

Ближняя инфракрасная спектроскопия

в судебно-экспертных исследованиях древесины

Древесина – распространенный элемент вещной обстановки на месте происшествия или следственных действий при расследовании различных преступлений: направленных против жизни и здоровья граждан, безопасности движения и эксплуатации транспорта, собственности и порядка осуществления экономической деятельности, против экологической безопасности, окружающей среды и порядка природопользования и др. По этой причине изделия, изготовленные из дерева, довольно часто изымаются и приобщаются к делу в качестве вещественного доказательства.



Анна Хох,
завлабораторией исследования материалов, веществ и изделий научного отдела технических, криминалистических и специальных исследований Научно-практического центра Государственного комитета судебных экспертиз Республики Беларусь;
1ann1hoh@gmail.com

Аннотация. Статья посвящена актуальным вопросам повышения эффективности судебно-экспертных исследований древесины за счет применения инновационных технологий. Оценены возможности использования спектроскопии в ближней инфракрасной области для установления (подтверждения) видовой принадлежности древесины, рассмотрены основные хемометрические алгоритмы создания классификационных моделей в случае многообъектной и бинарной систематизации. Показано, что важным условием для правильной интерпретации спектральных данных является наличие постоянно обновляемой базы эталонных (референтных) БИК-спектров.

Ключевые слова: спектроскопия в ближней инфракрасной области, хемометрические алгоритмы, древесина, сосна обыкновенная, судебная экспертиза, классификационные модели, видовая принадлежность.

Для цитирования: Хох А. Ближняя инфракрасная спектроскопия в судебно-экспертных исследованиях древесины // Наука и инновации. 2024. №11. С. 65–70.

<https://doi.org/10.29235/1818-9857-2024-11-65-70>

Нередки случаи, когда ответить на поставленные перед экспертом вопросы, зная лишь морфолого-анатомические признаки строения древесины и применяя микроскопические методы, не представляется возможным. Однако ориентация на науку и инновации как фактор развития в том числе и судебно-экспертной деятельности позволяет повысить качество исследований за счет включения современных экспериментальных подходов, дающих возможность

«считывать» не задействованные ранее слои информации. Так, ряд экспертных задач может быть успешно решен с помощью спектроскопии в ближней инфракрасной области (БИК-спектроскопии).

Метод используется в работе Научно-практического центра Государственного комитета судебных экспертиз Республики Беларусь с 2019 г. [1] и основан на интенсивном поглощении или отражении излучения твердыми веществами в диапазоне электромагнитного излучения с длиной волны от 750 до 2500 нм, или с волновыми числами от 13 333 до 4000 см⁻¹ [2]. Его основные преимущества заключаются в автоматизации процесса исследования, его экспрессности, а также отсутствии расходных материалов.

В данной статье рассмотрены примеры применения БИК-спектроскопии для установления (подтверждения) видовой принадлежности древесины, которые демонстрируют ее эффективность в консультативной практике. Во всех случаях фигурирует древесина сосны обыкновенной (*Pinus sylvestris* L.), которая по причине своей распространенности в Республике Беларусь является наиболее частым объектом судебных экспертиз.

В первом примере рассмотрен случай многообъектной классификации с применением линейного дискриминантного анализа (ЛДА) [3].

Помимо указанных образцов в исследование были включены опытные пробы сосны сибирской кедровой (*Pinus sibirica* Du Tour), лиственницы европейской (*Larix decidua* Mill.), пихты белой (*Abies alba* L.), ели обыкновенной (*Picea abies* (L.) Karst.) размером 20×60×150 мм (вдоль волокон) из ксилотеки Белорусского государственного технологического университета и натурной коллекции Центра, прошедшие проверку подлинности, а также реальные объекты судебных экспертиз. Для каждой породы количество изученных образцов составило от 60 до 84.

