

УСТАНОВЛЕНИЕ ВИДОВОЙ ПРИНАДЛЕЖНОСТИ ДРЕВЕСНЫХ ПОРОД С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА БИК-СПЕКТРОСКОПИИ

THE DETERMINATION OF THE WOOD SPECIES AFFILIATION USING THE NIR SPECTROSCOPY METHOD

A. H. Хох¹, В. Б. Звягинцев²

A. Khokh¹, V. Zviagintsev²

¹Научно-практический центр Государственного комитета
судебных экспертиз Республики Беларусь, г. Минск, Республика Беларусь

²Белорусский государственный технологический университет,
г. Минск, Республика Беларусь
npc@sudexpertiza.by

¹Scientific and Practical Centre of The State Forensic Examination Committee of The Republic of Belarus,
Minsk, Republic of Belarus

²Belarusian State Technological University,
Minsk, Republic of Belarus

В работе показана возможность применения метода молекулярной спектроскопии в ближней инфракрасной области для установления видовой принадлежности древесины. Предложена схема многомерного статистического анализа методом главных компонент, позволяющая осуществить дифференциацию 5 видов клена: *Acer pseudoplatanus* L., *Acer platanoides* L., *Acer campestre* L., *Acer rubrum* L. и *Acer saccharinum* L. Для обработки сигналов и анализа данных использовался пакет программного обеспечения The Unscrambler X компании CAMO.

This work shows the possibility of applying the near-infrared molecular spectroscopy method for wood species affiliation. The scheme of multidimensional statistical analysis by the method of the main components is proposed, which makes it possible to differentiate of 5 species of maple trees: *Acer pseudoplatanus* L., *Acer platanoides* L., *Acer campestre* L., *Acer rubrum* L. and *Acer saccharinum* L. For signal processing and data analysis, the CAMO software package was used.

Ключевые слова: древесина, БИК-спектроскопия, видовой принадлежность, метод главных компонент, режим диффузного отражения.

Keywords: wood, NIR spectroscopy, species affiliation, principal component analysis, diffuse reflection mode.

<https://doi.org/10.46646/SAKH-2020-1-310-313>

Установление видовой принадлежности древесины – это сложная задача, которая достаточно часто встает перед судебными экспертами, археологами, историками, товароведом, деревообработчиками и др. Классические методы макро- и микродиагностики, основанные на визуальной оценке, хорошо воспроизводимы для относительно небольшого круга местных или часто завозимых пород. Однако в мире существует более 14 тыс. видов растений, древесина которых имеет практическое использование. Объем заготовки древесины ежегодно возрастает, увеличиваются масштабы глобальной торговли лесоматериалами и продуктами их переработки. Эти тенденции проявляются и в Республике Беларусь. Несмотря на увеличение заготавливаемой в лесах республики древесной продукции более чем в два раза за последние 15 лет, увеличивается экспорт лесоматериалов и изделий, преимущественно из так называемых ценных пород – твердолиственных и тропических видов из многих регионов мира.

Увеличение объемов оборота лесных товаров, особенно из дорогостоящих редких и иноземных пород, требует поиска более технологичных, оперативных, точных, лишенных субъективности и репрезентативных методов видовой диагностики. Для решения этой задачи широкие перспективы имеют активно развивающиеся в последние годы методы спектроскопического анализа. Так, БИК-спектроскопические исследования древесины и древесных материалов позволяют при минимальных затратах времени и средств получить достаточно точную идентификацию вида древесной породы [1-3]. Экспресс-анализ древесины методом БИК-спектроскопии на сегодняшний день реализован в мире для большого количества видов, занесенных в Красный список угрожаемых видов Международного союза охраны природы (далее – МСОП), а также тех, импорт которых ограничен по экологическим основаниям и требует специального разрешения в соответствии с требованиями Конвенции о международной торговле видами дикой фауны и флоры, находящимися под угрозой уничтожения (далее – СИТЕС). В первую очередь это обусловлено тем, что растительный покров испытывает на себе антропогенное воздействие (вырубка лесов, осушение болот, загрязнение территории, пожары по вине человека).

