



## Woodiconf-05

# معرفی راهکار غیرمخرب برای شناسایی چوب ها به وسیله تکنیک آنالیز مادون قرمز

محمد پناهی فتمه سری<sup>۱</sup>، حسن قانع فشتالی<sup>۲</sup>

۱. دانشجوی کارشناسی ارشد رشته مهندسی صنایع چوب و فرآورده های سلولزی، دانشگاه شهید رجایی تهران

Email: panahimohammad1998@gmail.com

۲. دانشجوی کارشناسی ارشد رشته مهندسی صنایع چوب و فرآورده های سلولزی، دانشگاه شهید رجایی تهران

Email: hassan118gf@gmail.com

## چکیده

تحقیق جاری یک راهکار سریع و غیر مخرب برای شناسایی چوب بوسیله تکنیک آنالیز مادون قرمز تبدیل فوریه بازتاب بکلی ضعیف شده با روش های کمومتری ارائه می کند. پتانسیل طیف سنجی ATR-FTIR همراه با روش های شیمی سنجی برای تمایز نمونه های چوب بررسی می شود. تمایز نمونه های چوب ابتدا با تجزیه و تحلیل دسته ای سلسله مراتبی و سپس تجزیه و تحلیل اجزای اصلی به دست می آید. هر دوی این روش ها تبعیض بسیار معنی داری از نمونه های چوب را فراهم می کنند. PCA جدایی کامل بین طبقات را نشان داد در حالی که HCA تنها تا ۸۱٪ از نمونه ها را جدا می کند. تأیید متقابل مدل PCA گسترش یافته، جداسازی و شناسایی دقیق نمونه های چوب ناشناخته را آسان می کند. روش 87.5% LDA طبقه بندی صحیح همه نمونه های چوب ناشناخته را با استفاده از معادلات تابع متمایز گسترش یافته ارائه می دهد. بنابراین، روش ارائه شده شناسایی قوی هر دو دسته از نمونه های چوب را به همراه خصوصیات طیفی اجزای چوب فراهم می کند. روش گسترش یافته را می توان برای ساخت پایگاه داده طیفی بزرگ تر ATR-FTIR از نمونه های چوب برای شناسایی در محل استفاده کرد.

**واژه های کلیدی:** چوب، روش های شیمی سنجی، تجزیه و تحلیل اجزای اصلی، شناسایی دقیق نمونه های چوب ناشناخته.

## مقدمه

بیست و چهار نمونه چوب تازه تهیه شد. در مجموع، شانزده چوب سخت و هشت چوب نرم برای تحقیق جاری جمع آوری شد. مشخصات نمونه های چوبی، یعنی شناسه نمونه، نام مرسوم و همچنین نام علمی، تراکم چوب، رنگ چوب و کاربرد آنها و غیره در جدول ۱ آمده است. نمونه روکش ها از انواع روکش انتخاب شده اند. انواع مورد استفاده در تولید مبلمان چوبی، درهای داخلی چوبی و مصنوعات چوبی با روکش چسب. سوراخ ریز تمام روکش های جمع آوری شده (فقط سطح کوچک) به



منظور بدست آوردن یک چوب پودری یکنواخت (مخلوطی از چوب صنوبر و چوب دل) انجام شد. سپس این نمونه های چوب پودری تحت IR در اسپکتروفتومتر ATR-FTIR اسکن شدند.

لازم به ذکر است که نمونه برداری با پوشیدن دستکش لاتکس انجام شد و هر نمونه جمع آوری شده در شرایط محیطی یکسان در پاکت لمینت نگهداری شد تا از هر گونه آلودگی بیرونی و همچنین به حداقل رساندن تفاوت های ناشی از شرایط مختلف محیطی جلوگیری شود. هشت نمونه چوب (غیر از ۲۴ نمونه اصلی مورد استفاده در این تحقیق) یعنی W1 تا W8 [به طور تصادفی از گونه هایی که در جدول ۱ فهرست شده اند؛ انتخاب شده اند] نیز با استفاده از همین روش مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفتند.

جدول ۱: فهرست نمونه های چوب تهیه شده در مطالعه حاضر

نمونه ID	نام عادی	نوع چوب	غلظت	سختی سطح چوب MPa	منشا چوب	رنگ چوب		شاخص چوب	برنامه های کاربردی
						چوب دل و	چوب صنوبر		
H 1	گردو	Juglans regia	660	72	اوراسیا	خاکستری قهوه ای خاکستری سیاه، ماکروسپورها	عرض باریک ۱-۳ سانتی متر، خاکستری-سفید	بافت یکنواخت و سختی مناسب بازده، صاف سطح	مبلمان و کارهای تزئینی، روکش برای سلاح،
H 2	گیلاس	Cerasus avium Prunus avium	570		اروپای میانه	گرم مایل به قرمز مایل به قهوه ای	رنگ پریده، کاملاً متمایز	بافت نسبتاً خوب است، دانه ها متفاوت است و رگه های زیادی دارد، مرز تیز بین لاتوود و چوب اولیه	مقالات از مبلمان، صندلی و نوازنده سازها
H 3	افرا	Acer platanoides	630	75	کانادا	سفید با ته مایل به قرمز و قهوه ای	سفید و کرمی سفید براق عرض باریک	بافت یکنواخت، دانه مستقیم ریز، انقباض زیاد مرز تیز بین latewood و چوب اولیه	محصولات چوبی کوچک، ونیرها، کفپوش های چوبی
H 4	آدلر	Alnus glutinosa	495	40	آمریکا	هیچ تفاوتی شناسایی نشده است که کم رنگ تا قهوه ای مایل به قرمز روشن است		شکلی کاملاً مشخص، وجود پرتوهای بزرگ، چوب مستقیم	هیچ تفاوتی شناسایی نشده است که کم رنگ تا قهوه ای مایل به قرمز روشن است
H 5	Pear	Parus communis	700	79	اروپای میانه	هیچ تفاوت ورقی بین چوب صنوبر و چوب قلب وجود ندارد		رنگ قهوه ای کم رنگ تا قهوه ای مایل به قرمز، هسته تیره تر، سطح صاف مات است	محصولات چوبی کوچک، روکش برای مبلمان
H 6	Oak (red)	Quercus rubra	680	67,5	اروپای میانه	قهوه ای روشن تا تیره	زرد روشن و قهوه ای روشن	مرز تیز بین latewood و چوب اولیه، گره های بزرگ	مبلمان چوبی



