

ARTÍCULOS

Uso de espectroscopia infrarroja y análisis multivariado para predecir la densidad de la madera de pino oregón

Use of near infrared spectroscopy and multivariate analysis to predict wood density of Douglas fir

Mauricio A Acuna^a y Glen E Murphy^{a*}

*Autor de correspondencia: ^aOregon State University, Forest Engineering Department, Corvallis, Oregon, USA, glen.murphy@oregonstate.edu

SUMMARY

In many parts of the world log markets are becoming increasingly competitive and complex. Wood properties, such as stiffness, density, spiral grain, and extractives content, are now being considered by log buyers. Assessing these properties in real-time will be a challenge for log supply managers. The utility of near infrared (NIR) technology for predicting wood density in Douglas fir (*Pseudotsuga menziesii*) stems was examined. Wood disks were collected from 17 sites around Oregon, USA. Each disk was cut with a chain saw, of similar gauge to that used on mechanized harvesters/processors, to provide saw chips. Near infrared spectra were then obtained for the chip samples. Multivariate techniques were used to correlate wood properties with the NIR spectra. The preliminary research results showed that NIR could be used to predict density. Coefficients of determination ranged between 0.80 and 0.96 for calibration models, and between 0.56 and 0.85 for validation models. These results indicate that NIR technology could be used by mechanized harvesting equipment (e.g. harvesters) for log segregation based on wood density.

Key words: sensor technology, log segregation, forest harvesting, wood internal properties, *Pseudotsuga menziesii*.

RESUMEN

En muchas partes del mundo los mercados de productos forestales están enfrentando escenarios cada vez más competitivos y complejos. Al momento de comprar madera, las compañías están considerando propiedades tales como rigidez, densidad, grano en espiral y contenido de extractivos. La evaluación de estas propiedades en tiempo real será un verdadero desafío para los productores de madera en rollizos. Este artículo examina la utilidad de la tecnología infrarroja (NIR) para predecir la densidad de la madera en rollizos de pino oregón (*Pseudotsuga menziesii*). Las rodela de madera fueron colectadas desde 17 sitios localizados en el Estado de Oregon, EE.UU. Para obtener las muestras de astillas, cada rodela fue aserrada con una motosierra, similar a aquella usada por cosechadoras mecánicas. Posteriormente se obtuvo información del espectro infrarrojo de las muestras de astillas. Se utilizó análisis multivariado para correlacionar las propiedades de la madera con el espectro NIR. Los resultados preliminares muestran que NIR podría ser utilizado para predecir la densidad de la madera. El coeficiente de determinación fluctuó entre 0,80 y 0,96 para los modelos de calibración, y entre 0,56 y 0,85 para los modelos de validación. Estos resultados indican que la tecnología NIR podría ser usada en cosechadoras mecanizadas para la segregación de rollizos en base a la densidad de la madera.

Palabras clave: tecnología sensorial, segregación de rollizos, cosecha forestal, propiedades internas de la madera, *Pseudotsuga menziesii*.

INTRODUCCIÓN

Pino oregón (*Pseudotsuga menziesii* (Mirb.) Franco) es una especie de importancia económica para las industrias de productos forestales de Estados Unidos, Canadá, Nueva Zelanda, y algunas partes de Chile y Europa (Acuna y Murphy 2006, Gartner *et al.* 2002). Se espera que los mercados de productos forestales, especialmente los de

madera estructural de alta calidad, continúen demandando rollizos de pino oregón (Barbour y Kellogg 1990, McKeever 2000, Schuler y Craig 2003). En muchas partes del mundo los mercados de madera en rollizos están siendo cada vez más competitivos y complejos. En el pasado, la dimensión de los árboles y las características externas de calidad (tales como el tamaño de las ramas y la curvatura) fueron suficientes para clasificar los rollizos. Sin embargo, ahora

se está dando una mayor consideración a propiedades tales como la densidad, la rigidez, el grano en espiral y el contenido de extractivos (Andrews 2002, So *et al.* 2002, Young 2002).

Existen distintas propiedades de la madera que afectan la calidad final de los productos. De éstas, la densidad de la madera es considerada la característica física más importante, la cual puede ser utilizada para predecir resistencia, rigidez, dureza y calidad de papel (Megraw 1986, Kennedy 1995). Una correcta evaluación de la densidad en tiempo real representa un verdadero desafío para los productores de madera, quienes desean segregarse los rollizos en diferentes clases basados en esta propiedad interna de la madera.

Por otra parte, en el mundo entero hay una tendencia hacia la mecanización de las operaciones de cosecha forestal. Los equipos de cosecha mecanizada generalmente vienen equipados con tecnología computacional y sensores para medir las dimensiones externas de los rollizos –generalmente diámetro con corteza y longitud. El estudio de tecnologías para medir atributos relacionados a la calidad de los rollizos está progresando con diferentes niveles de éxito; ejemplos de éstos son: acústica, escáner láser y óptico, rayos X, microondas, ultrasonido y espectroscopia infrarroja (NIR) (Tian 1999, So *et al.* 2002, Carter *et al.* 2005).

Los beneficios y tendencias de la espectroscopia infrarroja han sido descritos por So *et al.* (2004) quienes comentaron que: “La rápida evaluación de las propiedades sólidas de la madera por medio del espectro NIR se ha convertido en un área de estudio de rápido crecimiento con amplias implicancias para la calidad de la madera y, finalmente, para el mejoramiento de los árboles... Es probable que el monitoreo con NIR lleve a un aumento de la eficiencia y de las utilidades”.

El espectro NIR se relaciona a las propiedades de la madera sólo hasta unos pocos milímetros de profundidad dentro de la muestra. Las mediciones de las propiedades de la madera dentro del fuste requieren la obtención de muestras, las cuales corresponden a astillas de aserrío que se producen durante el trozado realizado por una cosechadora o procesadora. Así, este estudio pretende determinar si las astillas de aserrío, en particular astillas en estado verde, constituyen una muestra adecuada para predecir la densidad de la madera basada en mediciones del espectro NIR.

La espectroscopia NIR funciona bajo el principio de la radiación electromagnética interactuando con la materia, la cual puede tomar diversas formas (Davies 2005). Cuando un material sólido es iluminado con radiación monocromática emitida por un instrumento NIR, la radiación incidente es reflejada por la superficie exterior (conocida como reflexión especular), viaja al interior de los tejidos de la muestra y es reflejada nuevamente (reflexión difusa), pasa a través de toda la muestra (transmisión), es absorbida completamente (absorción) o se pierde como refracción interna y luego se dispersa. Si la muestra no absorbe la

energía incidente, entonces ésta es totalmente reflejada. En espectroscopia NIR, el interés radica en determinar la reflexión y transmisión difusa (Tigabu 2003). Por razones prácticas, se hace una conversión de reflexión difusa (R) a absorbancia (A) de acuerdo a la fórmula: $A = \text{Log}(1/R)$ (Workman 2001).