Для изучения в ближнем ИК-диапазоне все пробы материала были подвергнуты естественной сушке. Перед проведением измерений их влажность не превышала 20% (использовался влагомер «Testo 606-1», Китай). БИК-спектры были получены с помощью портативного БИК-спектрометра MicroNIR OnSite с диодно-матричным детектором (VIAVI, США) в диапазоне 10526–6060 см⁻¹ в режиме диффузного отражения с разрешением 2 см⁻¹ после усреднения накопленных спектрограмм, содержащих 64 сканирования. Для регистрации спектров применяли программный пакет MicroNIR™ Pro 1700 (версия 2.5.1) (VIAVI, США). Все измерения проводились в контролируемой влажности (<60%) и при 20°C. Для каждого объекта исследований записывали

не менее 20 спектров на случайно выбранных участках.

Поскольку БИК-спектры очень похожи между собой и различаются только по интенсивности диффузного отражения, задействовать их напрямую затруднительно. В связи с этим извлечение из них информации базируется на хемометрических алгоритмах анализа [4], которые относятся к предсказательным аналитическим методам (prediction methods) [5].

Перед построением классификационных моделей проводилась предварительная обработка БИК-спектров, которая заключалась в вычислении производной второго порядка по методу Савицкого – Голея (с использованием 7 сглаживающих точек).

На рис. 1 показан общий вид БИК-спектров 5 исследованных древесных пород без обработки, на рис. 2 – спектры после вычисления производных второго порядка.

На первом этапе полученные спектральные данные анализировались с помощью метода главных компонент (МГК) – базового подхода в хемометрике (без обучения) [6]. Его применение позволяет не только классифицировать объекты, но и получить представление о степени их сходства или отличия в количественном (процентном) выражении.

Как при проведении МГК, так и при построении моделей использовался алгоритм нелинейного итерационного проецирования при помощи чередующихся наименьших квадратов (NIPALS), который является разновидностью степенного метода и предусматривает переход к новому переменному пути последовательных приближений [7].

На рис. 3 представлены полученные результаты (ГК-1 объясняет 77% общей дисперсии), все исследованные пробы объединены в 2 группы (показаны штрихпунктиром):

- 1 – образцы сосны обыкновенной, сосны сибирской кедровой и лиственницы европейской;
- 2 – образцы пихты белой и ели обыкновенной.

При этом следует отметить, что в каждой из 2 групп отчетливо выделяются подгруппы, соответствующие исследованным древесным породам.

Далее БИК-спектры были случайным образом пятикратно разделены на обучающие (2/3 спектров) и тестовые (1/3) выборки. На их основе проводилось построение классификационных ЛДА-моделей.

На рис. 4 показаны результаты ЛДА-классификации обучающей выборки для одного из разбиений.

По результатам проведения ЛДА для обучающих выборок выявлено, что для сосны обыкновенной верно классифицировано 99,66±0,76 (%) наблюдений, для лиственницы европейской – 97,14±3,10 (%), для

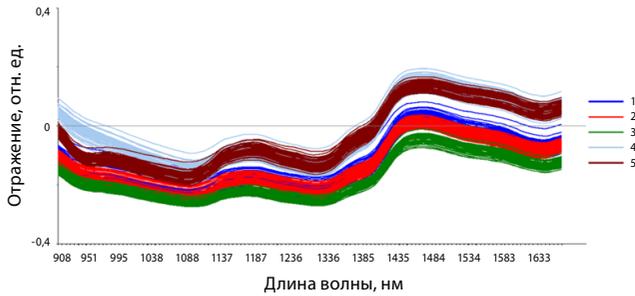


Рис. 1. Необработанные средние БИК-спектры: 1 – сосна обыкновенная; 2 – сосна сибирская кедровая; 3 – лиственница европейская; 4 – пихта белая; 5 – ель обыкновенная

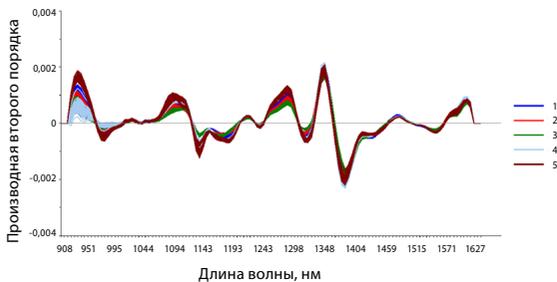


Рис. 2. Производные второго порядка усредненных БИК-спектров для каждого вида; здесь и далее пункты 1–5 соответствуют обозначениям на рис. 1