**اولین همایش ملی فناوری های نوین در سازه های چوبی و مهندسی مبلمان با رویکرد فنی و مهارتی**  
**۱۴۰۲ آذر ۲۸**  
**ایران - تهران**

H 7	Ash	Fraxinus excelsior	670	80	اروپا	زرد، سرخ	قهوه ای روشن تا قهوه ای	مرز تیز بین latewood و چوب اولیه، اشاره، چوب دانه موج	خاصیت ارتجاعی خوب، به ویژه ابزارهای ورزشی چوب سخت
H 8	گردو آمریکا	Juglans nigra			آمریکای شمالی	نسبتاً سنگین، نسبتاً سخت، قوی از قهوه ای تیره پررنگ با ته مایل به ارغوانی	رنگ پریده تر و در عرض متفاوت است	چوب نسبتاً صاف، اما فرفری دانه دار، به خوبی شکل گرفته است	کابینت مبلمان، کارهای تزئینی داخلی
H 9	راش	Fagus sylvatica	685	61	اروپا و آمریکای شمالی	مایل به صورتی، قهوه ای مایل به قرمز (چوب بخار شده قرمز رنگ)،	هسته کاذب	حلقه های ری کاملاً واضح است	مبلمان، صندلی خمیده، روکش، تخته سه لا
H 10	افاقیا	Robinia pseudoacacia	760	97	آمریکای شمالی	زرد، سبز-رنگ قهوه ای	زرد، سفید عرض باریک (۱-۳) سانتی متر	مرز تیز بین چوب های سخت و چوب صنوبر	مبلمان در فضای باز و کاربرد، چوب عمر طولانی
H 11	چوب رز /برادی	Dalbergia sissoo			هند	قهوه ای تا بنفش تیره با رگه ها و رگه های سیاه	چوب صنوبر باریک به رنگ زرد مایل به سفید کم رنگ با بنفش برافروخته شده است	سطح مات است، دانه ها به ندرت صاف هستند، حلقه های رشد مبهم هستند، اندازه منافذ از داخل به قسمت بیرونی هر حلقه کاهش می یابد.	روکش کابینت و اجناس فانتزی
H 12	ریشه بلوط	Quercus robur	680	67,5	اروپای میانه	قهوه ای روشن تا تیره	زرد روشن و قهوه ای روشن	حلقه های سالانه غیر قابل تشخیص و الیاف چوبی قابل مشاهده	مبلمان چوبی
H13	زیرانو	Azadirachta indica	740		کامرون های غرب آفریقا	زرد کرمی رگه ای یا راه راه با قهوه ای بسیار تیره یا سیاه	رنگ پریده متمایز از چوب قلب	حلقه های رشد به خوبی مشخص شده اند و منافذ متعدد هستند، پرتوها با نام برهنه قابل مشاهده نیستند، تضادهای قوی	مبلمان با جذاب و بسیار تزئینی،
H 14	توس	Betula pendula	610	66	شمال اروپا	سفید و قهوه ای روشن بدون هیچ گونه تمایز واضحی بین چوب صنوبر و چوب دل	دانه مجعد و تمایل مشخص به پارگی دانه ایجاد می کند	سفید کثیف، سفید-زرد، حلقه های رشد بزرگ، رگه های کمی متمایز است	مبلمان - کمد
H 15	آسپن	Populus tremula	450		اوراسیا	مرز بدون کنتراست بین hd	قهوه ای روشن، سبز-قهوه ای	خشک شدن خوب، رنگ آمیزی تی	
H 16	ساقه صنوبر	Populus alba	390		اروپا	سفید،	قهوه ای روشن، سبز-قهوه ای	مبلمان، ساخت و ساز بر اساس چوب	
S 1	صنوبر	Picea abies	420	26	اروپا	بدون چوب سخت و چوب صنوبر، رنگ چوب زرد-سفید تا زرد-قهوه ای روشن است	حلقه های رشد متقارن باریک و قابل دیدن کانال رزینی	سازه های چوبی، روکش ها	
S 2	کاج	Pinus longifolia	505	28,5	اوراسیا	قرمز قهوه ای تیره و قهوه ای	مایل به زرد، مایل به قرمز کم رنگ،	پوست درخت کاج کوک در صفحات یا نوارهای نازک کاغذ مانند جدا می شود و	درخت زینتی، مبلمان محصولات چوبی
S 3	Captain cook's pine	Araucaria cookii	450		کالدونیای جدید	قهوه ای روشن، گاهی اوقات با رنگ زرد یا قرمز			



							زبر، خاکستری و صمغی است.	
S 4	سرو طاس	Taxodium mucronatum			آمریکای جنوبی	قهوه ای طلایی یا قهوه ای نارنجی	شبه سفید	چوب اولیه کم رنگ و کدرتر و چوب دیررس است، سطح چوب نسبتاً چسبنده و چرب است.
S 5	درخت عرعر	Juniperus p oce a	520		آمریکا شمالی	زرد قهوه ای به قهوه ای بنفش	رنگ زرد-سفید	سطح کاملاً مشخص شده ظاهر کمی براق مرز تیز بین چوب های سخت و چوب صنوبر، حلقه های رشد تکان دهنده
S 6	کاج بونیا	Araucaria bidwillii	460-530		نیوزیلند			زرد کم رنگ و کمی صورتی با بافت یکنواخت و حلقه های رشد کم رنگ. شبیه کاج
S 7	سرو گریان	Cuoressus funebris	650		چین	چوب درخت سرو گریان دارای رنگ قهوه ای مایل به زرد است و گاهی اوقات کمی قرمز است.	چوب صنوبر از نظر ظاهری کم رنگ تر است	پوست صاف، قهوه ای. شاخه ها کم و بیش افقی یا به سمت بالا هدایت می شوند
S 8	کاج کانوری کوئینزلند	Agathis robusta			نیوزیلند			سطح نرم کننده، دانه ها