Los primeros estudios con espectroscopia NIR se concentraron en la industria agrícola y de alimentos, así como en aplicaciones relacionadas a sensores remotos. Estudios más recientes han expandido el uso de NIR a la industria forestal (Kelley *et al.* 2004b), específicamente para la caracterización de las propiedades de la madera, las cuales tienen efecto sobre un amplio rango de productos forestales. Wright *et al.* (1990), Terdwongworakul *et al.* (2005) y Michell (1995) usaron NIR para predecir el contenido de celulosa y rendimiento de la pulpa. Sefara *et al.* (2000) evaluaron tres tipos de muestras: trozos de madera en forma de cuña, astillas y polvo de aserrío, obteniendo buenos ajustes ($R^2 > 0,80$) entre el espectro NIR y el rendimiento de pulpa para los tres tipos de muestras.

Hay muchos estudios en la literatura relacionados a la predicción de propiedades físicas (densidad, ángulo microfibrilar, longitud de traqueidas), mecánicas (MOR, MOE) y químicas (glucosa, lignina y contenido de extractivos) de la madera a partir de espectros NIR, para un importante número de coníferas y latifoliadas (Schimleck *et al.* 2001, 2002, 2003, 2004, Bailleres *et al.* 2002, Kludt 2003, Schimleck y Yazaki 2003, Kelley *et al.* 2004ab, Via 2004, Jones *et al.* 2005).

Otros estudios han intentado modelar la densidad de la madera basándose en el espectro NIR, pero en especies distintas a pino oregón. Via *et al.* (2003) usaron NIR para predecir la densidad de madera madura y juvenil de *Pinus palustris* P. Mill; Thygesen (1994) utilizó espectro NIR para predecir densidad básica, a partir de virutas y madera sólida de *norway spruce (Picea abies (L.) Karst.)*. Los errores estándar de los modelos de calibración fluctuaron entre 3 y 8%, con valores de R^2 entre 0,71 y 0,89. En un estudio de Schimleck *et al.* (1999), la densidad básica de la madera proveniente de plantaciones de *Eucalyptus globulus* Labill. subsp. *globulus (tasmanian blue gum)* fluctuó entre 378 y 656 kg m⁻³, la cual pudo ser determinada con una precisión de alrededor de 30 kg m⁻³.

La espectroscopia NIR, con su reducido costo de instrumentación y rápida colección espectral (con poco o ningún esfuerzo requerido para la preparación de las muestras), se ajusta perfectamente a los requerimientos del análisis cuantitativo (So *et al.* 2004). Sin embargo, sin la ayuda del análisis multivariado la información química del espectro NIR es muy limitada. Dos de las técnicas de estadística multivariada más utilizadas con espectroscopia NIR son cuadrados mínimos parciales (PLS) y análisis de componentes principales (PCA). PLS es una técnica que generaliza y combina características de PCA y regresión múltiple. Una detallada descripción de estas técnicas de análisis se encuentra en diferentes

artículos (Tobias 1995, Antii 1999, Reeves y Delwiche 2003, Abdi 2003).

El objetivo de este estudio fue determinar si la espectroscopia NIR puede ser utilizada para predecir la densidad de la madera de pino oregón, utilizando tres tipos de muestras: astillas de aserrío en estado verde, astillas de aserrío en estado seco y polvo de astillado en estado seco.

MÉTODOS

Sitios y árboles seleccionados. A mediados de 2003, 119 árboles fueron volteados en 17 sitios localizados en la zona costera y de las Cascadas del Estado de Oregon, EE.UU. Los sitios están ubicados entre 44° 13' y 45° 36' N y entre 122° 00' y 123° 35' O. Estos fueron escogidos de tal manera de cubrir un rango de elevaciones (217 a 996 m) y aspectos geográficos. Aproximadamente siete árboles fueron volteados en cada sitio, de manera de cubrir el rango de diámetros presente. Todos los rodales estuvieron constituidos por árboles de pino oregón de segundo crecimiento, pertenecientes a la misma clase de edad (45-60 años). Las características de cada sitio de estudio aparecen en un artículo de Acuna y Murphy (2006).

Después de voltear los árboles, se cortaron rodajas de aproximadamente 10 cm de espesor a intervalos regulares a lo largo del fuste: a 0, 1, 3, 5, 10, 20 y 30 metros sobre la base del árbol. Luego, las rodajas fueron etiquetadas y conservadas en frío hasta ser utilizadas para la determinación de la densidad de la madera. Se colectaron cerca de 500 rodajas en terreno.

Preparación de muestras para espectroscopia NIR. Todas las rodajas fueron utilizadas para un estudio de variación geoespacial de la densidad de la madera de pino oregón (Acuna y Murphy 2006). De este total, sólo 150 fueron usadas para la medición del espectro NIR. Para obtener las muestras de astillas se removió la corteza de cada una de las rodajas, las que posteriormente se cortaron con el uso de una motosierra, de similares características a aquellas usadas por cosechadoras/procesadores mecanizados. Las muestras de astillas se obtuvieron haciendo un corte paralelo a la cara de las rodajas, desde el borde hasta una profundidad de entre 5 y 10 cm. Las muestras se dividieron en dos grupos: verdes (100 muestras) y secas (50 muestras). Las astillas verdes fueron procesadas justo después de obtener 100 rodajas en terreno, las cuales fueron seleccionadas aleatoriamente a partir de varios sitios y alturas sobre la base del árbol. Las muestras secas se obtuvieron a partir de 50 rodajas seleccionadas aleatoriamente y ubicadas a la altura del pecho (1,3 m), las cuales fueron previamente sometidas a secado. Posteriormente, se procesó aproximadamente la mitad del volumen de astillas obtenido de cada una de las 50 rodajas, el cual fue convertido a polvo por medio del uso de un aserradero Wiley. Adicionalmente, se removieron

las impurezas presentes en las muestras de manera de contar con un material más homogéneo.

Mediciones infrarrojas. Las mediciones fueron realizadas en un período de dos años e incluyeron el uso de dos equipos de medición; un espectrómetro de terreno ASD y un sistema NIRS 6500. Las mediciones NIR para las muestras de astillas verdes y secas fueron realizadas con el espectrómetro ASD (siglas inglesas para Dispositivo Espectral Analítico) a longitudes de onda que fluctuaron entre los 400 nm y los 2.500 nm, y utilizando los parámetros por defecto. Con este espectrómetro, se hicieron 10 mediciones por segundo, lo cual implicó tiempos de uso del escáner de tres segundos por cada muestra. Para capturar la reflexión, este dispositivo utiliza una sonda de fibra óptica orientada a 90 grados de la superficie de la muestra. Las muestras son ubicadas en una placa petri, la cual a su vez es ubicada sobre un tornamesa que gira lentamente. Las muestras fueron iluminadas con una lámpara DC orientada a 30° sobre las muestras. Se obtuvieron treinta mediciones, las cuales fueron promediadas en un espectro único. Se promediaron dos espectros de cada muestra para así obtener un espectro único para cada una de ellas. La reflexión espectral fue transferida desde el ASD a un archivo Unscrambler® y convertida a absorción espectral. El espectro obtenido en cada muestra fue promediado para proporcionar un espectro único, el que fue utilizado para predecir la densidad de la muestra. El próximo paso fue reducir el espectro promedio colectado a intervalos de 1 nm, a información espectral cada 5 nm. De acuerdo con Kelley *et al.* (2004a), esto reduce el tamaño de la matriz espectral y reduce considerablemente el tiempo requerido para la obtención de los modelos multivariantes sin afectar la calidad de los mismos.