Цель работы заключалась в изучении возможности использования БИК-спектроскопии в сочетании со статистическими методами анализа многофакторных зависимостей для установления видовой принадлежности лиственных пород древесины.

Объектами исследования являлись образцы древесины клена белого явора (*Acer pseudoplatanus* L.), клена остролистного (*Acer platanoides* L.), клена полевого (*Acer campestre* L.), клена красного (*Acer rubrum* L.) и клена сахаристого (*Acer saccharinum* L.) из ксилотеки кафедры и лесозащиты Белорусского государственного технологического университета. Стандартными для ксилотеки БГТУ образцами являются дощечки размером 20×60×150 мм (вдоль волокон).

Выбор для изучения рода Клен (*Acer*) был связан с тем, что он объединяет большое количество видов, древесина которых схожа между собой, а также тем, что среди твердолиственных пород древесина клена считается одной из самых ценных.

БИК-спектры регистрировали с помощью портативного БИК-спектрометра MicroNIR OnSite с диодно-матричным детектором (VIAMI, США) в режиме диффузного отражения. Следует отметить, что в спектральном диапазоне 950-1650 нм (10526-6060 см⁻¹) свет может проникать на несколько миллиметров вглубь образца. Это обстоятельство делает возможным использование т.н. диффузного отражения, в котором свет, проходящий через образец, рассеивается внутри него, отражается и, затем, детектируется. Таким образом, можно получать информацию не только о химическом составе, но и о физической структуре образца.

Для обработки сигналов и анализа данных использовался пакет программного обеспечения Unscrambler 10.4.1 (активационный ключ: MKCNDKKAQBNRZSMNTSNSKFBRMMZRKK) (CAMO, США) [4]. Для оценки полученных результатов были применены методы главных компонент (PCA). С целью изучения различий между образцами каждого вида были рассчитаны средние БИК-спектры. Перед этим с ними была проведена предварительная обработка, которая заключалась в вычислении производной второго порядка по методу Савицкого-Голея (с использованием 7 сглаживающих точек).

Для разработки классификационных моделей спектральные БИК-данные каждого вида были случайным образом разделены на тренировочный набор (750 спектров) и тестовый набор (150 спектров). В процедуре классификации каждый спектр обучающего набора подвергался оптимизации. Результаты показали, что существует три возможных результата классификации: (1) выборка принадлежит классу, (2) выборка принадлежит нескольким классам или (3) выборка не принадлежит классу. В проведенном нами исследовании второй результат был определен как мультиклассифицированный, а третий как неклассифицированный. Надежность классификации была оценена с использованием тестового набора. Для моделирования использовались 2 типа БИК-данных: исходные спектры и предварительно обработанные.

В таблице 1 показано оптимальное количество главных компонент и процент объединенной дисперсии для каждого из исследованных видов. Для необработанных спектров классификационные модели включали одну или две главные компоненты, а общая объясненная дисперсия каждой модели составляла около 99%.

Таблица 1 – Оптимальное количество главных компонент с процентом объясненной дисперсии

БИК данные (тип)	<i>Acer pseudoplatanus</i> L.		<i>Acer platanoides</i> L.		<i>Acer campestre</i> L.		<i>Acer rubrum</i> L.		<i>Acer saccharinum</i> L.	
	Число главных компонент	% объединенной дисперсии	Число главных компонент	% объединенной дисперсии	Число главных компонент	% объединенной дисперсии	Число главных компонент	% объединенной дисперсии	Число главных компонент	% объединенной дисперсии
Без обработки	2	99,33%	2	99,10%	2	99,28%	2	98,99%	1	98,98%
2-я производная (по Савицкому-Голею)	7	91,30%	9	91,11%	7	91,93%	8	90,54%	6	91,11%

Классификационные модели для каждого вида с использованием предварительно обработанных спектров были оценены как оптимальные, когда они имели 6-9 главных компонент, что объясняло около 96-98% от общей дисперсии. Это означает, что математическая предварительная обработка ослабила корреляцию необработанных БИК-данных, однако подчеркнула их индивидуализирующие признаки.