اسپکتروفتومتر «ATR-FTIR (Perkin Elmer) Spectrum Two» حاوی کریستال الماس ATR برای اسکن نمونه های چوب با ناحیه طیفی IR 400-4000 سانتی متر-۱ استفاده شد. فشار ثابت به نمونه های چوبی با لایه نازک با کمک یک دستگیره وارد شد. تمیز کردن یک کریستال الماس پس از هر اسکن توسط متانول خشک انجام شد. میانگین داده های طیفی هر نمونه با شانزده اسکن برای تجزیه و تحلیل شیمی سنجی استفاده شد. یکدست کردن، تنظیمات پایه و نرمال سازی (روش SNV) برای تمام طیف ها انجام شد.

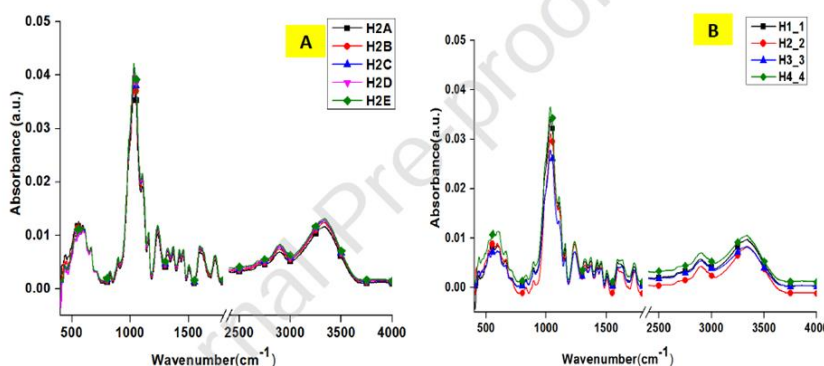
**فیلتر کردن:** این راه حل نویز سیگنال پیش تصفیه شده و مجموعه داده را به میزان زیادی حذف می کند. فیلتر های مختلفی برای فیلتر کردن طیف ها موجود است، به عنوان مثال. FFT، Savitzky-Golay و ... اخیراً الگوریتم های فیلتر داخلی در خود نرم افزار ابزارهای مختلف ارائه می شود. لازم به ذکر است که فیلتر کردن بیش از حد داده ها ممکن است باعث از دست رفتن برخی از اطلاعات اساسی از مجموعه داده شود. بنابراین، برای رهایی از نویز از طیف نمونه های چوب، از روش فیلترینگ داخلی در تحقیق جاری استفاده می شود.

**تنظیم پایه:** جابجایی در نقطه مبنا تقریباً در همه انواع تجهیزات تحلیلی به ویژه در اسپکتروفتومترها مشاهده می شود. ما از یک فیلتر چند جمله ای برای به دست آوردن نقطه مبنای مستقیم استفاده کرده ایم. این عملکرد در نرم افزار اسپکتروم اسپکتروفتومتر Perkin Elmer ATR-FTIR موجود است. مجموعه داده نهایی از طیف ها با خط پایه تصحیح شده جمع آوری می شود و در مدل سازی ریاضی استفاده می شود.

یک ورقه نازک از نمونه چوب نیز با استفاده از یک راهکار مشابه تجزیه و تحلیل شد. با این حال، طیف نمونه چوب پودر شده وضوح بیشتری نسبت به نمونه چوب روکش سالم دارد و دلیل این خروجی ممکن است همگنی و تماس نمونه پودر صاف شده با کریستال الماس باشد.



تکرارپذیری با اسکن نمونه چوب پودری پنج بار تحقیق شده و در شکل ۱ (الف) نشان داده شده است. تکرارپذیری نیز با اسکن یک نمونه واحد در زمان های مختلف به مدت چهار روز متوالی پی در پی ارزیابی می شود. طیف ها دقیقاً بدون تغییر با یکدیگر اشتراک دارند. تنوع درون گونه ای ابزار چوب نیز با تجزیه و تحلیل چهار نمونه روکش جمع آوری شده از چهار مکان مختلف همان نمونه مورد بررسی قرار گرفت و در شکل ۱ (ب) نشان داده شده است.



شکل ۱- تکرارپذیری با اسکن نمونه چوب پودری

نتیجه تکرارپذیری خوب ابزار ATR-FTIR را نمایش می دهد زیرا بازه های مشخصه هر طیف با یکدیگر اشتراک دارند. انحراف معیار در مقادیر جذب هر پنج اسکن در طیف کامل طیف محاسبه شد و میانگین حاصل  $0.0045 \pm 0.5$  است که قابل توجه است.

## آمار چند متغیره

در تحقیق جاری، از دسته بندی مرکز سلسله مراتبی با فاصله اقلیدسی مجذور برای گسترش دسته ها استفاده شد (Li et al, 2015; Moller et al, 2005). تجزیه و تحلیل دسته ای سلسله مراتبی (HCA) برای همه مجموعه داده های همه نمونه های چوب از بازه ۵۰۱-۴۰۰ سانتی متر-۱ (به استثنای ۱۸۰۱-۲۴۰۰ سانتی متر-۱، زیرا هیچ قله ای در این منطقه وجود نداشت) استفاده می شود.