Las mediciones de las muestras de polvo seco de astillado fueron realizadas con un dispositivo Foss NIRSystems Modelo 6500, a longitudes de onda que fluctuaron entre 400 nm y 2.500 nm, con el uso de parámetros por defecto. Con este espectrómetro, se hicieron 1,8 mediciones por segundo, lo cual implicó tiempos de uso del escáner de 17 segundos por cada muestra. El polvo de astillado se colocó dentro de un envase circular de un área aproximada de 11 cm². Los detectores fueron ubicados en un ángulo de 45° frente a la luz incidente. Se obtuvieron 32 mediciones, las cuales fueron promediadas en espectro único, y la reflexión espectral fue convertida a absorción espectral. El espectro, obtenido a intervalos de 2 nm en cada muestra, fue usado para predecir la densidad de la muestra. El número de mediciones para las muestras verdes y secas (30 y 32, respectivamente) corresponde al valor por defecto de cada uno de los espectrómetros.

Mediciones de densidad de la madera. Se utilizaron dos procedimientos de preparación de las muestras para la medición de la densidad. Primero se sometió a secado las rodajas de donde se obtuvieron las astillas. Luego,

de cada rodela, se cortaron aleatoriamente dos muestras de madera sólida (listones de aproximadamente 5 cm de ancho) a una distancia aproximada de 4-5 cm desde el borde exterior de cada rodela. Posteriormente, se midió el volumen de cada una de las muestras usando el método de desplazamiento de agua. La densidad relativa de la madera (gravedad específica) fue calculada por la relación peso seco/volumen seco (Hughes 1967).

Se utilizó un procedimiento alternativo para las rodela desde donde se obtuvieron las astillas verdes. Éste incluyó la obtención de muestras de madera de 4-5 cm desde el borde exterior de las rodela. Las muestras de madera verde fueron inmediatamente ubicadas en un cuarto frío acompañadas de una etiqueta de identificación. Posteriormente, las muestras se secaron a 103 ± 2 °C hasta estabilizar su peso (24 a 72 horas). Se midió el volumen y peso de cada muestra, y se calculó la densidad de la madera.

Análisis multivariado del espectro NIR: análisis con cuadrados mínimos parciales (PLS). Los datos se dividieron en dos conjuntos, uno para desarrollar los modelos discriminantes (conjunto de calibración) y otro para evaluar el desempeño de los modelos al hacer la clasificación (conjunto de predicción). Las características de las muestras en cada grupo, así como las bandas de absorción utilizadas en el análisis se presentan a continuación:

- Grupo de astillas verdes: conjunto de calibración (65 muestras), conjunto de predicción (35 muestras), banda de absorción [502-2.500 nm], número de observaciones (401, cada 5 nm del espectro).
- Grupo de astillas secas: conjunto de calibración (24 muestras), conjunto de predicción (23 muestras), banda de absorción [355-2.495 nm], número de observaciones (429, cada 5 nm del espectro).
- Grupo de polvo seco de astillado: conjunto de calibración (25 muestras), conjunto de predicción (25 muestras), banda de absorción [400-2.500 nm], número de observaciones (1.050, cada 2 nm del espectro).

El análisis de los datos espectrales se llevó a cabo con la ayuda de la macro PLS que viene con el paquete estadístico SAS®. Como está implementado, SAS® (versión 9.1) puede desarrollar sólo regresiones PLS del tipo II (Reeves y Delwiche 2003).

Siguiendo la recomendación hecha por Shao (2003), las calibraciones desarrolladas utilizaron métodos de validación cruzada en las que entre nueve y diez observaciones fueron excluidas. El estadístico utilizado para la comparación de los modelos fue PRESS, la suma de cuadrados residuales de la predicción. Para los tres grupos analizados, el procedimiento de validación cruzada indicó cero factores a ser utilizados. Con este procedimiento hubiera sido posible explicar sólo un pequeño porcentaje de las variables dependientes y de los efectos del modelo. Por esta razón, el procedimiento utilizado

consideró el uso de uno y hasta quince factores. El criterio de interés fue la capacidad predictiva del modelo de regresión. Así, se utilizó el número de factores que produjo el coeficiente de determinación (R^2) más alto en el conjunto de predicción, los cuales se reportan en este artículo. Un modelo de calibración puede tener un muy alto coeficiente de determinación. Sin embargo, esto puede deberse a un sobreajuste producido al utilizar una gran cantidad de variables latentes, lo que da lugar a una pobre capacidad predictiva cuando el modelo es utilizado con el conjunto de predicción.

La calidad de los modelos en los conjuntos de calibración y predicción se evaluó sobre la base de dos indicadores comunes: R^2 y SEC (SEP para el conjunto de predicción) (Martens y Naes 1991). El valor de R^2 es una medida de la variación en la variable respuesta (densidad de la madera) explicada por el modelo de regresión. Para un material heterogéneo tal como la madera, valores de R^2 de 0,75 y mayores son considerados buenos (Kelley *et al.* 2004a). Asimismo, el SEC es el error estándar de calibración, una medida del error de predicción expresado en unidades de la medición original (Workman 2001, Kludt 2003). Esto está dado por la siguiente ecuación:

$$SEC = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{SC} (\hat{y}_i - y_i)^2}{(SC - n - 1)}} \quad [1]$$

donde \hat{y}_i es el valor de la propiedad de interés de la madera para la muestra i , estimado usando calibración, y_i es el valor conocido de la propiedad de la madera para la muestra (densidad de la madera), SC es el número de muestras usadas para desarrollar el modelo de calibración, y n es el número de factores usados para desarrollar el modelo de calibración.

Por otra parte, la capacidad predictiva de la propiedad de interés al utilizar el modelo de calibración en un conjunto desconocido de muestras (diferentes al conjunto de calibración) está dada por el error estándar de predicción (SEP):

$$SEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{SP} (\hat{y}_i - y_i)^2}{(SP - 1)}} \quad [2]$$

donde \hat{y}_i es el valor de la propiedad de interés de la madera pronosticada por el modelo de calibración para la muestra i , y_i es el valor conocido de la propiedad de la madera para la muestra i (densidad de la madera) y SP es el número de muestras en el conjunto de predicción.

Análisis multivariado del espectro NIR: análisis de componentes principales (PCA). El propósito principal de este artículo fue aplicar la metodología PLS para predecir la

densidad de la madera a partir del espectro infrarrojo. Como se señaló anteriormente, tanto la técnica multivariable PLS como PCA han sido utilizadas para desarrollar modelos predictivos basados en el espectro NIR. Sólo como una manera de comparar los resultados de diferentes técnicas multivariable, se aplicó PCA a los mismos conjuntos de datos (calibración y predicción) utilizados para el análisis con PLS.

PCA incluye un procedimiento matemático que transforma un conjunto correlacionado de variables en un número pequeño de variables no correlacionadas llamadas componentes principales (o variables latentes), ortogonales unas con otras (So *et al.* 2004). Sin embargo, los componentes son escogidos para explicar X (variables explicativas) en lugar de Y (variables respuesta) y, por lo tanto, nada garantiza que los componentes principales que “explican” X son relevantes para Y (Abdi 2003).

El análisis fue realizado con el uso del *software* S+® (versión 6.1). Este paquete estadístico puede ser usado para calcular componentes de un conjunto de datos (conjunto de calibración) o predecirlos para un nuevo conjunto de datos (conjunto de predicción). En ambos casos se desarrolló una regresión lineal múltiple entre los componentes principales y la densidad de la madera. Así, el número de componentes principales reportado fue aquél en que se obtuvo el coeficiente de determinación más cercano en el conjunto de predicción a aquél obtenido mediante PLS.