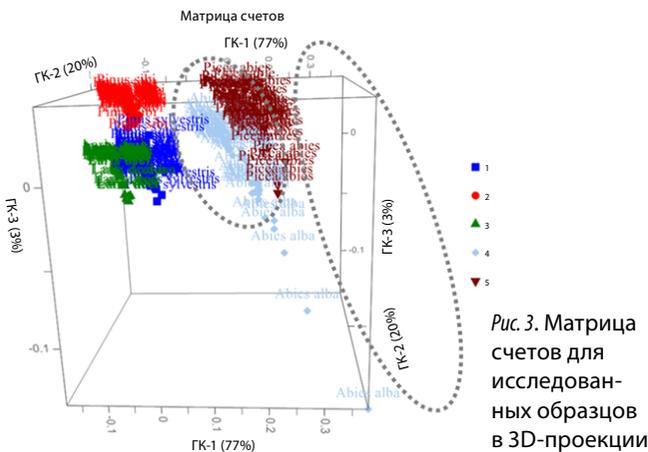


Рис. 3. Матрица счетов для исследованных образцов в 3D-проекции

пихты белой – $96,19 \pm 1,30$ (%), для сосны сибирской кедровой и ели обыкновенной – 100% (табл. 1).

Средняя точность классификации обучающих выборок составила $98,60 \pm 0,63$ (%).

По результатам проведения ЛДА для тестовых выборок было установлено, что для сосны обыкновенной верно классифицировано $96,00 \pm 4,00$ (%) наблюдений, для лиственницы европейской и пихты белой – $93,33 \pm 4,65$ (%), для сосны сибирской кедровой и ели обыкновенной – 100% (табл. 2).

Средняя точность классификации тестовых выборок составила $96,53 \pm 1,55$ (%).

Следует отметить, что наблюдается незначительный разброс значений точности для обучающих выборок и более высокий – для тестовых.

В целом, рассчитанные значения точности позволяют классифицировать новые образцы, порода которых неизвестна, в том числе и реальных экспертных объектов, с помощью ЛДА-моделей.

Во втором примере рассмотрен случай бинарной классификации, когда необходимо подтвердить или опровергнуть лишь один из двух вариантов, заранее заданный устанавливаемыми обстоятельствами дела. Для этого вместо ЛДА использовался дискриминантный анализ проекций на латентные структуры (ПЛС-ДА) [8].

Объекты исследования – те же, что и в первом опыте, – были объединены в 4 пары, в которых обязательно присутствовала сосна обыкновенная:

- пара №1: сосна обыкновенная – сосна сибирская кедровая;
- пара №2: сосна обыкновенная – лиственница европейская;
- пара №3: сосна обыкновенная – пихта белая;
- пара №4: сосна обыкновенная – ель обыкновенная.

Для анализа методом ПЛС-ДА все БИК-спектры предварительно были разделены на классы, соответствующие исследуемым образцам. Сосне

	1	2	3	4	5	Итого
1	59/58/59/59/59	0/0/0/0/0	1/0/0/0/0	0/0/0/0/0	0/0/0/0/0	60/58/59/59/59
2	0/1/0/0/0	42/42/42/42/42	2/2/1/0/0	0/0/0/0/0	0/0/0/0/0	44/45/43/42/42
3	0/0/0/0/0	0/0/0/0/0	39/40/41/42/42	0/0/0/0/1	0/0/0/0/0	39/40/41/42/43
4	0/0/0/0/0	0/0/0/0/0	0/0/0/0/0	41/40/41/40/40	0/0/0/0/0	41/40/41/40/40
5	0/0/0/0/0	0/0/0/0/0	0/0/0/0/0	1/2/1/2/1	42/42/42/42/42	43/44/43/44/43
Точность, %	100/98,31/ 100/100/100	100/100/100/ 100/100	92,86/95,24/ 97,62/100/100	97,62/95,24/ 97,62/95,24/95,24	100/100/100/ 100/100	
Средняя точность \pm SD (%) = $98,60 \pm 0,63$						

Таблица 1. Результат ЛДА-классификации обучающих выборок БИК-спектров 5 хвойных пород

Примечание. По вертикали – предсказанные группы; SD – стандартное отклонение.