Для проверки работоспособности и эффективности рассчитанных предсказательных классификационных моделей рассчитывался процент истинных положительных результатов (далее – TP), истинных отрицательных результатов (далее – TN), ложных положительных результатов (далее – FP) и ложных отрицательных результаты (далее – FN).

Далее на основании вышеуказанных характеристик рассчитывались достоверность, точность и воспроизводимость предсказательных классификационных моделей по каждому из исследованных видов:

$$\text{Достоверность (\%)} = \frac{TP+TN}{TP+EP+FN+TN} \times 100\%, \quad (1)$$

$$\text{Точность (\%)} = \frac{TP}{TP+EP} \times 100\%, \quad (2)$$

$$\text{Воспроизводимость (\%)} = \frac{TP}{TP+EN} \times 100\%. \quad (3)$$

В таблице 2 представлены результаты классификации видов (матрица смешения) на основе необработанных спектров, для которых достоверность классификации составила 41,2%. Точность для каждого вида была в пределах 76,3-98,8%, а воспроизводимость в пределах 21-58%.

Таблица 2 – Матрица неточностей на основе классификационных моделей для каждого вида с использованием необработанных спектров

Фактические виды	<i>Acer pseudoplatanus</i> L.	<i>Acer platanoides</i> L.	<i>Acer campestre</i> L.	<i>Acer rubrum</i> L.	<i>Acer saccharinum</i> L.	Точность (%)
Прогнозируемые виды						
<i>Acer pseudoplatanus</i> L.	83	0	1	0	0	98,8
<i>Acer platanoides</i> L.	0	46	5	0	2	86,8
<i>Acer campestre</i> L.	1	5	32	0	1	82,1
<i>Acer rubrum</i> L.	4	1	0	87	2	92,6
<i>Acer saccharinum</i> L.	10	1	2	7	61	76,3
Не классифицировано	41	42	36	40	23	-
Мультиклассифицировано	22	57	73	18	61	-
Всего	150	150	150	150	150	-
Воспроизводимость (%)	55	31	21	58	41	-
Достоверность (%)	41,2					

В таблице 3 приведены результаты классификации видов на основе предварительно обработанных спектров (2-я производная по Савицкому-Голею). Достоверность классификации в данном случае составила 85,0%, точность для каждого вида – от 98,4 до 100,00%, а воспроизводимость в свою очередь от 79 до 88%. Исходя из полученных результатов, можно констатировать, что достоверность, точность и воспроизводимость были значительно улучшены после предварительной обработки «сырых» спектров.

Таблица 3 – Матрица неточностей на основе классификационных моделей для каждого вида с использованием обработанных спектров (вычисление 2-й производной по Савицкому-Голею)

Фактические виды	<i>Acer pseudoplatanus</i> L.	<i>Acer platanoides</i> L.	<i>Acer campestre</i> L.	<i>Acer rubrum</i> L.	<i>Acer saccharinum</i> L.	Точность (%)
Прогнозируемые виды						
<i>Acer pseudoplatanus</i> L.	132	0	0	0	0	100
<i>Acer platanoides</i> L.	0	119	1	0	0	99,2
<i>Acer campestre</i> L.	2	0	125	0	0	98,4
<i>Acer rubrum</i> L.	0	0	0	131	0	100
<i>Acer saccharinum</i> L.	0	0	0	0	129	100
Не классифицировано	10	23	13	17	12	-
Мультиклассифицировано	6	8	11	2	9	-
Всего	150	150	150	150	150	-
Воспроизводимость (%)	88	79	83	87	86	-
Достоверность (%)	85					

Таким образом, в данном исследовании были изучены потенциальные возможности БИК-спектроскопии для дифференциации 5-ти видов клена. Полученные результаты показали, что благодаря неразрушающему характеру измерений, высокой скорости анализа и минимальной пробоподготовке образцов метод может эффективно использоваться при проведении судебно-экспертных исследований древесины. Основываясь на полученных результатах, можно с уверенностью констатировать, что метод хорошо подходит для решения

классификационных задач, связанных с установлением видовой принадлежности. Учитывая даже незначительные различия в химическом составе деревьев, он оказался эффективным инструментом для разделения древесных пород. В дальнейшем возможности метода БИК-спектроскопии для идентификации породы дерева могут быть расширены путем:

- увеличения количества измерений;
- исключения влияния времени: хранение, старение, окисление;
- количественной оценки / дифференциации вклада естественной изменчивости древесины, условий произрастания, генетики и др. [5].