RESULTADOS

Densidad de la madera. La densidad mínima para el conjunto de calibración correspondió al grupo de astillas verdes (315 kg m^{-3}), mientras que la densidad máxima estuvo asociada al grupo de astillas secas (490 kg m^{-3}), la cual fue muy parecida a la del grupo de astillas verdes (489 kg m^{-3}) (cuadro 1). Las densidades promedio fueron mayores en ambos grupos de muestras secas (astillas y polvo de astillado), con valores de 436 y 433 kg m^{-3} respectivamente, y más de 30 unidades de diferencia con el grupo de astillas verdes (399 kg m^{-3}). Una tendencia similar fue obtenida en el conjunto de predicción. La densidad mínima en este conjunto correspondió al grupo de astillas verdes (335 kg m^{-3}) y la densidad máxima se encontró tanto en el grupo de astillas verdes como en el grupo de astillas secas (509 kg m^{-3}). Además, la desviación estándar fue considerablemente mayor en el conjunto de predicción en comparación al conjunto de calibración. Las muestras de astillas verdes se obtuvieron a diferentes alturas (0 a 30 m) de los árboles, mientras que las muestras secas se obtuvieron de rodelas ubicadas a la altura del pecho. La densidad de la madera tiende a disminuir con la altura del árbol y, por lo tanto, es posible esperar que las muestras secas tengan mayores densidades promedio que las muestras verdes (cuadro 1).

Cuadro 1. Rango y desviación estándar (S) de la densidad de la madera (kg m^{-3}) por tipo de muestra, para los conjuntos de calibración y predicción.

Range and standard deviation (S) of wood density (kg m^{-3}) by sample type, for calibration and prediction data sets.

Tipo de muestra	Conjunto de calibración		Conjunto de predicción	
	Rango	Media \pm S	Rango	Media \pm S
Astillas verdes	315–489	399 \pm 41,7	335–509	414 \pm 43,8
Astillas secas	371–490	433 \pm 29,8	359–509	441 \pm 30,4
Polvo seco de astillado	381–476	436 \pm 26,5	359–499	432 \pm 40,3

Variación del espectro NIR. Los valores de absorción más altos para los tres grupos de muestras se obtuvieron a los 1.500, 2.000 y 2.500 nm. Las curvas espectrales para el grupo de astillas verdes muestran la diferencia del espectro NIR para tres muestras representativas de densidad, baja (315 kg m^{-3}), promedio (434 kg m^{-3}) y alta (509 kg m^{-3}), en términos de valores de absorción general (figura 1).

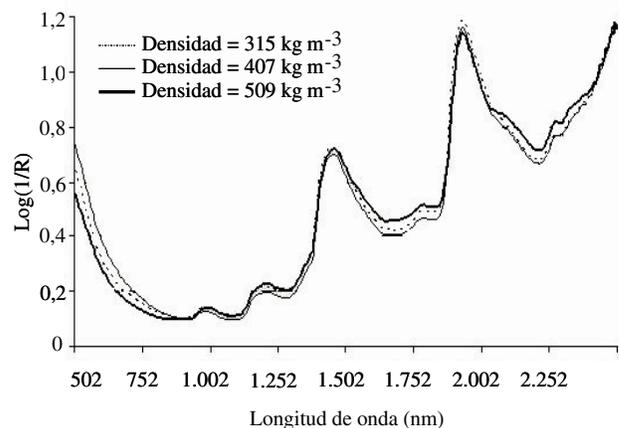


Figura 1. Variación del espectro infrarrojo (NIR) en las muestras de astillas verdes para distintos valores de densidad básica.

Variation in near infrared (NIR) spectra collected from green chain saw chip samples for different values of basic density.

A longitudes de onda por debajo de los 1.000 nm la muestra con una densidad alta tiene valores ligeramente menores de absorción que las muestras con densidad baja y promedio (figura 1). Para el resto del rango espectral (1.000-2.500 nm) la muestra con una densidad alta tiene los valores más altos de absorción, lo cual es más evidente entre los 500-1.850 nm y entre los 2.000-2.350 nm.

Las curvas espectrales para el grupo de astillas secas muestran una menor absorción en comparación al grupo de astillas verdes. Esta tendencia se confirma en un trabajo anterior (Schimleck *et al.* 2003). Los autores reportaron una mayor diferencia entre muestras verdes y secas que

aquella encontrada en el presente estudio, lo cual puede deberse a las características de las muestras de astillas secas. Otras diferencias en el espectro entre muestras de astillas secas y verdes dicen relación con la tendencia de los valores de absorción (para las muestras de densidad alta la absorción es mayor a longitudes de onda por debajo de los 1.000 nm y menor a longitudes de onda por sobre los 1.900 nm), y la presencia de más “ruido” e irregularidades en el espectro asociado a las astillas secas.

Los valores de absorción para el grupo de polvo seco de astillado fueron intermedios entre aquéllos encontrados en los grupos de astillas verdes y secas. Al compararse a estos dos grupos, parece no haber diferencias entre las muestras con densidades altas, medias o bajas. Por otra parte, ambos grupos de muestras secas (astillas y polvo de astillado) presentan tendencias similares. Parece no haber diferencias significativas entre ambos grupos de muestras secas en el rango espectral que va de los 400 a los 2.500 nm.

La figura 2 muestra las curvas espectrales para los tres grupos de muestras y sus respectivos valores de densidad promedio. Para todo el espectro puede observarse que ambos grupos de muestras secas tuvieron menos absorción que el grupo de muestras verdes, con diferencias que aumentan a longitudes de onda por sobre los 1.500 nm. Esto confirma los resultados obtenidos en estudios previos, los cuales reportan mayores valores de absorción a medida que aumenta el contenido de humedad de las muestras (Thygesen 1994, Schimleck *et al.* 2003).

Desarrollo y aplicación de calibraciones PLS. El modelo de calibración desarrollado en cada grupo de muestras dio buenos resultados, con valores de R^2 ($P < 0,001$) que fluctuaron entre 0,89 y 0,95 (cuadro 2). Las calibraciones de la densidad de la madera utilizando el espectro NIR de las muestras de astillas secas dieron mejores resultados que las calibraciones desarrolladas a partir de las muestras de astillas verdes y polvo seco de astillado (figura 3).

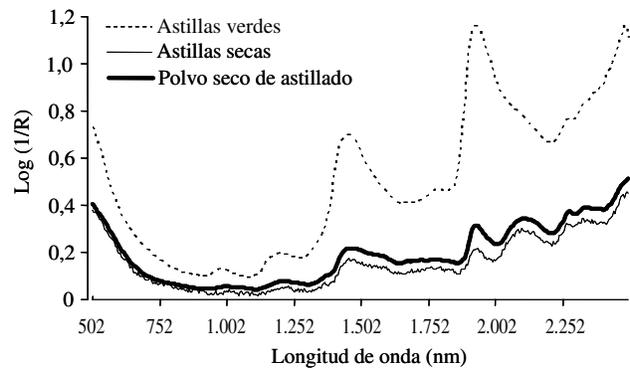


Figura 2. Variación en el espectro infrarrojo (NIR) para densidades promedio en los tres tipos de muestras: astillas verdes, astillas secas y polvo seco de astillado.