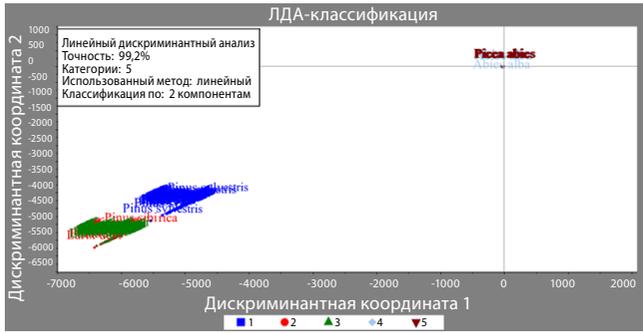


Рис. 4. Графическое представление ЛДА-модели обучающей выборки

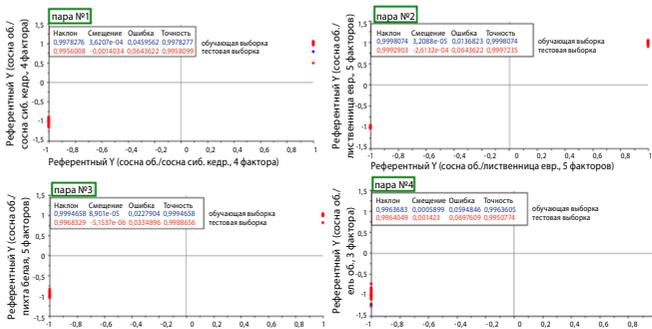


Рис. 5. Графики предсказанных/референтных значений

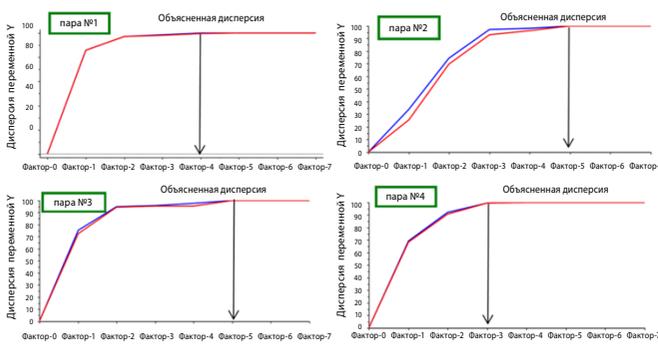


Рис. 6. Графики объясненной дисперсии

обыкновенной был присвоен класс «1»; сосне сибирской кедровой, лиственнице европейской, пихте белой и ели обыкновенной – класс «-1».

На рис. 5 показаны результаты проведения ПЛС-ДА отдельно по каждой паре с учетом пятиблочной перекрестной проверки; точность всех моделей превысила 99% и составила (среднее значение ± стандартное отклонение) для обучающих выборок:

- 99,78±0,1 (%) – пара №1,
 - 99,98±0,03 (%) – пара №2,
 - 99,95±0,05 (%) – пара №3,
 - 99,63±0,13 (%) – пара №4;
- для тестовых выборок:
- 99,58±0,14 (%) – пара №1,
 - 99,97±0,04 (%) – пара №2,
 - 99,89±0,08 (%) – пара №3,
 - 99,51±0,16 (%) – пара №4.

На рис. 6 представлены графики объясненной дисперсии, позволяющие оценить необходимое для построения классификационных моделей количество факторов. Их минимум определяется путем проведения перпендикуляра в том месте, где обе кривые, как взятые для построения (красная), так и для проверки (синяя), стремятся к значению, равному 100%: в таком случае для построения классификационной модели будет использована вся полезная информация.

Далее полученные ПЛС-ДА-модели были задействованы для классификации образцов (по 20 для каждой пары), изначально не применявшихся при построениях моделей. В табл. 3–6 и на рис. 7–10 суммированы полученные результаты.