تجزیه و تحلیل عوامل اصلی بر روی داده های طیفی ATR-FTIR تمام ۲۴ نمونه برای محدوده کامل انجام می شود. برای تجزیه و تحلیل عوامل اصلی (PCA) دو تست پیش نیاز، یعنی تست های کرویت Kaiser Meyer Olkin (KMO) و بارتلت از طریق SPSS انجام می شود تا کامل بودن مجموعه داده ها ارزیابی شود (اگر مقدار  $KMO \geq 0.5$  تا  $1.0 \geq p$  باشد. مقدار برای بارتلت  $> 0.05$  است). ما PCهایی را انتخاب کردیم که مقادیر ویژه آنها برای تفسیر نتایج  $1 \leq$  بود. در قالب یک نمودار پراکندگی، ارتباط بین متغیرها را نشان می دهد و همچنین سهم هر متغیر را در تمایز/دسته بندی نمونه مورد ارزیابی قرار می دهد (Brereton, 2003; Sharma & Kumar, 2018).

تست تحلیل واریانس پتانسیل هر متغیر غیروابسته را برای گسترش مدل نهایی اندازه گیری می کند. در این تست، اگر مقدار  $p$  به دست آمده بیش از ۰.۱۰ باشد، متغیرهای غیروابسته به خوبی به مدل کمک نمی کنند. لامبدای ویلکس برای ارزیابی اینکه آیا بین میانگین گروه های نمونه شناسایی شده طبق ترکیب متغیر وابسته تفاوت وجود دارد یا خیر استفاده می شود. این تست امکان انتخاب بهترین پیش بینی کننده متغیر دسته بندی را فراهم می کند.

در روش های ارزیابی شده، LDA پرکاربردترین راهکار برای دسته بندی اشیا است. روش گام به گام با روش لامبدای ویلکس در تحقیق جاری برای دسته بندی نمونه های چوب استفاده شد (McLachlan, 2004). کلیه تجزیه و تحلیل های آماری با استفاده از نرم افزار SPSS-20 (IBM) انجام شد.

## قدرت تبعیض آمیز



اولین بار به وسیله اسمالدون و موفات (۱۹۷۳) شرح داده شد. ایده استفاده از قدرت تمایز (DP) تمایز جفتی نمونه‌های چوب بر اساس ویژگی‌های طیفی آنها بود. قدرت تمایز با فرمول زیر محاسبه شد.

$$\text{Discriminating Power} = \frac{\text{No. of discriminated sample pairs}}{\text{No. of possible sample pairs}} \times 100$$

## نتایج و بحث

### ویژگی های طیف چوب

طیف های ATR-FTIR نمونه های چوب سخت و چوب نرم در شکل ۲ نمایش داده شده است. تخصیص طیفی اصلی ترکیبات آلی/غیر آلی چوب در جدول ۲ فهرست شده است. پیچیدگی چوب باعث پیک های معین زیادی در ناحیه اثر انگشت طیف شده است. اختصاص دادن تمام عوامل طیفی به اجزای آنها چالش برانگیز است. در تحقیق جاری بوسیله استانداردهای موجود، کتابخانه نرم افزاری و ادبیات منتشر شده، حداکثر تعداد پیک به عوامل شیمیایی چوب اختصاص داده شده است.

جدول ۲- تخصیص باند طیفی پیک های طیفی اصلی مشاهده شده در طیف های چوبی [ATR-FTIR [14-15, 24, 40-42]

اجزا	تکالیف گروه	فرکانس (cm <sup>-1</sup> )
مرطوب	کشش OH در هیدروکسیل ناشی از محتوای رطوبت است	3359
سلولز	پیوند هیدروژنی بین مولکولی و درون مولکولی	3337
سلولز	متیل و متیلن گروه کشش CH	2922
	کشش نامتقارن CH	2885
همی سلولز و لیگنین	کشش C=O در کربونیل، غیر کونژوگات d k تون و گروه های آلیفاتیک زایلان. ارتعاش C=O در کتون ها، و آلدئیدها در h mic llulos، استرها (در لیگنین).	1740-1730
سلولز و لیگنین	ارتعاشات خمشی جذب شده OH و کشش مزدوج CO d به حلقه مزدوج شده است	1642
سلولز یا لیگنین	-COO- کششی، جذب O-H و C-O مزدوج	1635
لیگنین	C=O کشش، C=C چرخه های آروماتیک در واحدهای سیرنگیل	1611
لیگنین	ارتعاش اسکلتی معطر برای واحدهای S به اضافه کشش C=O	1594
لیگنین	کشش C=C در چرخه ؛ ارتعاشات اسکلتی در حلقه های گواپاسیل	1510-1505
همی سلولز و لیگنین	کشش تغییر شکل CH <sub>2</sub> ، ارتعاشات خمشی HCH، OCH (در صفحه)، تغییر شکل CH	1455
همی سلولز و لیگنین	ارتعاشات اسکلتی معطر، خمش متقارن CH <sub>2</sub> و CH	1423
همی سلولز و لیگنین	تغییر شکل CH، کشش آلیفاتیک CH در گروه فنل و متیل	1370
سلولز	کشش O-H، C-N	1333
سلولز	لرزش گهواره ای CH <sub>2</sub>	1320
لیگنین	کشش حلقه guaiacyl و OCO کشش CO در لیگنین	1263
لیگنین	کشش C-O-C پیوند فنل-اتر در لیگنین	1233
همی سلولز و لیگنین	کشش متقارن C-O-C در حلقه های پیرانوز، کشش C=O در گروه های آلیفاتیک	1157
پلی ساکارید	ارتعاش ظرفیت نامتقارن حلقه	1105
همی سلولز و لیگنین	تغییر شکل C-O در الکل های اولیه، به علاوه C=O کشش C-H تغییر شکل در صفحه n، به علاوه آروماتیک	1032
همی سلولز و لیگنین	کشش CO	1020
سلولز، همی سلولز و لیگنین	کشش C-H از صفحه از حلقه گلوکز، حلقه guaiacyl	895
	کشش C-H از صفحه حلقه	831
همی سلولز	گلوکومانان	808