Variation in near infrared (NIR) spectra collected from average densities for the three sample groups – green chain saw chips, dry rough chips, and dry ground chips.

Otro aspecto interesante del procedimiento de calibración dice relación con la diferencia observada en el número de factores en cada uno de los grupos donde se obtuvieron los mejores resultados. Mientras sólo tres factores fueron necesarios en el grupo de astillas secas para alcanzar el mejor valor de R^2 en el conjunto de predicción, doce factores fueron necesarios para los grupos de astillas verdes y polvo seco de astillado. Sin embargo, el valor de R^2 en el conjunto de predicción fue más bajo para el grupo de astillas secas que para los otros dos grupos.

En general, el número de factores obtenidos fue mayor que aquéllos reportados en estudios previos (Thygesen 1994, Schimleck *et al.* 1999); esto pudo deberse al uso de técnicas de preprocesamiento, las cuales no fueron utilizadas en este estudio (figura 4). En el grupo de astillas verdes, el modelo de calibración sólo explica el 40% de la variable dependiente (densidad de la madera) cuando se utilizan cinco factores (un número comúnmente reportado

Cuadro 2. Resumen de calibraciones con cuadrados mínimos parciales para estimar la densidad básica usando la información espectral de las muestras.

Summary of calibrations with partial least squares regression developed for estimating basic density using spectra collected from the samples.

Tipo de muestra	Conjunto de calibración				Conjunto de predicción		
	Nº de factores	R^2	SEC	Nº de muestras	R^2	SEP	Nº de muestras
Astillas verdes	12	0,89*	15,2	65	0,74*	22,7	35
Astillas secas	3	0,95*	6,9	25	0,56*	27,4	25
Polvo seco de astillado	12	0,90*	11,8	25	0,85*	15,7	25

* $P < 0,001$. SEC = error estándar de calibración. SEP = error estándar de predicción.

en los estudios de este tipo). Por otra parte, con más de diez factores el modelo explica un poco más del 80% de la densidad de la madera; sin embargo, a partir de este punto hay una clara evidencia de sobreajuste del modelo.

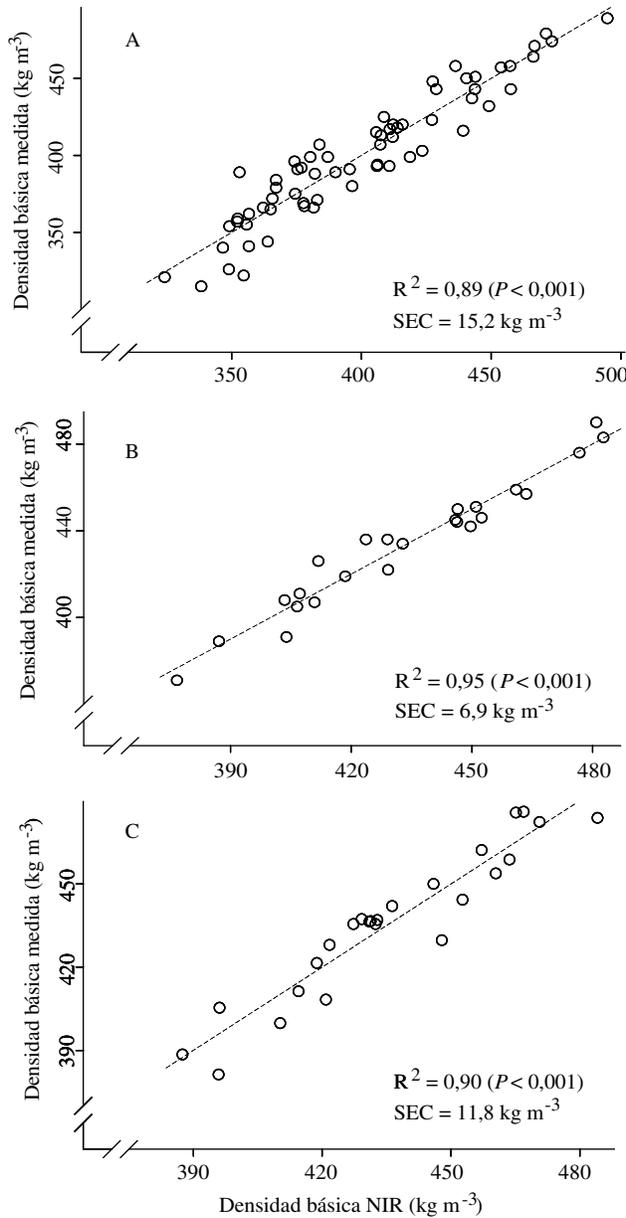


Figura 3. Relaciones entre los valores observados y pronosticados con espectroscopia infrarroja (NIR) para (A) astillas verdes, (B) astillas secas y (C) polvo seco de astillado. Resultados obtenidos para calibración. R^2 = Coeficiente de determinación, SEC = Error estándar del modelo de calibración.

Relationships between measured values and values predicted with near infrared (NIR) spectroscopy for (A) Green chain saw chip samples, (B) Dry rough chip samples, and (C) Dry ground chip samples. Results presented are those obtained for calibration. R^2 = Coefficient of determination, SEC = Standard error of the calibration model.

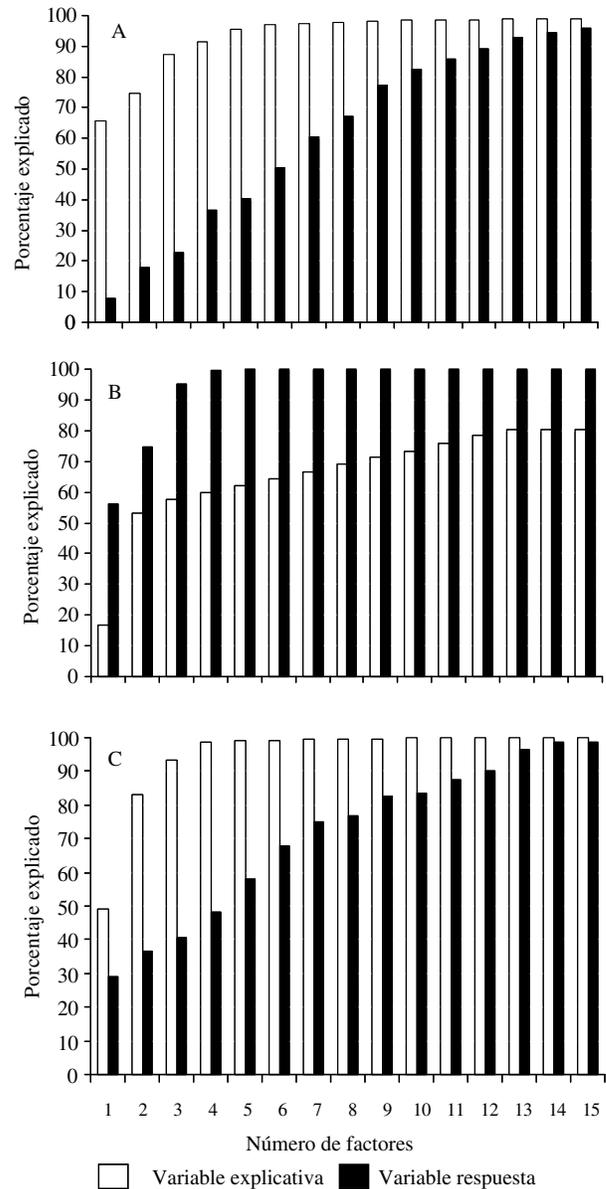


Figura 4. Variables explicativas y respuesta explicadas por el modelo de calibración con el uso de cuadrados mínimos parciales en las (A) astillas verdes, (B) astillas secas y (C) polvo seco de astillado.