С учетом рассчитанных прогнозируемых значений исследованные неизвестные образцы с использованием построенных моделей для пар №2 и №3 были классифицированы правильно, при этом стандартное отклонение ни в одном случае не превысило 0,1. В случае классификационной модели для пар №1 и

	1	2	3	4	5	Итого
1	59/58/59/59/59	0/0/0/0/0	1/0/0/0/0	0/0/0/0/0	0/0/0/0/0	60/58/59/59/59
2	0/1/0/0/0	42/42/42/42/42	2/2/1/0/0	0/0/0/0/0	0/0/0/0/0	44/45/43/42/42
3	0/0/0/0/0	0/0/0/0/0	39/40/41/42/42	0/0/0/0/1	0/0/0/0/0	39/40/41/42/43
4	0/0/0/0/0	0/0/0/0/0	0/0/0/0/0	41/40/41/40/40	0/0/0/0/0	41/40/41/40/40
5	0/0/0/0/0	0/0/0/0/0	0/0/0/0/0	1/2/1/2/1	42/42/42/42/42	43/44/43/44/43
Точность, %	100/98,31/ 100/100/100	100/100/100/ 100/100	92,86/95,24/ 97,62/100/100	97,62/95,24/ 97,62/95,24/95,24	100/100/100/ 100/100	
Средняя точность ± SD (%) = 98,60±0,63						

Таблица 2. Результат ЛДА-классификации тестовых выборок БИК-спектров 5 хвойных пород
Примечание. По вертикали – предсказанные группы; SD – стандартное отклонение.

№4 при систематизации неизвестных образцов для №14 (ПЛС-ДА-модель, пара №1) и №20 (ПЛС-ДА-модель, пара №4) были получены прогностические значения, не позволяющие достоверно отнести их ни к одному из 2 классов. В таких случаях требуется в обязательном порядке проводить микроскопическое исследование, вывод на основании только спектрального анализа невозможен.

Таким образом, по результатам представленных исследований доказана эффективность применения БИК-спектроскопии в сочетании с хемометрическими алгоритмами анализа при проведении судебной экспертизы древесины.

Установлено, что материал сосны обыкновенной можно отличить от образцов других хвойных пород (таких как сосна сибирская кедровая, лиственница европейская, пихта белая и ель обыкновенная), даже несмотря на их схожие спектральные профили. Распознавание проводится после вычисления производных второго порядка с использованием линей-

ного дискриминантного анализа. Разработанные классификационные модели позволили провести объективную идентификацию с достаточно высокой достоверностью. Средняя точность классификации обучающих выборок составила $98,60 \pm 0,63$ (%), тестовых – $96,53 \pm 1,55$ (%). В тех случаях, когда требуется отличить древесину сосны обыкновенной только от одной из прочих хвойных пород, дифференциация проводится по БИК-спектрам после вычисления производных второго порядка с использованием дискриминантного анализа проекций на латентные структуры. При этом точность бинарной классификации, в отличие от многообъектной, выше: во всех изученных нами случаях она составила $>99,5\%$.

Необходимо отметить, что важным условием для правильной интерпретации полученных результатов выступает наличие постоянно обновляемой базы эталонных (референтных) БИК-спектров как естественно произрастающих в Республике Беларусь, так и иноземных древесных пород с разных континентов.

Неизвестные образцы (сосна об./ сосна сиб. кедр., 4 фактора)	Прогнозируемое значение	±SD
Образец 1	0,991	0,013
Образец 2	0,976	0,026
Образец 3	0,978	0,019
Образец 4	0,991	0,012
Образец 5	0,998	0,014
Образец 6	0,990	0,013
Образец 7	0,980	0,016
Образец 8	0,981	0,016
Образец 9	0,989	0,031
Образец 10	0,990	0,043
Образец 11	-0,923	0,063
Образец 12	-0,917	0,069
Образец 13	-0,942	0,084
Образец 14	0,781	0,393
Образец 15	-0,952	0,097
Образец 16	-0,947	0,090
Образец 17	-0,928	0,097
Образец 18	-0,947	0,075
Образец 19	-0,957	0,039
Образец 20	-0,946	0,033

Таблица 3. Результаты классификации неизвестных образцов (ПЛС-ДА-модель, пара №1)
Примечание. SD – стандартное отклонение.

