



LUANA MARIA DOS SANTOS

**MÉTODOS DE APRENDIZAGEM DE MÁQUINA PARA
PREDIÇÃO DE UMIDADE E DENSIDADE BÁSICA DA
MADEIRA A PARTIR DE ESPECTROS NO NIR**

**LAVRAS – MG
2022**

LUANA MARIA DOS SANTOS

**MÉTODOS DE APRENDIZAGEM DE MÁQUINA PARA PREDIÇÃO DE UMIDADE
E DENSIDADE BÁSICA DA MADEIRA A PARTIR DE ESPECTROS NO NIR**

Tese apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia da Madeira, para a obtenção do título de Doutora.

Prof. Dr. Natalino Calegario
Orientador

Prof. Dr. Paulo Ricardo Gherardi Hein
Coorientador

LAVRAS – MG

2022

Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema de Geração de Ficha Catalográfica da Biblioteca Universitária da UFLA, com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).

Santos, Luana Maria dos.

Métodos de aprendizagem de máquina para predição de umidade e densidade básica da madeira a partir de espectros no NIR / Luana Maria dos Santos. - 2022.

62 p.

Orientador(a): Natalino Calegario.

Coorientador(a): Paulo Ricardo Gherardi Hein.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Lavras, 2022.

Bibliografia.

1. Madeira. 2. NIR. 3. Densidade básica. I. Calegario, Natalino. II. Gherardi Hein, Paulo Ricardo. III. Título.

LUANA MARIA DOS SANTOS

**MÉTODOS DE APRENDIZAGEM DE MÁQUINA PARA PREDIÇÃO DE UMIDADE
E DENSIDADE BÁSICA DA MADEIRA A PARTIR DE ESPECTROS NO NIR**

**MACHINE LEARNING METHODS FOR THE PREDICTION OF MOISTURE AND
BASIC DENSITY OF WOOD FROM NIR SPECTRUM**

Tese apresentada à Universidade Federal de Lavras,
como parte das exigências do Programa de Pós-
graduação em Ciência e Tecnologia da Madeira, área
de concentração Ciência e Tecnologia da Madeira, para
obtenção do título de doutor.

APROVADA em 29 de julho de 2022.

Dr. Allan Motta Couto - UEMS

Dra. Lívia Cassia Viana - UFT

Dra. Jordão Cabral Moulin – UFES

Dr. Graziela Baptista Vidaurre – UFES

Orientador

Prof. Dr. Natalino Calegario

Coorientador

Prof. Dr. Paulo Ricardo Gherardi Hein

LAVRAS – MG

2022

AGRADECIMENTOS

Agradeço, primeiramente, a Deus por sempre iluminar todos os meus caminhos, concedendo sabedoria para não desistir diante dos obstáculos.

Aos meus pais Anildo e Benta pelo amor, exemplo, apoio, segurança e compreensão nos momentos de ausência e por sempre apoiarem minhas decisões, sendo os responsáveis por esta conquista.

Ao Érick Martins Nieri por todo amor, carinho, incentivo e compreensão proferidos durante esta jornada, os quais foram importantes e indispensáveis nessa etapa da minha vida.

Ao meu irmão Carlos, por todo apoio durante esta caminhada e por compreender minha ausência/distância.

À minha sogra Sueli e meu sogro Mário por me acolherem como filha e sempre me apoiarem e incentivarem.

Aos amigos que a pós-graduação me proporcionou. Evelize, Thawane, Carine e Nayara por todo incentivo, conselhos e momentos de descontração proporcionados. Vocês foram essenciais!

À todos os amigos e familiares que próximos ou distantes, sempre estão presentes em meu coração.

Ao meu comitê de orientação, Natalino Calegario e Paulo Ricardo Gherardi Hein, pela confiança, conhecimentos compartilhados, incentivo e dedicação.

Aos professores e servidores do PPGCTM pelos conhecimentos compartilhados e dedicação à profissão.

Aos membros das bancas de defesa de projeto, qualificação e tese por todas as colaborações enriquecedoras.