## تفاوت چوب سخت و چوب نرم

چوب نرم و چوب سخت در ترکیب شیمیایی خود با شکل های متفاوت اجزای لیگنین مانند بخش های پروپان گویاسیل یا سیرینگیل، همی سلولزها مانند زایلان، گلوکومانان و ترکیبات مانوز و مواد استخراجی چوب متفاوت هستند (Blanchette et al, 1994; Ramage t al, 2017). باز هم، وجود لیگنین، حدود ۵-۱۰٪ در چوب نرم در مقایسه با چوب سخت بیشتر است. به طور یکسان، اندازه سلولز در چوب نرم ۴۰ تا ۵۰ درصد بیشتر از چوب سخت است. البته، امکان دارد همی سلولز کمتری در چوب نرم نسبت به چوب سخت پیدا شود.

دسته های مقایسه ای ATR-FTIR از چهار نوع چوب در شکل تکمیلی S1 نمایش داده شده است. از این شکل پیدا است که بعضی از تفاوت های طیفی بین نمونه های چوب سخت و چوب نرم مشاهده می شود، به عنوان نمونه، پیک ۱۲۳۰ سانتی متری ناشی از لیگنین سیرینگیل هم در نمونه های چوب سخت و هم در نمونه های چوب نرم وجود دارد. البته، اکثر آن در ۱۲۷۰ سانتی متر-۱ ناشی از لیگنین تنها در نمونه های چوب نرم وجود دارد. مجدداً، در نواحی طیفی ۸۰۰ سانتی متر تا ۹۰۰ سانتی متر، پیک ۸۱۰ سانتی متر به گلوکومانان نسبت داده می شود و در چوب نرم وجود دارد، در حالی که اکثر آن در ۸۳۰ سانتی متر به CH تعلق داده می شود که خارج از صفحه آروماتیک است. دوایر در چوب های سخت وجود دارد. بنابراین، از این یافته ها، نتیجه گیری می شود که لیگنین چوب نرم از واحدهای گویاسیل ایجاد شده است در حالی که لیگنین چوب سخت به طور کلی شامل واحدهای گایاسیل و سیرینگیل است.

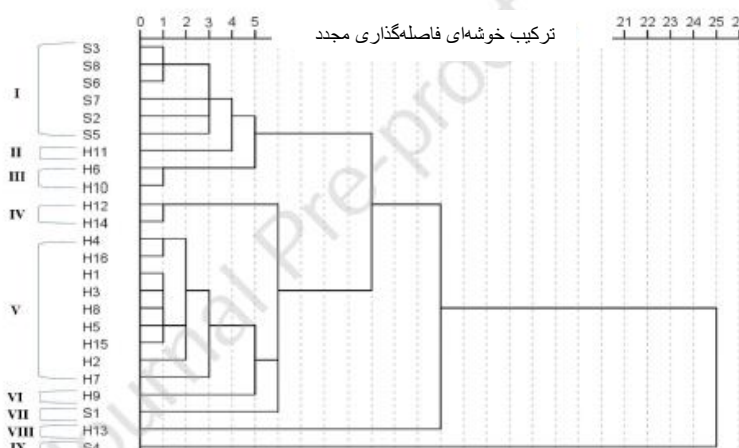
## اختلاف چند متغیره

### تجزیه و تحلیل دسته بندی سلسله مراتبی (HCA)

مشاهده می شود که بعضی از نمونه های چوب (بین متغیری) با مقایسه طیفی متمایز نمی شوند. روش HCA با کمک یک راهکار محاسباتی، دسته بندی یک مجموعه داده بزرگ را به شکل تجمعی ایجاد می کند. با افزایش فاصله تراکمی، اجسام طبق شباهت ها / عدم تشابهات نسبی خود شروع به یکی شدن می کنند. برنامه انباشته در مورد فاصله و مراحل که در آن ادغام آغاز می شود، نشان می دهد. بنابراین، در خروجی تجزیه و تحلیل HCA، یک نمودار بین تعداد دسته ها در مقابل ایجاد می شود. فاصله تجمعی (فاصله ادغام) همانطور که در شکل تکمیلی S2 نمایش داده شده است. این نمودار به تقریب تعداد دسته های موجود در مجموعه داده کمک می کند (Anandarajan et al, 2019).

در این طرح، یک شروع شدید پس از چند مرحله اولیه مشاهده می شود. در پله پانزدهم نمونه های چوبی افزایش شدیدی وجود دارد. تعداد کل دسته با کم کردن مقدار مرحله (حداکثر افزایش مشاهده می شود) از تعداد کل مراحل مشخص می شود. بنابراین، به عدد نه می رسد. با این حال، الگوی اساسی فاصله تجمعی به خوبی در هر تحلیل دسته بندی مناسب نیست. بنابراین، تعداد خوشه ها توسط نمودار دندروگرام همانطور که در شکل ۳ نشان داده شده است تقریب زده می شود. دندروگرام یک ساختار درخت مانند است که از نظر آماری نمایش دهنده یک فاصله تجمعی مجدد است که در آن خوشه بندی و ادغام نمونه های چوب آغاز می شود، همانطور که در شکل ۳ نشان داده شده است. نرم افزار SPSS ضریب فاصله را از محدوده ۰ تا ۲۵ تغییر مقیاس داد.





شکل ۳- تعداد خوشه ها توسط نمودار دندروگرام

در این دسته بندی، نمونه های چوبی که دارای ویژگی های طیفی، ترکیبات شیمیایی یا کلاس یکسانی هستند، در یک گروه و بالعکس دسته بندی می شوند. بنابراین، روش های آماری ترکیبی نشان داد که کلیه نمونه های چوب در ۹ خوشه مختلف پخش می شوند که ممکن است شامل انواع یکسانی از نمونه های چوب باشد که یا از یک طبقه / خانواده نشأت گرفته اند یا دارای ترکیب شیمیایی یکسانی از چوب هستند و در جدول ۳ خلاصه شده اند.