Explanatory and response variables explained by the partial least squares calibration model in the (A) green chain saw chip samples, (B) dry rough chip samples, and (C) dry ground chip samples.

Cuando los modelos de calibración se utilizaron en un conjunto de predicción separado, las calibraciones desarrolladas con el espectro del grupo de polvo seco de astillado dieron el mejor estadístico de predicción, con un R^2 de 0,85 ($P < 0,001$). Contrariamente, la relación más débil se obtuvo en el grupo de astillas secas con un valor de R^2 de 0,56 ($P < 0,001$). Las líneas de regresión entre los valores medidos y pronosticados para el conjunto de predicción se presentan en la figura 5. Los valores de pre-

dicción de R^2 para estas líneas de regresión se presentan en el cuadro 2, y ellas representan la proporción de la variación en el conjunto independiente de predicción que fue explicada por el modelo de calibración.

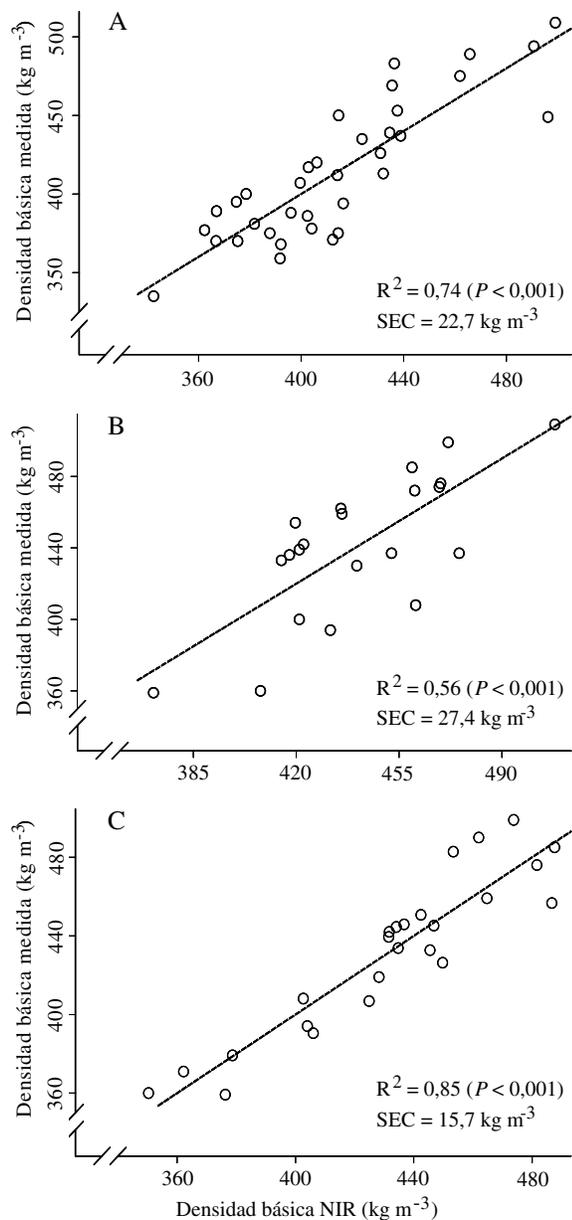


Figura 5. Relaciones entre los valores observados y pronosticados con espectroscopia infrarroja (NIR) para (A) astillas verdes, (B) astillas secas y (C) polvo seco de astillado. Resultados obtenidos para la predicción. R^2 = Coeficiente de determinación, SEC = Error estándar del modelo de calibración.

Relationships between measured and predicted values with near infrared (NIR) spectroscopy for (A) green chain saw chip samples, (B) dry rough chip samples, and (c) dry ground chip samples. Results presented are those obtained for prediction. R^2 = Coefficient of determination, SEC = Standard error of the prediction model.

En general, las predicciones de densidad en cada tipo de muestras fueron satisfactorias, pero los valores de R^2 fueron menores que los R^2 obtenidos para los conjuntos de calibración, obteniéndose una mayor reducción en el grupo de astillas secas. Los valores de SEP (15,7-27,4 kg m^{-3}) fueron considerablemente mayores que los valores de SEC (6,9-15,2 kg m^{-3}). El grupo de astillas secas mostró la mayor diferencia entre los valores de SEP y SEC. Como señalan algunas referencias (Dryden 2003), la presencia de *outliers* puede estar asociada ya sea a algunos errores de tipo mecánico inherentes a las mediciones hechas con el espectrómetro, o a las mediciones y cálculo de densidad de las muestras. La presencia de tres *outliers* en esta muestra no permitió un buen ajuste de los datos; sin embargo, al removerlos el coeficiente de determinación R^2 sólo aumentó desde 0,56 a 0,60 para el conjunto de predicción.

Desarrollo y aplicación de las calibraciones PCA. Los estadísticos de calibración corresponden al número de componentes con el cual se obtuvo un coeficiente de determinación (conjunto de predicción) similar a aquél obtenido en el análisis con PLS (cuadro 3). Las calibraciones desarrolladas para cada grupo de muestra proporcionaron los valores más altos de R^2 , los cuales fluctuaron entre 0,80 y 0,96 ($P < 0,05$).

Al igual que en el caso de PLS, los mejores resultados de predicción se obtuvieron con las calibraciones PCA al utilizar el espectro NIR del grupo de polvo seco de astillado. Para similares valores de R^2 en el conjunto de predicción (0,85 con PLS, 0,83 con PCA), se obtuvieron similares valores de R^2 con el modelo de calibración (0,90 con PLS, 0,91 con PCA). Con el modelo de calibración desarrollado con PCA para el grupo de astillas verdes se obtuvo un valor de R^2 más alto que con PLS (0,96 para PCA y 0,89 para PLS). Por el contrario, para el grupo de astillas secas, con PCA se obtuvo un menor valor de R^2 (0,80) que con PLS (0,95).

DISCUSIÓN Y CONCLUSIONES

Este estudio ha demostrado la utilidad y potencial de la espectroscopia NIR para predecir la densidad de la madera de pino oregón basado en muestras de astillas. Con PLS, los modelos de calibración dieron mejores resultados con ambas muestras secas (astillas y polvo de astillado); los valores de SEC expresados como un porcentaje de la media fueron 1,6% y 2,7%, respectivamente. Por otra parte, los modelos de predicción dieron mejores resultados para las astillas verdes y polvo seco de astillado; los valores de SEP expresados como porcentaje de la media fueron 5,5% y 3,6%, respectivamente. Los errores estándar de las predicciones usando las muestras de astillas secas fueron relativamente mayores en comparación a los errores estándar de los otros dos grupos.

Cuadro 3. Resumen de calibraciones con análisis de componentes principales para estimar la densidad básica usando la información espectral de las muestras.

Summary of calibrations with principal components regression developed for estimating basic density using spectra collected from the samples.

