 2.40,单从这一个指标来说,试样厚度对粗皮桉木材气干密度值的预测模型影响不明显,但是试样厚度会影响其预测结果。分析认为近红外光谱可以穿透 2~5 mm 厚的木材试样,试样厚度越薄,在上下两个横切面的差异越小,近红外光谱吸收信息愈全面,愈能真实反映整个木材试样的密度信息,因此厚度为 2 和 5 mm 的粗皮桉木材试样的预测模型均较好。

2.3 粗糙度对近红外光谱预测木材气干密度的影响

经过刨切或砂磨后,由于细胞裸露在切面上,木材表面变得不很光滑。因此木材组织的构造与排列赋予木材表面以粗糙度^[12]。通常,木质材料的粗糙度是由木材表面的解剖构

造所决定的,如早晚材、导管与纤维细胞的大小与分布类型、交错纹理等;同时刨削、砂磨等加工过程在很大程度上也会影响木材表面的粗糙度。在分析近红外光谱方法预测粗皮桉木材气干密度的诸多因素中,试样表面粗糙度是其中一个重要影响因素。木材表面的粗糙度会影响近红外光谱对材料的反射和吸收,进而影响近红外光谱吸收值。该文以粗皮桉木材横切面试样粗糙度为变化因子,探讨木材不同表面粗糙度对近红外光谱预测粗皮桉木材气干密度的影响。

选用三种不同锯齿密度的锯片加工粗皮桉木材密度试样的横切面,将加工的表面粗糙度标记为三个等级,分别为粗糙度 I (粗糙度较小/光滑)、粗糙度 II (粗糙度中等)和粗糙度 III (粗糙度较大)三个等级。

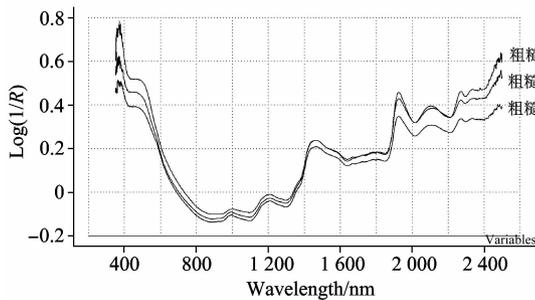


Fig. 2 NIR spectra of different roughness samples

图 2 是三种粗糙度条件下的粗皮桉木材横切面试样近红外光谱图,从图中可以看出,粗糙度不同,试样的近红外光谱吸收度也不同,其中粗糙度 I 试样的吸收度最大,而主要吸收光谱区吸收度差异不明显。

Table 3 Air-dry density calibration and validation set of different roughness samples for *E. pellita* wood

模型	评价指标	粗糙度		
		I	II	III
校正模型	R	0.96	0.92	0.84
	SEC	0.010	0.016	0.020
预测模型	R	0.89	0.86	0.82
	SEP	0.017	0.022	0.021

根据实验测得粗皮桉木材气干密度值,结合试样横切面的近红外光谱数据,建立校正模型和预测模型,见表 3。由表中可知,粗糙度为 I 的粗皮桉木材试样校正模型和预测模型的相关系数均最高,分别是 0.96 和 0.89,而校正模型和预测模型的标准偏差 SEC 均最低,分别为 0.010 和 0.017。结果说明表面光滑时木材试样建立的近红外分析模型效果最好,分析认为试样不同表面粗糙度所建立的模型效果存在一定差异,在进行近红外预测模型研究时,应尽量控制试样表面粗糙度基本一致,尽可能减小因试样表面粗糙质量而影响分析模型的精度。

2.4 含水率对近红外光谱预测木材气干密度的影响

由于含 H—O 键的水分子在近红外光谱区有较强的光谱吸收,而木材在气干状态含水率在 6%~15% 左右,因为水分子的存在使得木材试样在近红外光谱区域的吸收峰形状发生

改变,进而对近红外光谱产生影响^[13]。通常,气干木材中的水分会随着周围环境相对湿度的变化而变化,因此在利用近红外光谱分析木材性质时需要考虑水分对模型分析结果的影响。

木材中的水分是用含水率来表示,本文选取含水率为 0%, 12%, 20% 和 100% 四种不同含水率的木材试样作为主要研究材料。为了试样易于吸收或解吸水分,试样采用非标准规格尺寸,按照国家标准 (GB1933-2009) 方法测试试样含水率,同时调节试样至所需的含水率。采集试样三个切面的近红外光谱(图 3),建立预测模型,结果见表 4。

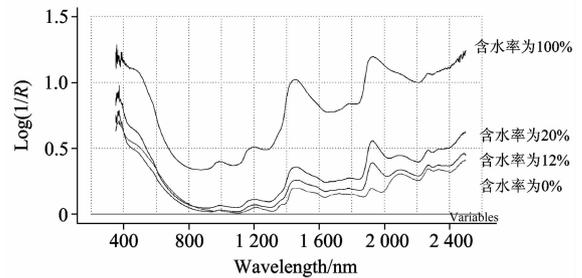


Fig. 3 NIR spectra of different moisture content samples

由图 3 可以明显看出,木材不同含水率试样的近红外光谱吸收度明显不同,随着试样含水率增加,近红外区域的光谱吸收也相应增大,尤其是当粗皮桉木材试样处于饱水状态(含水率为 100%)时,其光谱吸收度值最高。

Table 4 Air-dry density calibration and validation set of different moisture content samples for *E. pellita* wood