À Universidade Federal de Lavras (UFLA) e ao Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia da Madeira (PPGCTM) pela oportunidade de realizar este trabalho.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

RESUMO

A espectroscopia de infravermelho próximo (NIR) é uma técnica rápida e acurada que pode ser aplicada em um grande número de amostras e, quando associada à análise de regressão dos mínimos quadrado parciais e às redes neurais artificiais, tem se mostrado uma ferramenta eficiente na predição de propriedades da madeira. O objetivo deste estudo foi verificar o desempenho da Análise de Regressão dos mínimos quadrados (PLS-R) e das redes neurais artificiais (RNA) na estimativa da umidade e da densidade básica de madeira maciça e em cavacos de *Eucalyptus* spp. a partir de assinaturas espectrais no NIR. Os espectros no NIR e as massas foram medidos nos 110 cavacos e nas 110 amostras prismáticas de madeira, a cada 10% de perda de massa, da condição saturada até condição anidra, para posterior determinação da densidade básica e da umidade nas diferentes fases. Assim, a umidade e a densidade básica da madeira, obtidas pelo método convencional, foram correlacionadas com os correspondentes espectros no NIR por meio de Análise de Regressão dos mínimos quadrados (PLS-R) e Redes Neurais Artificiais (RNA). Para o desenvolvimento das RNA foi utilizado o algoritmo de aprendizagem *backpropagation* com redes do tipo *Multilayer perceptron*. A determinação da umidade dos cavacos de madeira, a partir dos espectros NIR, apresentou as melhores estimativas pelo método RNA a partir dos decis com R^2 de 0,97, RMSE de 8,83% e RPD de 5,58. A estimativa da densidade básica dos cavacos de madeira, a partir dos espectros no NIR, foram alcançadas com a RNA utilizando decis, apresentando R^2 de 0,17, RMSE de 0,02% e RPD de 1,00. A determinação de umidade dos prismas de *Eucalyptus* sp. alcançou o melhor desempenho por RNA utilizando decis com R^2 de 0,92, RMSE de 10,38% e RPD de 3,34. Já as melhores estimativas para a determinação da densidade, independente da umidade dos prismas, foram obtidas pelo modelo PLS-R com R^2 de 0,80, RMSE de 0,06 no teste e RPD de 2,00. Portanto, os modelos desenvolvidos por PLS-R e RNA, partir e espectros no NIR, demonstraram ser uma ferramenta útil para previsão rápida e precisa da umidade de cavacos e prismas de madeira *Eucalyptus*. Já a determinação da densidade básica, independente da umidade, demonstrou resultados satisfatórios apenas nos prismas de madeira por meio da PLS-R e RNA e utilizando os decis dos espectros.

Palavras-chave: Umidade. Densidade. NIR. RNA. PLS-R.

ABSTRACT

Near-infrared (NIR) spectroscopy is a fast and accurate technique that can be applied to a large number of samples and, when associated with partial least squares regression analysis and artificial neural networks, has been shown to be an efficient tool in prediction of wood properties. The objective of this study was to verify the performance of least squares regression analysis (PLS-R) and artificial neural networks (ANN) in estimating moisture and basic density of solid wood and chips of *Eucalyptus* spp. from spectral signatures in the NIR. The NIR spectra and the masses were measured in the 110 chips and in the 110 prismatic samples of wood, at every 10% of mass loss, from the saturated condition to the anhydrous condition, for later determination of the basic density and moisture in the different phases. Thus, wood moisture and basic density, obtained by the conventional method, were correlated with the corresponding spectra in the NIR by means of least squares regression analysis (PLS-R) and Artificial Neural Networks (ANN). For the development of the ANNs, the backpropagation learning algorithm was used with Multilayer perceptron networks. The determination of wood chip moisture, from the NIR spectra, presented the best estimates by the RNA method from the deciles with R^2 of 0.97, RMSE of 8.83% and RPD of 5.58. The estimate of the basic density of wood chips, from the spectra in the NIR, was reached with the ANN using deciles, presenting R^2 of 0.17, RMSE of 0.02% and RPD of 1.00. Moisture determination of *Eucalyptus* sp. achieved the best performance by RNA using deciles with R^2 of 0.92, RMSE of 10.38% and RPD of 3.34. The best estimates for the determination of density, regardless of prism moisture, were obtained by the PLS-R model with R^2 of 0.80, RMSE of 0.06 in the test and RPD of 2.00. Therefore, the models developed by PLS-R and RNA, starting and spectra in the NIR, proved to be a useful tool for fast and accurate prediction of the humidity of chips and prisms of *Eucalyptus* wood. The determination of basic density, independent of moisture, showed satisfactory results only in wooden prisms through PLS-R and RNA and using the deciles of the spectra.

Keywords: Moisture. Density. NIR. RNA. PLS-R.

