

## 采谱方式对竹材气干密度近红外预测模型精度的影响

余雁<sup>1</sup> 江泽慧<sup>1</sup> 王戈<sup>1</sup> 覃道春<sup>1</sup> 许忠允<sup>2</sup>

(1 国际竹藤网络中心 2 美国林业局南方研究院)

**摘要:**该文对近红外光谱技术结合化学计量学分析方法快速预测毛竹材气干密度的可行性进行了研究,重点探讨不同采谱方式对所建模型预测精度的影响.为了便于对比,建模过程中光谱数据未经过任何预处理.结果表明,采谱方式影响着模型的预测精度.从竹材横切面采谱所建模型的预测精度最高,内表面(靠近竹黄面)居中,外表面(靠近竹青面)最差.但如果对竹材内外表面的光谱求平均后建模,则可以显著提高模型的预测精度.随后选择最优模型对随机抽取、未参与建模的 30 个未知样品的密度进行了预测,预测值与测量值的相关性高,表明近红外光谱技术可以快速、准确地预测竹材的气干密度.

**关键词:**近红外光谱,毛竹,气干密度,模型精度

中图分类号:S781.9 文献标识码:A 文章编号:1000-1522(2007)04-0080-04

YU Yan<sup>1</sup>; JIANG Ze-hui<sup>1</sup>; WANG Ge<sup>1</sup>; QIN Dao-chun<sup>1</sup>; XU Zhong-yun<sup>2</sup>. **Effects of sample surface on the accuracy of near infrared predictive model of air dried density of bamboo.** *Journal of Beijing Forestry University* (2007) **29**(4) 80-83 [Ch, 11 ref.]

1 International Center for Bamboo and Rattan, Beijing, 100102, P. R. China;

2 Southern Research Station of US Forest Service, Pineville, LA, 71360, USA.

The objective of this study is to investigate the feasibility of using near infrared spectroscopy (NIR) combined with chemometrics analysis to rapidly predict the air-dried density of *Phyllostachys pubescens* Mazei ex H. de Lebaie. Especially, this study focused on the effects of spectrum collection methods on the accuracy of near infrared predictive model. For comparison, no spectrum treatment procedure was adopted when establishing all the NIR models. The results indicated that the accuracy of models was influenced by the sample surface from which NIR spectra were obtained. The model based on transverse section of bamboo owned the highest accuracy, followed sequentially by the models respectively based on the inner and outer surfaces of bamboo. It was also found that the model accuracy can be substantially improved if the model was based on the average spectra obtained from the outer and inner surfaces of bamboo. This model was then used to predict the air-dried density of 30 unknown bamboo samples, and a good correlation between the measured and predicted values was obtained.

**Key words** near-infrared spectrum, *Phyllostachys pubescens* Mazei ex H. de Lebaie, air-dried density, model accuracy

近红外光谱分析技术(NIR)是一种利用近红外波段的光谱对样品的化学组成、物理性质进行快速测定的分析技术.与其他光谱分析相比,该技术具有快速、安全等特点,已经在食品、农业、石油化工等十几个工业领域得到了应用,产生了显著的经济效

益<sup>[1]</sup>.近几年来,近红外光谱分析技术在木材科学与加工领域的应用前景得到了广泛关注.许多研究表明,该技术可以快速、无损地预测木材的许多物理、化学和力学性质<sup>[2-7]</sup>,特别是对木材主要化学成分、密度、抗弯弹性模量等指标的预测准确性较高.同

收稿日期:2006-07-10

http://journal.bjfu.edu.cn

基金项目:“948”国家林业局引进项目(2002-4-5,2003-4-27).

第一作者:余雁,博士.主要研究方向:木材科学与技术.电话:010-64728877-6130 Email: yuyan@icbr.ac.cn 地址:100102 北京朝阳区望京阜通东大街8号国际竹藤网络中心.

责任作者:江泽慧,研究员.主要研究方向:木材科学与技术.电话:010-62889001 Email: liuxe@icbr.ac.cn 地址:同上.

时研究发现,基于近红外光谱所建预测模型的精度容易受到光谱采集方式、木材试样表面状况<sup>[8]</sup>、含水率等因素的影响<sup>[9-10]</sup>,因此需要在建模过程中给予考虑.虽然国内外已经发表了有关近红外光谱技术在木材科学领域应用的许多论文,但至今少见在竹材领域的应用报道.

与木材相比,竹材具有其独特的解剖和物理构造,特别是竹材的密度在径向存在较大变异,这是在建立竹材性质 NIR 预测模型时应该考虑的因素.本次研究以我国工业化利用的最主要竹种——毛竹为研究对象,探讨利用 NIR 技术快速预测竹材气干密度的可行性,并重点研究从竹材不同表面采谱所建模型之间精度的差异,为近红外光谱技术在竹材上的成功应用提供科学指导.