Tipo de muestra	Conjunto de calibración				Conjunto de predicción		
	Nº de componentes	R ²	SEC	Nº de muestras	R ²	SEP	Nº de muestras
Astillas verdes	30	0,96*	23,7	65	0,73*	31,3	35
Astillas secas	15	0,80*	32,0	25	0,58*	46,4	25
Polvo seco de astillado	20	0,91*	28,5	25	0,83*	26,8	25

* $P < 0,05$. SEC = error estándar de calibración. SEP = error estándar de predicción.

Los valores de R² para las densidades básicas pronosticadas con NIR fluctuaron entre 0,56 ($P < 0,001$), para las muestras de astillas secas, y 0,85 ($P < 0,001$) para las muestras de polvo seco de astillado. Con las muestras de astillas verdes se obtuvo un valor intermedio de R² de 0,74 ($P < 0,001$). Estos valores de R² son similares a aquéllos reportados por So *et al.* (2002) y por Schimleck *et al.* (2003), para madera sólida de *Pinus taeda* L., los que fueron 0,67 y 0,74, respectivamente.

Con el uso de PCA, tanto en el conjunto de calibración como en el de predicción se observó un importante incremento en los errores estándar, lo cual revela diferencias entre las dos técnicas estadísticas. Básicamente esto se debe al mecanismo utilizado para desarrollar las calibraciones. De manera de reducir la covarianza entre estos dos grupos, PLS extrae variables latentes que descomponen tanto las variables independientes como las dependientes. PCA extrae un número de componentes de un conjunto específico de variables (generalmente las independientes), y en un segundo paso éstas pueden correlacionarse a la variable dependiente mediante un modelo de regresión (Abdi 2003).

Debido a que PCA no captura la información de las variables dependientes al mismo tiempo que las independientes, el modelo de calibración final puede tener mayores errores residuales estándar. Así, se requiere un número mayor de componentes para obtener valores de R² similares a aquéllos obtenidos con PLS.

Thygesen (1994) reportó valores de R² para virutas verdes de *norway spruce* (0,75), las cuales fueron similares a las muestras de astillas verdes (0,74) obtenidas en este estudio. Sin embargo, Thygesen (1994) también reportó valores significativamente mayores para virutas secas (0,89) que las que se encontraron para muestras de astillas secas obtenidas en este estudio.

Kelley *et al.* (2001) han reportado que las mediciones de NIR en muestras de madera sólida verde pueden ser usadas para predecir la rigidez de madera seca de álamo con bastante precisión. Schimleck *et al.* (2003) encontraron que las mediciones de NIR en muestras de madera verde

pueden ser usadas para predecir la densidad de madera seca de *Pinus taeda*. Los resultados del presente estudio confirman los resultados obtenidos en estos trabajos y revelan la posibilidad de usar la espectroscopia NIR de las muestras de astillas verdes para predecir las propiedades de la madera (tales como densidad) en tiempo real, haciendo innecesario el secado de las muestras antes del análisis. Así, estos resultados abren las puertas al uso de la tecnología NIR para la segregación de rollizos por medio de equipos de cosecha mecanizada.

En este estudio, el espectro NIR en el grupo de astillas verdes se obtuvo a partir de una muestra dispersa colocada en una placa petri, la cual a su vez se ubicó sobre una tornamesa girando a velocidad lenta. Aunque es posible coleccionar muestras de astillas verdes de esta manera, sería preferible hacer las mediciones de las astillas cuando éstas son expulsadas al momento de cortar los rollizos. Esto implica obtener las mediciones de astillas dispersas moviéndose a altas velocidades. Axrup *et al.* (2000) usaron exitosamente la espectroscopia para hacer un análisis químico de astillas moviéndose a velocidades de 1 m s⁻¹ sobre una cinta transportadora. Por lo tanto, se requiere de más información para confirmar si es posible hacer mediciones confiables de densidad de la madera a partir de astillas verdes al momento que éstas son expulsadas durante el procesamiento de los rollizos.

Por otra parte, para operar en “tiempo real”, las mediciones NIR debieran tomar sólo unos pocos segundos. Kelley *et al.* (2004b) han demostrado que algunas propiedades de la madera, como resistencia y rigidez, pueden pronosticarse con una ligera disminución (~ 0,05) en el valor de R² al usarse un rango espectral reducido (650-1.050 nm). Ellos afirman que un rango espectral reducido permitiría el uso de espectrómetros mucho más pequeños, más rápidos y de menor precio.

De este estudio, se puede concluir que:

- a) a partir de muestras de astilla, se pueden desarrollar modelos de calibración para estimar la densidad de la madera de pino oregón utilizando espectroscopia NIR.

- b) Con el uso de astillas verdes y NIR, los resultados son ligeramente inferiores a aquellos obtenidos con muestras de polvo seco de astillado.
- c) Con ambas técnicas estadísticas multivariada, PLS o PCA, es posible desarrollar modelos de calibración para predecir propiedades de la madera. Aunque PLS es una técnica más compleja y no incorporada en muchos paquetes estadísticos, permite desarrollar modelos más precisos ya que tiene la capacidad de extraer información tanto de las variables independientes (explicativas) como de las dependientes (respuesta).
- d) Se requiere de otros estudios para determinar la validez de la tecnología NIR y su capacidad para estimar la densidad de la madera en tiempo real (y otras propiedades de la madera) a bajo costo.

AGRADECIMIENTOS

Este estudio fue parcialmente financiado por el Centro para la Utilización de la Madera del Departamento de Agricultura de los Estados Unidos. Agradecemos la asistencia del Dr. Stephen Kelley, quien se desempeñaba como investigador del Laboratorio Nacional de Energía Renovable al momento de obtener los espectros NIR.