模型	评价指标	含水率			
		0%	12%	20%	100%
校正模型	R	0.89	0.92	0.87	0.69
	SEC	0.031	0.028	0.034	0.051
预测模型	R	0.85	0.88	0.82	0.64
	SEP	0.037	0.033	0.039	0.055
	RPD	1.87	2.10	1.73	1.29

由表 4 可知,四种不同含水率条件下的粗皮桉木材气干密度校正模型相关系数变化范围在 0.69~0.92 之间,预测模型的相关系数在 0.64~0.88 区间变化,其中含水率为 12% 时试样的校正模型和预测模型的相关系数最高,标准偏差最小,而相对分析误差最大,说明在这一含水率条件下模型的预测效果最好。而含水率等于或大于 20% 以上时,预测模型效果较差。由此可见,利用近红外光谱技术预测木材气干密度时,水分是不容忽视的重要影响因素。

3 结论

(1) 试样三个不同切面条件下建立粗皮桉木材气干密度分析模型,其中横切面近红外光谱信息最强,径切面和弦切面的信息相对较弱,在建立的具有不同近红外光谱信息的三个切面的气干密度校正模型中,横切面相关系数最高 0.90,

校正标准偏差最低 0.036, 建模效果最好。

(2) 四种不同厚度密度试样建立粗皮桉木材气干密度分析模型, 效果均较好, 相对分析误差均大于 2.4, 表明这几种厚度试样均可以很好预测粗皮桉木材的气干密度, 其中 2 mm 和 5 mm 厚试样的模型效果均很好, 其校正模型相关系数为 0.98, 预测模型相关系数为 0.95, 相对分析误差都大于 3.0, 表明试样厚度会影响粗皮桉木材气干密度模型的预测精度。

(3) 三种不同表面粗糙度条件下建立粗皮桉木材气干密度分析模型, 预测效果存在一定的差异, 其中表面粗糙度光滑时试样的校正模型的相关系数为 0.96, 预测模型的相关系

数为 0.89, 均最高; 而校正模型和预测模型的标准偏差分别是 0.010 和 0.017, 均最小, 此时模型预测效果最好。说明建模时尽量保持试样表面粗糙度光滑并且基本一致, 进而避免因试样表面粗糙质量而影响预测结果。

(4) 四种不同含水率条件下试样的近红外光谱吸光度明显不同, 所建立粗皮桉木材气干密度分析模型效果也不近相同, 其中含水率为 12% 时校正模型和预测模型的相关系数最高, 分别是 0.92 和 0.88, 而标准偏差分别为 0.028 和 0.033, 预测模型的相对分析误差为 2.1。表明利用近红外光谱方法进行木材气干密度预测研究时, 木材水分是重要的影响因素之一, 试样含水率为 12% 时模型的预测效果最好。

References

- [1] Schimleck L R, Sturzenbecher R, Mora C, et al. *Holzforschung*, 2005, 59(2): 214.
- [2] Schimleck L R, Mora C, Daniels R F. *Canadian Journal of Forest Research*, 2003, 33(12): 2297.
- [3] Hoffmeyer P, Pedersen J G. *Holz als Roh-und Werkstoff*, 1995, 53: 165.
- [4] WANG Xiao-xu, HUANG An-min, YANG Zhong, et al(王晓旭, 黄安民, 杨忠, 等). *Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析)*, 2011, 31(4): 975.
- [5] Marco F, Leonardo M, Valentina Q. *Canadian Society for Exercise Physiology*, 2004, 29(4): 463.
- [6] Xu Qinghua, Qin Menghua, Ni Yonghao, et al. *Canadian Journal of forest Research*, 2011, 41(2): 352.
- [7] Hein P R G, Lima J T, Chaix G. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 2009, 17(3): 141.
- [8] Laurence R S, Reinhard S, Christian M, et al. *Holzforschung*, 59(2): 214.
- [9] Siesler H W. *Near-Infrared Spectroscopy: Principles, Instruments, Applications*. Essen: John Wiley and Sons, 2006.
- [10] LIU Yi-xing, ZHAO Guang-jie(刘一星, 赵广杰). *Material for Wood Resource(木质资源材料学)*. Beijing: Chinese Forestry Publishing House(北京: 中国林业出版社), 2004.
- [11] LI Jian(李坚). *Wood Science(木材科学)*. Beijing: Higher Education Press(北京: 高等教育出版社), 2002.
- [12] LI Jian(李坚). *Research on Wood Science(木材科学研究)*. Beijing: Science Press(北京: 科学出版社), 2009.
- [13] 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. 2

Influence Factor for Prediction of Air-Dry Density of *Eucalyptus Pellita* by Near Infrared Spectroscopy

ZHAO Rong-jun, HUO Xiao-mei, SHANGGUAN Wei-wei, WANG Yu-rong*

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

Abstract Near infrared spectroscopy(NIR) technique was applied to compare the influence factors of *Eucalyptus pellita*'s air-dry density. Air-dry density of eucalypt wood was tested by direct measurement. After collecting the near infrared reflectance spectra of samples in different section and with different thickness, moisture content and roughness, the NIR spectra were pre-processed with the second-derivative and the regression models were built in certain spectra. The calibration models were established using 50~140 samples with the partial least squares method and validated with external validation method. The results showed that the predicted results were influenced by sample's section, thickness, roughness and moisture content. The best near infrared spectroscopy prediction model was built under the condition of transverse section, 2~5 mm thickness, 12% moisture content and meticulous roughness of wood.

Keywords Words near infrared (NIR) spectroscopy; Wood of *Eucalyptus pellita*; Air-dry density; Influence factor

* Corresponding author

(Received Jun. 28, 2011; accepted Sep. 20, 2011)