## 1 材料与方法

### 1.1 材料

试验材料为毛竹 (*Phyllostachys pubescens* Mazei ex H. de Lebaie),采自浙江杭州萧山大庄地板厂附属竹林.试样尺寸有两种:第1种试样尺寸为 20 mm × 20 mm × 5.8 mm,其中校正集样本数 90,预测集样品数 30;第2种为 20 mm × 20 mm × 2 mm 的竹片,校正集样本数 90.测试前试样放置 NIR 实验室 20 d,使其含水率达到与测试环境相平衡(8%~9%).实验室的温度由中央空调控制,基本保持在 20~21 之间.气干密度测量参照 GB/T 15780—1995<sup>[11]</sup>进行.

### 1.2 近红外光谱采集

使用的近红外光谱仪为美国 ASD 公司生产的 FieldSpec 光谱仪,波长范围在 350~2 500 nm 之间.使用两分叉光纤探头采集样品表面的近红外光谱,探头与样品表面的距离为 3 mm.校准样为商用聚四氟乙烯平板材料.在每个样品的 3 个不同表面(横切面、靠近竹青面、靠近竹黄面)沿对角线均匀采集光谱 3 次.每个光谱为 30 次全谱扫描的平均值.

### 1.3 多元数据分析及建立预测模型

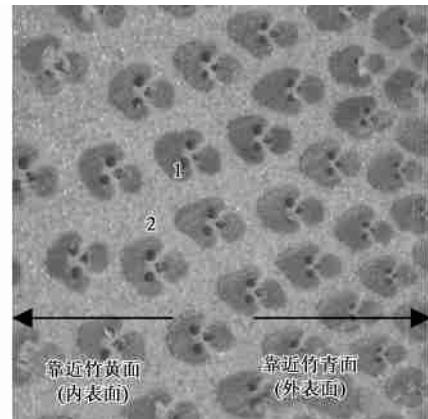
从测量样品中随机选出试样组成校正集,用于模型构建.剩余的样品组成预测集,用于模型验证.利用仪器随机的 Viewspec Pro 软件把仪器采集的光谱数据转化为计量化学软件 Unscrambler 9.1 所能识别的格式,同时输入相应样品的密度数据,使用偏最小二乘(PLS1)和完全交互验证法建立竹材密度预测模型.

## 2 结果与讨论

### 2.1 试样不同表面的 NIR 光谱

图 1 为实体显微镜下的毛竹横切面.毛竹密度

在径向的变异主要由维管束在径向的分布决定,越靠近竹青(外表面),维管束的分布越密集,竹材的密度越大.图 2 为在同一试样不同表面采谱得到的 NIR 吸收光谱图.从图 2 可知,竹材不同表面近红外光谱的吸光度之间存在差异.靠近竹青面(外表面)的吸收最强,靠近竹黄面(内表面)的吸收最弱,而横切面的吸收则介于两者之间.竹材不同表面之间 NIR 吸收强度的差异可以根据竹材的解剖性质给予解释.当从试样外表面采谱时,由于靠近竹青面单位面积内的维管束数量较多,密度较大,有更多的近红外光谱信号通过漫反射传递给探测器,因此吸收强度较大;而内表面的密度较小,因此吸收强度小.从横切面采谱时,则避免了上述极端情况,吸收强度介于前两者之间.竹材不同表面的 NIR 吸光度存在差异的现象表明,在采谱时必须保证采谱表面的一致性,否则就会降低预测模型的精度.



1. 维管束; 2. 薄壁组织

图 1 毛竹的横切面(×25)

FIGURE 1 Cross section of *P. pubescens*

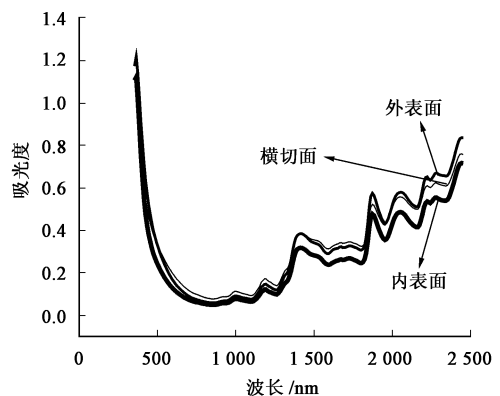


图 2 同一试样不同表面的 NIR 光谱图

FIGURE 2 NIR spectra obtained from the different surfaces of the same bamboo sample

### 2.2 采谱表面对 NIR 气干密度预测模型精度的影响

表 1 归纳了采谱表面对厚度分别为 5.8、2 mm 的毛竹片状试样 NIR 气干密度校正和预测模型精

度的影响.为了便于比较,光谱数据未经过任何处理和变换,也未通过软件剔除任何奇异点.从表1可知,对于厚度为5.8 mm的竹片,分别从竹材外表面、内表面、横切面采谱得到模型的预测精度不同.横切面模型相关系数最高,内表面次之,外表面最低.这是因为当从竹材内表面采谱时,由于内表面的密度较小,近红外光更容易穿透竹材到达试样的内部,从而比外表面采谱更完整地反映了试样的结构信息.而从横切面采谱时,光谱包含了竹材密度径向变异的完整信息,因此模型的相关系数较高.