LISTA DE FIGURA

Figura 1 – Espectro eletromagnético	15
Figura 2 - Representação de um neurônio biológico	23
Figura 3 – Modelo de neurônio artificial.....	24
Figura 4 - Correlação do esforço de secagem medido em laboratório e previsto no conjunto de validação usando o modelo de RNA e o modelo de regressão PLS, respectivamente.....	29
Figura 5 – Densidade básica medida em laboratório e previsto pelo NIR associado as RNA. 30	
Figura 6 – Teor de água medido em laboratório e previsto pelo NIR associado as RNA.....	31
Figura 7 - Fluxograma das etapas realizadas no trabalho.....	33
Figura 8 - Etapas de secagem de cavacos de madeira.	38
Figura 9 - Espectros de reflexão difusa e decis nas diferentes fases de umidade dos cavacos de madeira.	39
Figura 10 - Scores da análise de componentes principais dos espectros no NIR medidos em cavacos de madeira com diferentes níveis de umidade.	40
Figura 11 - Valores de umidade da madeira determinados em laboratório e estimados por RNA utilizando decil na fase de teste.	43
Figura 12 - Valores de densidade básica de cavacos de madeira determinados em laboratório e estimados por RNA utilizando decil na fase de teste.	45
Figura 13 - Etapas de secagem de cavacos de madeira.	46
Figura 14 - Espectros de reflexão difusa e decis nas diferentes fases de umidade dos prismas de madeira.	48
Figura 15 - Scores da análise de componentes principais dos espectros no NIR medidos em prismas de madeira em diferentes níveis de umidade.	49
Figura 16 – Valores de umidade da madeira determinados em laboratório e estimados por RNA utilizando decil na fase de teste.	50
Figura 17 – Valores de densidade básica de cavacos de madeira determinados em laboratório e estimados por PLS-R no modelo de teste.....	52

LISTA DE TABELA

Tabela 1 – Faixa de umidade e densidade medidas em laboratório para o desenvolvimento do modelo.	37
Tabela 2 - Modelos de treino e teste para estimar a umidade dos cavacos de madeira a partir de espectros NIR por PLS-R e RNA.	41
Tabela 3 - Modelos de treino e teste para estimar a densidade básica de cavacos de madeira em diferentes umidades a partir de espectros NIR por PLS-R e RNA.....	43
Tabela 4 – Faixa de umidade e densidade básica medidas em laboratório para o desenvolvimento do modelo dos prismas de madeira.	46
Tabela 5 - Modelos de treino e teste para estimar a umidade de primas de madeira de Eucalyptus a partir de espectros NIR por PLS-R e RNA.....	49
Tabela 6 - Modelos de treino e teste para estimar a umidade de primas de madeira de Eucalyptus a partir de espectros NIR por PLS-R e RNA.....	51

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	11
2 OBJETIVOS	13
2.1 Geral	13
2.2 Específicos	13
3 REFERENCIAL TEÓRICO	14
3.1 Espectroscopia no infravermelho próximo (NIRS)	14
3.1.1 Evolução da técnica NIRS.....	14
3.1.2 Fundamentos da técnica NIRS	15
3.2 Quimiometria	17
3.2.1 Análise de Regressão por mínimos quadrados parciais (PLS-R)	17
3.2.1.1 Definição	17
3.2.1.2 Histórico	18
3.2.1.3 Funcionamento PLS-R.....	18
3.2.1.4 Características PLS-R.....	20
3.2.2 Redes neurais artificiais	21
3.2.2.1 Histórico	21
3.2.2.2 Definição	22
3.2.2.3 Funcionamento das RNAs	23
3.2.2.4 Características das RNAs	26
3.3 Utilização da Espectroscopia no NIR associada as RNAs e PLS-R na tecnologia da madeira	28
4 MATERIAL E MÉTODOS	32
4.1 Origem do material e preparação das amostras.....	32
4.2 Aquisição dos espectros no NIR	33
4.3 Determinação da umidade	34
4.4 Determinação da densidade básica	35
4.5 Desenvolvimento PLS-R e RNAs	35

4.6 Critérios para seleção do melhor modelo	35
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO	37
5.1 Estudo das propriedades do cavaco	37
5.1.1 Dados de referência	37
5.1.2 Decis e Espectros no NIR	38
5.1.3 Análise de Componentes Principais (PCA)	40
5.1.4 Modelos PLS-R e RNA	41
5.2 Estudo das propriedades dos prismas	45
5.2.1 Dados de referência	45
5.2.2 Decis e espectros no NIR	47
5.2.3 Análise de Componentes Principais (PCA)	48
5.2.4 Modelos PLS-R e RNA	49
6 CONSIDERAÇÕES FINAIS	54
REFERÊNCIAS	55