Неизвестные образцы (сосна об./ лиственница евр., 5 факторов)	Прогнозируемое значение	±SD
Образец 1	0,998	0,003
Образец 2	0,999	0,005
Образец 3	0,992	0,007
Образец 4	0,994	0,006
Образец 5	1,001	0,004
Образец 6	0,993	0,006
Образец 7	0,982	0,012
Образец 8	0,993	0,006
Образец 9	1,021	0,015
Образец 10	1,034	0,022
Образец 11	-0,993	0,006
Образец 12	-0,997	0,005
Образец 13	-0,998	0,004
Образец 14	-0,997	0,005
Образец 15	-0,996	0,006
Образец 16	-0,994	0,006
Образец 17	-0,989	0,009
Образец 18	-0,989	0,009
Образец 19	-0,992	0,007
Образец 20	-0,974	0,018

Таблица 4. Результаты классификации неизвестных образцов (ПЛС-ДА-модель, пара №2)
Примечание. SD – стандартное отклонение.

Неизвестные образцы (сосна об./ пихта белая, 5 факторов)	Прогнозируемое значение	±SD
Образец 1	1,001	0,006
Образец 2	0,994	0,010
Образец 3	0,997	0,011
Образец 4	1,002	0,008
Образец 5	1,002	0,009
Образец 6	1,001	0,008
Образец 7	1,001	0,017
Образец 8	0,997	0,010
Образец 9	0,990	0,020
Образец 10	0,987	0,029
Образец 11	-0,952	0,032
Образец 12	-0,963	0,023
Образец 13	-0,982	0,014
Образец 14	-0,987	0,012
Образец 15	-0,986	0,012
Образец 16	-0,981	0,025
Образец 17	-0,985	0,031
Образец 18	-0,990	0,021
Образец 19	-0,986	0,016
Образец 20	-0,989	0,013

Таблица 5. Результаты классификации неизвестных образцов (ПЛС-ДА-модель, пара №3)
Примечание. SD – стандартное отклонение.

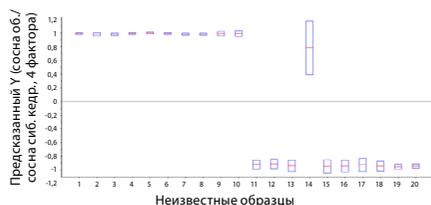


Рис. 7. Разделение неизвестных образцов: 1 – сосна обыкновенная; -1 – сосна кедровая сибирская

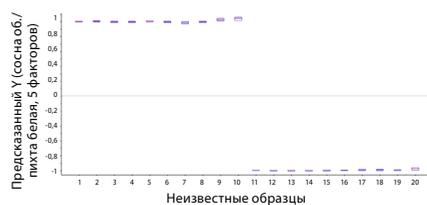


Рис. 9. Разделение неизвестных образцов: 1 – сосна обыкновенная; -1 – пихта белая

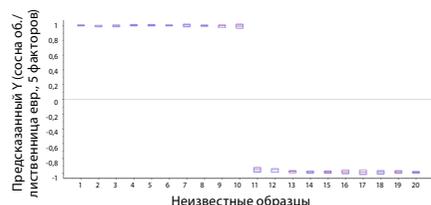


Рис. 8. Разделение неизвестных образцов: 1 – сосна обыкновенная; -1 – лиственница европейская

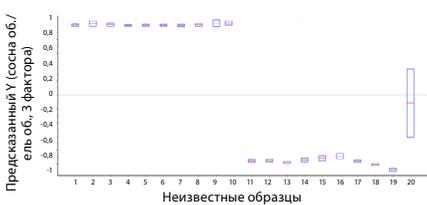


Рис. 10. Разделение неизвестных образцов: 1 – сосна обыкновенная; -1 – ель обыкновенная

■ **Summary.** The article is devoted to topical issues of increasing the efficiency of forensic wood research through the use of innovative technologies. It evaluates the possibilities of using spectroscopy in the near-infrared region to establish (confirm) the species of wood, and examines the main chemometric algorithms for creating classification models in the case of multi-object and binary classification. It is shown that an important condition for the correct interpretation of spectral data is the presence of a constantly updated database of standard (reference) NIR spectra.