表1 竹片不同采谱表面对 NIR 校正和预测模型精度的影响

TABLE 1 Effects of bamboo surface on the accuracy of NIR calibration and prediction model

厚度/ mm	类别	项目	外表面	内表面	横切面	外表面 + 内表面
5.8	校正模型	$R^2$	0.74	0.86	0.94	0.92
		$RMSEC$	0.041	0.031	0.018	0.021
	预测模型	$R^2$	0.64	0.81	0.88	0.88
		$RMSEP$	0.049	0.035	0.029	0.029
	校正模型	$R^2$	0.81	0.85	—	0.88
		$RMSEC$	0.032	0.029	—	0.025
预测模型	$R^2$	0.72	0.76	—	0.81	
	$RMSEP$	0.040	0.036	—	0.033	

注:  $R$  为相关系数,  $RMSEC$  为校正集标准误差,  $RMSEP$  为预测集标准误差.

虽然从竹材横切面采谱得到的模型预测精度最好,预测能力最强.但从实用的角度上看,这种预测模型的意义不大,因为近红外光的穿透能力只有几个毫米,只能反映样品一个小区域内的信息.如果样品较长,就不能反映整个样品的信息了.因而在竹材纵切面上采谱建立的预测模型更具有实用性.因为对于长样品,可以通过沿长度方向多点采谱的方式来解决.表1进一步表明,如果对竹块的外表面和内表面同时采谱并求平均,就可以更加完整地反映样品的结构信息,从而明显提高校正和预测模型的相关系数,降低校正集和预测集样品的标准差.

表1还表明,如果试样厚度减小,从其外表面和内表面采谱得到的模型预测精度差异减小.对于2 mm厚竹片,两者之间相关系数平方的差值仅为0.04,远小于5.8 mm厚竹片的0.12.这是因为试样厚度越小,从试样外表面和内表面采谱所包含的样品信息差异就越小.

### 2.3 未知试样密度的预测

以在竹片(厚度为5.8 mm)内表面和外表面同时采谱并求平均而建立的模型为例,检查其对30个未知竹材样品气干密度的预测能力,结果见图3.图3表明,利用该模型得到的预测值和测量真值之间存在很强的线性关系,相关系数的平方为0.913 2.

除了相关系数外,同时还需要使用预测集标准

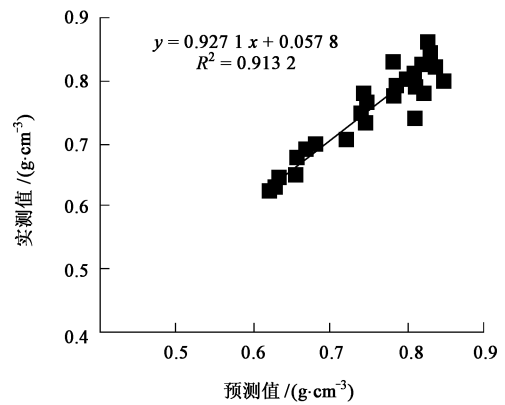


图3 NIR 竹材气干密度预测模型的预测值和实测值的关系  
FIGURE 3 Correlations between the measured values and predicted ones based on NIR air-dried density model

误差 ( $RMSEP$ ) 来判断模型的质量.

$$RMSEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_{pi} - y_{mi})^2}{n - 1}} \quad (1)$$

式中,  $y_{pi}$  为模型的预测值,  $y_{mi}$  为测量实际值,  $n$  为预测集样本数.通过式(1),结合图3中的数据可以得到预测集的标准误差为0.028  $g/cm^3$ .说明该模型能非常准确的预测毛竹竹材的气干密度.

### 3 结论与建议

利用近红外光谱技术可以快速、准确地预测竹材的气干密度,但采谱方式影响着模型的预测精度.分别从竹材外表面、内表面、横切面采谱所建模型的预测精度不同.横切面最好,内表面次之,外表面最差.竹材内外表面之间模型预测精度的差异程度随试样厚度的减小而减小.对竹材的内、外表面同时采谱并求平均,可以显著提高模型的预测精度.