REFERENCIAS

- Abdi H. 2003. Partial Least Squares (PLS) regression. In Lewis-Beck M, A Bryman, T Futing eds. Encyclopedia of Social Sciences Research Methods. Thousand Oaks (CA): Sage.
- Acuna M, G Murphy. 2006. Geospatial and within variation of wood density and spiral grain in Douglas-fir. *For. Prod. J.* 56(4): 81-85.
- Andrews M. 2002. Wood quality measurement – *son et lumiere*. *NZ J. For.* 47(3): 19-21.
- Antii H. 1999. Multivariate characterization of wood related materials. Doctoral thesis. Umea University. Department of Chemistry. Umea. Sweden. 86 p.
- Axrup L, K Markides, T Nilsson. 2000. Using miniature diode array NIR spectrometers for analyzing wood chips and bark samples in motion. *J. Chemometrics* 14: 561-572.
- Bailleres H, F Davrieux, F Ham-Pichavant. 2002. Near infrared analysis as a tool for rapid screening of some major wood characteristics in a eucalyptus breeding program. *Annals For. Sc.* 59: 479-490.
- Barbour RJ, RM Kellogg. 1990. Forest Management and end-product quality: a Canadian perspective. *Can. J. For. Res.* 20: 405-414.
- Carter P, D Briggs, RJ Ross, X Wang. 2005. Acoustic testing to enhance western forest values and meet customer wood quality needs. In Harrington CA, SH Schoenholtz eds. Productivity of Western forests: a forest products focus. Gen. Tech. Rep. PNW-GTR-642. Portland, OR: U.S. Department of Agriculture, Forest Service, Pacific Northwest Research Station. 176 p.
- Davies MC. 2005. An introduction to near infrared spectroscopy. *NIR news* (16)7: 9-11.
- Dryden G. 2003. Near infrared reflectance spectroscopy: applications in deer nutrition. RIRDC Publication N°. W03/007. Rural Industries Research and Development Corporation. Barton, ACT, Australia. 38 p.
- Gartner BL, EM North, GR Johnson, R Singleton. 2002. Effects of live crown on vertical patterns of wood density and growth in Douglas-fir. *Can. J. For. Res.* 32: 439-447.
- Hughes JF. 1967. Density as an index of wood quality with special reference to the development of rapid and efficient methods of estimating density. In Proceedings of the Tropical Forestry Meeting by Commonwealth Forestry Institution. Oxford. p. 1-4.
- Jones PD, LR Schimleck, GF Peter, RF Daniels, A Clark III. 2005. Nondestructive estimation of *Pinus taeda* L. wood properties for samples from a wide range of sites in Georgia. *Can. J. For. Res.* 35: 85-92.
- Kelley SS, BR Hames, RR Meglen. 2001. Use of near infrared spectroscopy for characterization of wood. Presentation abstract from 5th International Biomass Conference of the Americas. 2 p. Consultado 6 Enero 2006. Disponible en <http://www.biomass.govtools.us/pdfs/bcota/abstracts/29/z362.pdf>
- Kelley SS, TG Rials, R Snell, LH Groom, A Sluiter. 2004a. Use of near infrared spectroscopy to measure the chemical and mechanical properties of solid wood. *Wood Sci. Technol.* (38):257-276.
- Kelley SS, TG Rials, LH Groom, C So. 2004b. Use of near infrared spectroscopy to predict the mechanical properties of six softwoods. *Holzforchung* 58(3): 252-260.
- Kennedy RW. 1995. Coniferous wood quality in the future: concerns and strategies. *Wood Sci. Technol.* 29(5): 321-338.
- Kludt KD. 2003. Use of near infrared spectroscopy technology for predicting bending properties of clear wood specimens. MSc Thesis. Washington State University. USA. 86 p.
- Martens H, T Naes. 1991. Multivariate calibration. Wiley. 419 p.
- McKeever DB. 2000. Timber and fiber demand and technology assessment: Demand for engineered products. USDA Forest Service, Forest Products Laboratory. 2 p.
- Megraw RA. 1986. Douglas-fir wood properties. In Oliver C, D Hanley, J Johnson eds. Douglas-fir: Stand management for the future. Inst. of For. Res. Contrib. 55. College of Forest Resources, University of Washington, Seattle. p. 81-96.
- Michell AJ. 1995. Pulpwood quality estimation by near infrared spectroscopic measurements on eucalypt woods. *APPITA J.* 48(6): 425-428.
- Reeves JB III, SR Delwiche. 2003. SAS partial least squares regression for analysis of spectroscopic data. *J. Near Infrared Spectr.* 11: 415-431.
- Schuler A, A Craig. 2003. Demographics, the housing market, and demand for building materials. *For. Prod. J.* 53(5): 8-17.
- Sefara NL, D Conradie, P Turner. 2000. Progress in the use of near-infrared absorption spectroscopy as a tool for the rapid determination of pulp yield in plantation eucalypts. *TAPPSA J.* 53(11):15-17.
- Schimleck LR, AJ Michell, CA Raymond, A Muneri. 1999. Estimation of basic density of *Eucalyptus globulus* using near-infrared spectroscopy. *Can. J. For. Res.* 29: 194-201.
- Schimleck LR, R Evans, J Ilic. 2001. Estimation of *Eucalyptus delegatensis* wood properties by near infrared spectroscopy. *Can. J. For. Res.* 31(10): 1671-1675.

- Schimleck LR, R Evans, J Ilic, AC Matheson. 2002. Estimation of wood stiffness of increment cores by near-infrared spectroscopy. *Can. J. For. Res.* 32(1): 129-135.
- Schimleck LR, Y Yazaki. 2003. Analysis of *Pinus radiata* D. Don bark by near infrared spectroscopy. *Holzforschung* 57: 520-526.
- Schimleck LR, C Mora, RF Daniels. 2003. Estimation of the physical wood properties of green *Pinus taeda* radial samples by near infrared spectroscopy. *Can. J. For. Res.* 33: 2297-2305.
- Schimleck LR, PD Jones, GF Peter, RF Daniels, A Clark III. 2004. Nondestructive estimation of tracheid length from sections of radial wood strips by near infrared spectroscopy. *Holzforschung* 58: 375-381.
- Shao J. 2003. Linear model selection by cross-validation. *J. Am. Stat. Assoc.* 88: 486-494.
- So CL, LH Groom, TG Rials, R Snell, S Kelley, R Meglen. 2002. Rapid assessment of the fundamental property variation of wood. In Outcalt KW eds. Proceedings of the 11th Biennial Southern Silvicultural Research Conference. USDA Forest Service, Southern Research Station, General Technical Report SRS-48. 622 p.
- So CL, BK Kia, LH Groom, LR Schimleck, TF Shupe, SS Kelley, TM Rials. 2004. Near infrared spectroscopy in the forest products industry. *For. Prod. J.* 54(3):6-16.
- Terdwongworakul A, V Punsuwan, W Thanapase, S Tsuchikawa. 2005. Rapid assessment of wood chemical properties and pulp yield of *Eucalyptus camaldulensis* in Thailand tree plantations by near infrared spectroscopy for improving wood selection for high quality pulp. *J. Wood Sci.* 51: 167-171.
- Thygesen LG. 1994. Determination of dry matter content and basic density of Norway spruce by near infrared reflectance and transmittance. *J. Near Infrared Spectr.* 2: 127-135.
- Tian X. 1999. An application of computer vision technologies to log defect determination. PhD Thesis. Lincoln University, New Zealand. 329 p.
- Tigabu M. 2003. Characterization of forest tree seed quality with near infrared spectroscopy and multivariate analysis. Doctoral Thesis. Swedish University of Agricultural Sciences. Department of Silviculture. Umea. 56 p.
- Tobias R. 1995. An Introduction to Partial Least Squares Regression. In Proceedings of the Twentieth Annual SAS Users Group International Conference, Cary, NC: SAS Institute Inc. p. 1250-1257.
- Via BK. 2004. Modeling Longleaf pine (*Pinus palustris* Mill) wood properties using near infrared spectroscopy. Doctoral Thesis. Louisiana State University, Agricultural and Mechanical College. 141 p.
- Via BK, T Shupe, L Groom, M Stine, C So. 2003. Multivariate modeling of density, strength and stiffness from near infrared spectra for mature, juvenile and pith wood of longleaf pine (*Pinus palustris*). *J. Near Infrared Spectr.* 11: 365-378.
- Workman JJ. 2001. NIR Spectroscopy calibration basics. In Burns DA, EW Ciurczak eds. Handbook of Near-Infrared Analysis. New York. 814 p.
- Wright J, M Birkett, M Gambino. 1990. Prediction of pulp yield and cellulose content from wood using Near Infrared Reflectance spectroscopy. *TAPPI J.* 73: 164-166.
- Young GG. 2002. Radiata pine wood quality assessments in the 21st century. *NZ J. For.* 47(3): 16-18.

Recibido: 30.06.06
Aceptado: 30.07.07