■ **Keywords:** near-infrared spectroscopy, chemometric algorithms, wood, Scots pine, forensic examination, classification models, species identification.

■ <https://doi.org/10.29235/1818-9857-2024-11-65-70>

Неизвестные образцы (сосна об./ель об., 3 фактора)	Прогнозируемое значение	±SD
Образец 1	1,006	0,015
Образец 2	1,028	0,040
Образец 3	1,014	0,024
Образец 4	1,000	0,013
Образец 5	1,002	0,014
Образец 6	1,003	0,014
Образец 7	1,001	0,017
Образец 8	1,010	0,020
Образец 9	1,032	0,050
Образец 10	1,056	0,029
Образец 11	-0,954	0,020
Образец 12	-0,952	0,020
Образец 13	-0,977	0,016
Образец 14	-0,942	0,029
Образец 15	-0,915	0,037
Образец 16	-0,887	0,039
Образец 17	-0,959	0,016
Образец 18	-1,010	0,013
Образец 19	-1,083	0,025
Образец 20	-0,122	0,494

Таблица 6. Результаты классификации неизвестных образцов (ПЛС-ДА-модель, пара №4)

Примечание. SD – стандартное отклонение.

С ее помощью проводится сравнение неизвестных образцов с имеющимися в базе, и на этой основе осуществляется классификация. Однако установление достаточной совокупности спектральных информационных маркеров в БИК-диапазоне возможно не всегда. Поэтому в ряде случаев для получения категоричных выводов БИК-спектроскопия рекомендована при проведении судебно-экспертных исследований древесины в комплексе с традиционными морфологическими и микроскопическими методами.

Автор полагает, что благодаря быстрой (за доли секунды) регистрации спектров, а также возможности использования БИК-спектрометра непосредственно на месте происшествия сферы применения БИК-спектроскопии в экспертной практике в Республике Беларусь уже в ближайшем будущем будут только расширяться. ■

Статья поступила в редакцию 20.05.2024 г.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Khokh A. Using molecular near infrared spectroscopy in investigation of offences connected with illegal forestry activity / A. Khokh, V. Zvyagintsev // *Legea și Viața*. 2019. Vol. 328, №4. P. 8–10.
2. De Oliveira R.R. Experimental design, near-infrared spectroscopy, and multivariate calibration: an advanced project in a chemometrics course / R.R. de Oliveira, L.S. das Neves, K.M. G. de Lima // *Journal of chemical education*. 2012. Vol. 89, №12. P. 1566–1571.
3. Tharwat A. Linear discriminant analysis: A detailed tutorial / A. Tharwat [et al.] // *AI communications*. 2017. Vol. 30, №2. P. 169–190.
4. Sauzier G. Chemometrics in forensic science: approaches and applications / G.Sauzier, W. van Bronswijk, S.W. Lewis // *Analyst*. 2021. V. 146, №8. P. 2415–2448.
5. Bystrzanowska M. Chemometrics for selection, prediction, and classification of sustainable solutions for green chemistry – A review / M. Bystrzanowska, M. Tobiszewski // *Symmetry*. 2020. Vol. 12, №12. P. 2055.
6. Labrín C., Urdinez F. Principal component analysis // *R for Political Data Science*. – Chapman and Hall / CRC, 2020. P. 375–393.
7. Ochoa-Muñoz, A.F. Missing data in multiple correspondence analysis under the available data principle of the NIPALS algorithm / A.F. Ochoa-Muñoz, V.M. González-Rojas, C.E. Pardo // *Dyna*. 2019. Vol. 86, №211. P. 249–257.
8. Ballabio D. Classification tools in chemistry. Part 1: linear models. PLS-DA / D. Ballabio, V. Consonni // *Analytical methods*. 2013. Vol. 5, №16. P. 3790–3798.