上述结论虽然是基于气干密度得到的,但从原理上说对竹材其他指标的预测也具有借鉴意义.建议在对竹材片状试样采集 NIR 光谱时,最好能够采取双面采谱求平均的方式,这样可以显著提高预测模型的精度.

致谢 本研究大部分实验工作在美国农业部林务局南方研究院完成. Dr Chi-Leng So 在近红外光谱仪器的使用方面给予了帮助,特此感谢.

#### 参 考 文 献

- [1] 陆婉珍,袁洪福,徐广通,等.现代近红外光谱分析技术[M].北京:中国石化出版社,2000.  
LU W Z, YUAN H F, XU G T, et al. Modern near infrared spectroscopy analysis[M]. Beijing: China Petrochemical Press, 2000.
- [2] HOFFMEYER P, PEDERSEN J G. Evaluation of density and strength of Norway spruce wood by near infrared reflectance spectroscopy [J]. Holz als Roh- und Werkstoff, 1995, 53(2): 165-170.

- [ 3 ] GIERLINGER N, SCHWANNINGER M, HINTERSTOISSER B, et al. Rapid determination of heartwood extractives in *Larix* sp. by means of fourier transform near infrared spectroscopy [J]. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 2002, 10(3): 203-214.
- [ 4 ] THUMM A, MEDER R. Stiffness prediction of radiata pine clearwood test pieces using infrared spectroscopy [J]. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 2001, 9(3): 117-122.
- [ 5 ] RIALS T G, KELLEY S S, SO C L. Use of advanced spectroscopic techniques for predicting the mechanical properties of wood composites [J]. *Wood and Fiber Science*, 2002, 34(3): 398-407.
- [ 6 ] SCHIMLECKL R, EVANS R. Estimation of microfibril angle of increment cores by near infrared spectroscopy [J]. *IWA Journal*, 2002, 23(3): 225-234.
- [ 7 ] KELLEY S S, RIALS T G, SNELL R, et al. Use of near infrared spectroscopy to measure the chemical and mechanical properties of solid wood [J]. *Wood Science and Technology*, 2004, 38(4): 257-276.
- [ 8 ] TSUCHIKAWA S, HAYASHI K, TSUTSUMI S. Nondestructive measurement of the subsurface structure of biological material having cellular structure by using near-infrared spectroscopy [J]. *Applied Spectroscopy*, 1996, 50(9): 1117-1124.
- [ 9 ] THYGESEN L G, LUNDQVIST S O. NIR measurement of moisture content in wood under unstable temperature conditions (I): Thermal effects in near infrared spectra of wood [J]. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 2000, 8(3): 183-189.
- [ 10 ] 江泽慧, 黄安民. 木材中的水分及其近红外光谱分析 [J]. *光谱学与光谱分析*, 2006, 26(3): 1464-1468.
- JIANG Z H, HUANG A M. Water in wood and its near infrared spectroscopic analysis [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2006, 26(3): 1464-1468.
- [ 11 ] 国家质量技术监督局. GB/T 15780 \ -1995 竹材物理力学性质试验方法 [S]. 北京: 中国标准出版社, 1995.
- The State Bureau of Quality and Technical Supervision. GB/T 15780 \ -1995 *Test methods for physical and mechanical properties of bamboos* [S]. Beijing: Standards Press of China, 1995.

(责任编辑 李文军)

## 《北京林业大学学报(社会科学版)》“影响因子”连续两年 位列农林医药类院校社会科学类学报之首

在2006年出版的《中国学术期刊综合引证报告》中,《北京林业大学学报(社会科学版)》2005年的“影响因子”位列我国农林医药类院校社会科学类学报之首,这是我校社科版连续两年在影响因子评价中排名第一。“影响因子”是国际上通行的期刊评价指标,一般来讲,“影响因子”越大,期刊的学术影响力和作用就越大。

《中国学术期刊综合引证报告》是由中国学术期刊(光盘版)电子杂志社、中国科学文献计量评价研究中心、清华大学图书馆对CNKI“中国知识资源总库”中最大的文献信息资源——“中国期刊全文数据库”所收录的各类学术期刊的引文数据进行规范化加工处理后,经统计分析编制而成的一部综合性的大型科学文献计量报告。该《报告》共收录各学科期刊6331种,是国内学术期刊文献计量和评价的权威著作。

我国农林医药院校的社会科学类学报共有22家,《北京林业大学学报(社会科学版)》创刊于2002年,是创刊较晚的学报之一。经过几年的努力,《北京林业大学学报(社会科学版)》获得了一定的发展,在2004年影响因子排名第一的基础上,2005年影响因子值进一步提高,继续位列农林医药类院校社会科学类学报之首。