ЛИТЕРАТУРА

1. *Lazarescu, C.* Wood species identification by near-infrared spectroscopy / A. Russ, M. Firesova, J. Gigac // International Wood Products Journal. – 2017. – V. 8. – №. 1. – P. 32-35.
2. *Pace, J. H. C.* Wood species identification from Atlantic forest by near infrared spectroscopy / J. H. Pace [et al.] // Forest systems. – 2019. – V. 28. – №. 3. – P. 3.
3. *Nisgoski, S.* Potential use of NIR spectroscopy to identify *Cryptomeria japonica* varieties from southern Brazil / S. Nisgoski [et al.] // Wood Science and Technology. – 2016. – V. 50. – №. 1. – P. 71-80.
4. *Kessler, W.* A Handy Tool for Chemometrics: The Unscrambler X / W. Kessler // Scientific Computing. 2010. Vol. 27, issue. 4.–13 p.
5. *Sandak, A.* Relationship between near-infrared (NIR) spectra and the geographical provenance of timber / A. Sandak, J. Sandak, M. Negri // Wood science and technology. – 2011. – V. 45. – №. 1. – P. 35-48.

ОЦЕНКА ФИТОТОКСИЧНОСТИ, ЗАГРЯЗНЕННЫХ НЕФТЕПРОДУКТАМИ ПОЧВ, ПРИ ИХ БИОРЕМЕДИАЦИИ EVALUATION OF PHYTOTOXICITY OF SOILS CONTAMINATED BY OIL PRODUCTS, UNDER THEIR BIOREMEDIATION

A. С. Чердакова, С. В. Гальченко, Н. В. Сарайкина
A. Cherdakova, S. Galchenko, N. Saraikina

Рязанский государственный университет имени С.А. Есенина, г. Рязань, Российская Федерация
cerdakova@yandex.ru

Ryazan State University named S.A. Yesenin, Ryazan, Russian Federation

Приводятся результаты экспериментальной оценки степени детоксикации, загрязненных различными нефтепродуктами почв, при их микробиологической ремедиации. Степень детоксикации почв оценивалась по уровню их фитотоксичности. Результаты исследований показали, что осуществление биоремедиационных мероприятий с использованием микробиодеструкторов не позволяет осуществить полную детоксикацию почвы, загрязненной нефтепродуктами. Материалы подготовлены в рамках реализации гранта РФФИ и Правительства Рязанской области № 18-45-623003 р_мол_а «Исследование влияния биоПАВ на основе гуминовых веществ на процессы микробиологической ремедиации природных сред, загрязненных нефтепродуктами».

The results of an experimental assessment of the degree of detoxification of soils contaminated with various oil products during their microbiological remediation are presented. The degree of soil detoxification was evaluated by the level of their phytotoxicity. The research results showed that the implementation of bioremediation measures using microbiodestructors does not allow complete detoxification of soil contaminated with oil products. The materials were prepared under the grant of the RFBR and the Government of the Ryazan Region No. 18-45-623003 r_mol_a «Study of the effect of bio-surfactants based on humic substances on the processes of microbiological remediation of natural environments contaminated with oil products».

Ключевые слова: загрязнение почвы, нефтепродукты, биоремедиация, фитотоксичность, биотестирование, гуминовые вещества.

Keywords: soil pollution, petroleum products, bioremediation, phytotoxicity, biotesting, humic substances.

<https://doi.org/10.46646/SAKH-2020-1-313-316>

Для современного этапа развития общества характерен перманентный рост объемов производства и потребления различных нефтепродуктов. Так, по состоянию на 2018 год на их долю приходилась подавляющая часть совокупного потребления энергии, а мировые объемы производства за последние 25 лет выросли более чем на 35 % [1].