جدول ۳- طبقه بندی نمونه های چابی به خوشه های مربوطه به همراه تعداد کل نمونه های بدون تبعیض

تعداد جفت نمونه تفکیک نشده است	خانواده چوب	Sample ID	تعداد نمونه های چوب در خوشه خاص	خوشه ها
15	<i>Pinus longifolia, Au aucaria cooki, Juniperus procera, Araucaria bidwillii, Cuoressus funebris, Agathis robusta</i>	S2, S3, S5, S6, S7, S8	6	خوشه I
0	<i>Dalb rgia sissoo</i>	H11	1	خوشه II
1	<i>Qu rcus rubra, Robinia pseudoacatia</i>	H6, H10	2	خوشه III
1	<i>Quercus rubra, Betula pendula</i>	H12, H14	2	خوشه IV
36	<i>Juglans regia, Cerasus avium, Acer platanoides, Alnus glutinosa, Parus communis, Fraxinus excelsior, Juglans nigra, Populustremula, Populus alba</i>	H1, H2, H3, H4, H5, H7, H8, H15, H16	9	خوشه V
0	<i>Fagus sylvatica</i>	H9	1	خوشه VI
0	<i>Picea abies</i>	S1	1	خوشه VII
0	<i>Astronium</i>	H13	1	خوشه VIII
0	<i>Taxodium mucronatum</i>	S4	1	خوشه IX

از جدول پیدا است که هیچ یک از دسته ها نمونه های چوبی مخلوط را اشغال نمی کنند. دسته بندی نمونه های چوب از چوب های سخت و همچنین چوب های نرم است. بنابراین، تفاوت زوجی نشان می دهد که بیشتر نمونه های چوب از یکدیگر متمایز می شوند به جز ۵۳ جفت نمونه چوب که متعلق به دسته های مشابه هستند. این نمونه ها ممکن است دارای انواع یکسانی از ترکیبات شیمیایی باشند و بدین جهت غیر قابل تشخیص باقی می ماند. بنابراین، تفاوت جفتی برای نمونه های چوب ۸۱ درصد از قدرت تفاوت را از طریق الگوریتم HCA آسان می کند.

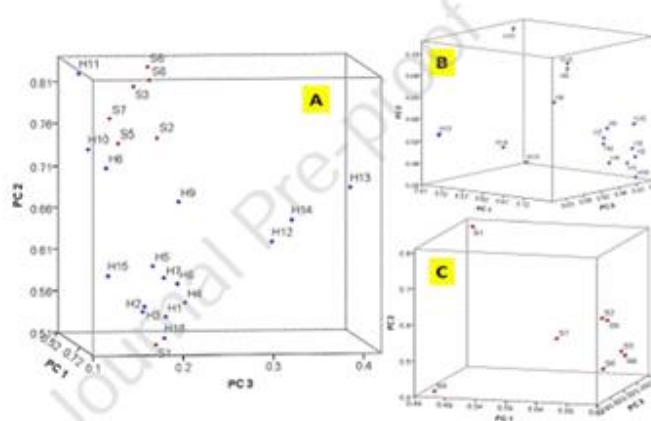
### تجزیه و تحلیل مؤلفه های اصلی

برای تجزیه و تحلیل مؤلفه اصلی (PCA) دو آزمایش پیش نیاز، یعنی آزمون های کرویت (KMO) و بارتلت نشان می دهد که داده های نمونه های چوب کفایت دارند زیرا مقادیر  $p$  به ترتیب ۰.۹۰ و ۰.۰۰ است که قابل توجه است.





علاوه بر این، کل واریانس شرح داده شده بوسیله سه pc اول  $98.88\%$  ( $PC1 = 49.03\%$ ,  $PC2 = 45.55\%$  و  $PC3 = 4.72\%$ ) موجود در مجموعه داده است. PC چهارم معیارهای Kaiser را برآورده نکرد. نمودار امتیاز (شکل ۴) نیز نوع یکسانی از نتیجه را برای مشخص نمودن pc های بالقوه ارائه می دهد.

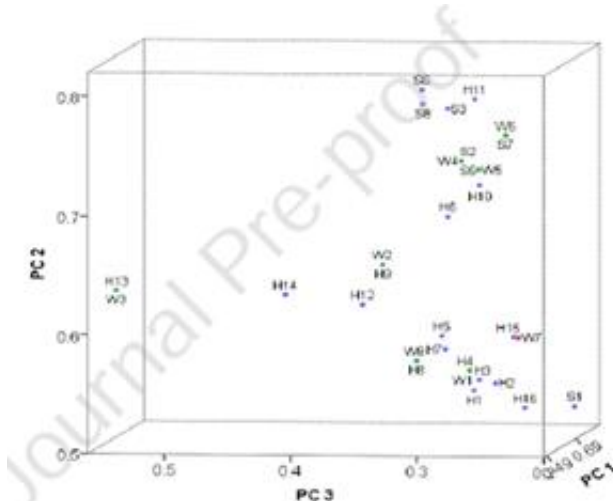


شکل ۴- نمودارهای سه بعدی ترکیبی و مجزا برای هر دو نمونه چوب سخت و نرم

نمودارهای سه بعدی ترکیبی و مجزا برای هر دو نمونه چوب سخت و نرم در این شکل نمایش داده شده است. از نمودارهای امتیازی مشخص می شود که تمام نمونه های چوب به وضوح در بین خود متفاوت هستند. بنابراین، توان تمایز به دست آمده (DP) از طریق تجزیه و تحلیل PCA 100٪ است. (معادله اسمالدون و موفات همانطور که قبلاً بحث شد). ارتباط بین اجزای اصلی و ترکیبات شیمیایی نمونه های چوب مرتبط با آنها با ایجاد یک نمودار بارگذاری برای  $PC1$ ,  $PC2$  و  $PC3$  همانطور که در شکل تکمیلی S3 نمایش داده شده است، تشکیل می شود. طبق این نمودار،  $PC1$ ,  $PC2$  و  $PC3$  بطور کلی مسئول وجود پیک ها در تعداد موج های مختلف هستند که قبلاً در جدول ۲ ذکر شده است. این پیک ها وجود سلولز، همی سلولز، لیگنین و سایر مواد خارجی موجود در نمونه های چوب را نمایش می دهند.

### شناسایی نمونه های چوب ناشناخته

استفاده عملی از مدل گسترش یافته با بررسی دوازده نمونه چوب ناشناخته به طور تصادفی (غیر از استفاده به عنوان مجموعه داده های آموزشی در مدل های قبلی)، یعنی  $W1$ ,  $W2$ ,  $W3$ ,  $W4$ ,  $W5$ ,  $W6$ ,  $W7$  و  $W8$ . ارزیابی می شود. دقت پیش بینی، یعنی اینکه این نمونه ها از چه خانواده ها / دسته هایی از چوب تهیه می شوند، با استفاده از راهکار یکسانی که در تحقیق حاضر نمایش داده شده است، مشخص می شود. برای همین منظور، پس از به دست آوردن طیف ATR-FTIR از هر هشت نمونه چوب ناشناخته، مجموعه داده جذبی اصلاح شده، صاف و نرمال شده برای تجزیه و تحلیل PCA همراه با مجموعه داده های چوب اصلی قرار می گیرد. در خروجی تجزیه و تحلیل مجدد، سه  $PC$   $98.90\%$  از کل واریانس را به دست آوردند. یک نمودار پراکندگی سه بعدی در میان مقادیر اجزای سه pc ایجاد شده و در شکل ۵ نشان داده شده است.



شکل ۵- نمودار پراکندگی سه بعدی در میان مقادیر اجزای سه PC ایجاد شده

این منحنی پراکندگی نشان داد که هفت نمونه چوب ناشناخته دقیقاً بر طبقات چوب مربوطه خود قرار گرفتند، یعنی W8، W3، W2، W1 متعلق به کلاس چوب سخت و W6، W5، W4 متعلق به کلاس چوب نرم است. اما نمونه چوب ناشناخته W7 متعلق به هیچ یک از کلاس های چوب ذکر شده (جدول ۱) نیست و به صورت مجزا قرار داده شده است. همچنین این نمونه چوبی متعلق به گروه چوب سخت است که با تجزیه و تحلیل چند متغیره پیش بینی شده است. پس از ارزیابی متقابل این نمونه های ناشناخته، مشاهده می شود که منشاء واقعی این نمونه ها همان است که در تحقیق حاضر به دست آمده است. بنابراین، روش اثبات مفهوم منشأ نمونه های چوب ناشناخته را به دقت پیش بینی کرد.

### طبقه بندی نمونه های چوب

تجزیه و تحلیل بیشتر برای دسته بندی نمونه های چوب ناشناخته طبق طیف های ATR-FTIR آنها همراه با تجزیه و تحلیل تشخیص خطی (LDA) انجام می شود. در این تحلیل پیش بینی، انتخاب متغیرها نقش مهمی ایفا می کند. تمام نمونه های چوب پیک هایی از ترکیبات آلی / معدنی مختلف را در یک عدد موج معین می دهند که اطلاعات شیمیایی چوب را به نمایش در می آورد. ما برای تجزیه و تحلیل LDA از پنج مقدار امتیاز رگرسیون PC به عنوان متغیرهای ورودی استفاده کرده ایم.

### تست تحلیل واریانس

در تحقیق حاضر، مقدار لامبدای ویلکس ۰.۲۳۴ با مقدار  $p = 0.00$  به دست می آید که قابل ملاحظه است. از بین تمامی متغیرهای وارد شده در نرم افزار دسته بندی، تنها مقادیر امتیاز رگرسیون PC2، PC3 و PC5 در مدل نهایی وارد شده است. معادله تابع تفکیک

خروجی ضرایب غیر استاندارد برای ایجاد معادلات تابع تفکیک (DF) استفاده می شود. برای ایجاد یک مدل خوب باید شرایط پیش نیاز مقدار ویژه  $> 1$  و همبستگی متعارف  $> 0.35$  دنبال شود. این تست مقادیر ویژه ۳.۲۸ و همبستگی متعارف ۰.۸۸ را برای معادله گسترش یافته به دست می دهد. معادله دسته بندی نمونه های چوب با توجه به فاکتورهای اصلی تمایز در نظر گرفته شده و به صورت زیر محاسبه می شود:

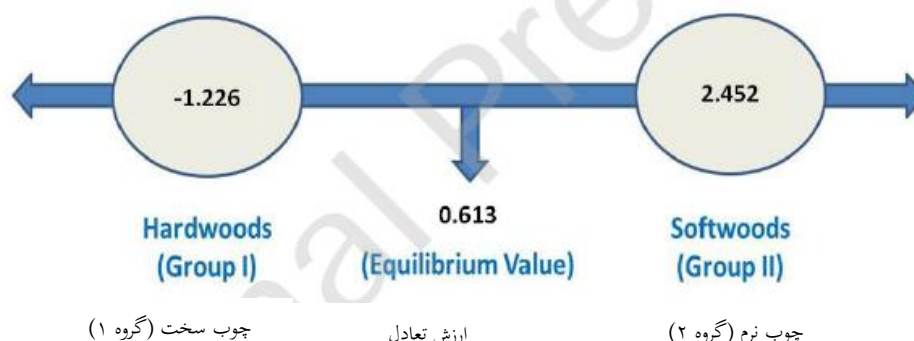
$$DF \text{ Equation} = 0.106 + 11.015 [PC2] + 9.94 [PC3] + (-16.269) [PC5] \quad \dots\dots\dots (ii)$$

معادله (ii) نشان می دهد که مقادیر امتیاز رگرسیون PC2، PC3 و PC5 نقش مهمی در تمایز نمونه های چوب به نمونه های چوب سخت و چوب نرم دارند. این سه مقدار امتیاز خصوصیات متضاد را نشان می دهند، به عنوان مثال. PC2 و PC3 مقدار ضریب مثبت را برای گروه ها نشان می دهد در حالی که PC5 مقادیر منفی را برای گروه ها نشان می دهد. راه دیگری برای



تفسیر نتایج، تشریح هر گروه از طریق مقادیر مرکز است. در تحقیق حاضر دو گروه وجود دارد. گروه اول (چوب های سخت) و گروه دوم (چوب های نرم). برای اهداف عملی یک امتیاز برش محاسبه می شود که در نیمه راه بین دو مرکز قرار دارد:

$$\text{Cut score} = (-1.226 + 2.452) / 2 = 0.613$$



بنابراین، اگر امتیاز تابع تفکیک به دست آمده بیشتر از ۰.۶۱۳ باشد، نمونه چوب متعلق به کلاس چوب نرم خواهد بود و بالعکس. به طور یکسان، توابع تفکیک فیشر برای هر دو گروه به شرح زیر است.

$$DFE_{\text{Equation}} (\text{Group I}) = -1.581 - 14.792[\text{PC2}] - 12.701[\text{PC3}] + 22.024[\text{PC5}] \dots \dots \dots \text{(iii)}$$

$$DFE_{\text{Equation}} (\text{Group II}) = -3.446 + 25.715[\text{PC2}] + 23.851[\text{PC3}] - 37.802[\text{PC5}] \dots \dots \dots \text{(iv)}$$

این معادلات (iii) و (iv) یک امتیاز فردی را برای هر دو گروه ارائه می دهند. علاوه بر این، نتایج با یک روش اعتبار سنجی متقاطع تایید می شوند. طبق تمام مشاهدات و مدل "خوبی تناسب"، نتیجه گیری می شود که استفاده از مقادیر امتیاز رگرسیون PC همچون یک متغیر برای LDA سبب دسته بندی اولیه ۹۱.۷٪ برای هر دو مجموعه داده شده است. بنابراین، طبقه بندی اصلی برای هر دو نمونه چوب سخت و نرم، مدل پیش بینی خوبی را نمایش می دهد. علاوه بر این، نتیجه اعتبار سنجی متقاطع دسته بندی ترکیبی ۸۷.۵٪ از نمونه های چوب را نمایش می دهد.

### پیش بینی کلاس نمونه های چوب ناشناخته

تأیید متقابل مدل گسترش یافته با ارزیابی نمونه های چوبی با منشأ ناشناخته انجام می شود. برای این کار، ده نمونه چوب کور (W1-W10) همانطور که قبلاً استفاده شده بود، گرفته شد. مقادیر امتیاز رگرسیون PC2، PC3 و PC5 در معادله (i) قرار داده شده است تا امتیاز تابع متمایز را همانطور که در جدول ۴ نشان داده شده است به دست آورد.

### نتیجه گیری

یافته های مطالعه حاضر نیز با مطالعات منتشر شده قبلی مقایسه شده و در جدول ۵ خلاصه شده است. مشاهده می شود که اکثر مطالعات مورد استناد به جز مطالعات طیف سنجی آسیب پذیر هستند. ادبیات منتشر شده نشان می دهد که تمام تحقیقات اخیر از آمارهای چند متغیره برای تمایز نمایشگاه استفاده کرده اند. تحقیق حاضر یک مطالعه اثبات مفهومی است که تمایز ۱۰۰ درصدی کلیه نمونه های چوب جمع آوری شده با مدل طبقه بندی ۸۷.۵ درصدی را فراهم می کند که قادر است بین نمونه های چوب سخت و چوب نرم با روشی مقرون به صرفه و غیر مخرب تمایز قائل شود.

### منابع

- [1] X. Li, C. Sun, B. Zhou, Y. He, Determination of Hemicellulose, Cellulose and Lignin in Moso Bamboo by Near Infrared Spectroscopy, Sci. Rep. 5 (2015).
- [2] S.F. Moller, J. von Frese, R. Bro, Robust methods for multivariate data analysis, J Chemom. 19 (2005) 549-563.
- [3] R.G. Brereton, Chemometrics: Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant, John Wiley and Sons, Chichester, UK, 2003.



- [4] V. Sharma, R. Kumar, Trends of Chemometrics in bloodstain Investigations, TrAC, Trends Anal. Chem. 107 (2018) 181-195.
- [5] G. McLachlan, Discriminant Analysis and Statistical Pattern Recognition, JohnWiley and Sons, 2004.
- [6] K.W. Smalldon, A.C. Moffat, The calculation of discrimination power for a series of correlated attributes, J. Forensic Sci. Soc. 13 (1973) 291–295.
- [7] R.A. Blanchette, J.E. Haight, R.J. Koestler, P.B. Hatchfield, D. Arnold, Assessment of Deterioration in Archaeological Wood from Ancient Egypt, Journal of the American Institute for Conservation, Vol. 33, No. 1 (Spring, 1994), pages 55-70.
- [8] M.H. Ramage, H. Burridge, M.B. Wicher, G. Fereday, T. Reynolds, D.U. Shah, G. Wu, L. Yu, P. Fleming, D.D. Tingley, J. Allwood, P. Dupree, P.F. Linden, O. Scherman, The wood from the trees: The use of timber in construction, Renewable and Sustainable Energy Reviews 68 (2017) 333–359.
- [9] M. Anandarajan, C. Hill, T. Nolan, Cluster Analysis: Modeling Groups in Text. In: Practical Text Analytics, Advances in Analytics and Data Science, Vol. 2, Springer, Cham, 2019.