1 INTRODUÇÃO

A madeira é um material higroscópico, que está sujeito a variação de umidade, o que afeta processos industriais como a fabricação de papel e celulose, produção de carvão vegetal e impregnação de produtos preservativos (GLASS e ZELINKA, 2010). A madeira também é considerada porosa e a sua porosidade bruta interfere na sua densidade, que é uma das propriedades mais importantes da madeira. Assim como a umidade, a densidade interfere no processo produtivo da madeira, como na fabricação de celulose e papel, produção de carvão e desempenho mecânico de produtos constituídos de madeira (COSTA et al., 2018). Por isso faz-se necessário o monitoramento destas propriedades. No entanto, muitas vezes os métodos convencionais apresentam algumas desvantagens como serem onerosos e destrutivos, portanto uma forma de mitigar estas desvantagens, é a utilização de métodos não destrutivos.

A espectroscopia no infravermelho próximo (NIR) é uma técnica que emprega energia no comprimento de onda de 750 a 2500 nm. O espectro do NIR é gerado pela absorção de energia na forma de luz por moléculas orgânicas, principalmente as que possuem ligações do tipo C-H, N-H e O-H e tem a vantagem de ser um método rápido, acurado, não destrutivo, não poluente e de baixo custo (PASQUINI, 2003). A espectroscopia no NIR tem sido amplamente utilizada para caracterização de materiais das mais diversas áreas do conhecimento e recentemente vem sendo empregada para a determinação de propriedades da madeira.

A espectroscopia no infravermelho próximo tem sido aplicada com sucesso, para estimar características fundamentais da madeira, como apontado em revisões realizadas por Schwanninger, 2013; Tsushikawa e Kobori, 2015 e Hein et al., 2017. A técnica NIR já foi empregada de forma eficaz para avaliar propriedades químicas da madeira, a fim de prever modificações químicas da madeira de *Eucalyptus grandis* e *Pinus taeda* após tratamento térmico (LENGOWSKI et al., 2018), propriedades anatômicas, para determinar a composição da parede celular da madeira de *Pinus radiata* (FAHEY et al., 2019.), propriedades mecânicas, com o intuito de prever o módulo de ruptura (MOR) e o módulo de elasticidade (MOE) de madeira de *Tsuga heterophylla* e *Pseudotsuga menziesii* (AYANLEYE, 2020), também foi usado para determinar propriedades físicas, como a umidade (DOS SANTOS et al., 2020) e a densidade básica da madeira de *Eucalyptus urophylla* x *E grandis* (COSTA, et al., 2018).

A técnica NIR tem sido aplicada e vem se destacando devido a sua ampla gama de aplicações inéditas relatadas na literatura, como a previsão da tensão de crescimento em caules verdes de árvores jovens de eucalipto utilizando a espectroscopia no NIR (GUO et al., 2019).

Soares et al. (2017) tiveram sucesso ao empregar a técnica para identificar seis espécies semelhantes de madeira Amazônica utilizando NIR portátil.

Estudos como os realizados por Costa et al. (2018), Dos Santos et al. (2020) e Ayanleye (2020) indicam que a espectroscopia NIR é eficiente para a estimativa da umidade e densidade básica da madeira, no entanto ainda é necessário compreender algumas aplicabilidades da técnica que têm sido escassas na literatura. Do ponto de vista da aplicação, seria desejável que a espectroscopia NIR seja empregada para estimar a densidade independente da umidade, uma vez que a saída de água livre ou adsorvida da madeira afeta muito a variação dos espectros NIR e densidade da madeira (FUJIMOTO, 2012). Ademais, expressa-se a necessidade de estudos que indiquem a eficiência de previsão a partir de espectros no NIR, por meio de diferentes métodos de processamento de dados, comparando com os métodos convencionalmente utilizados, a fim de se obter maior robustez e acurácia dos dados para a predição de propriedades da madeira.

2 OBJETIVOS

2.1 Geral

O objetivo deste trabalho foi verificar o desempenho da PLS-R e RNA na estimativa da umidade e da densidade básica independente da umidade de amostras prismáticas e cavacos de madeira a partir de assinaturas espectrais no NIR.

2.2 Específicos

Os objetivos específicos foram:

- a) Desenvolver modelos RNA e PLS-R para estimativa da umidade da madeira de *Eucalyptus* a partir da espectroscopia NIR;
- b) Desenvolver modelo PLS-R e RNA na estimativa da densidade básica da madeira, independente da umidade, a partir dos espectros do NIR.
- c) Avaliar a estimativa da umidade e densidade básica da madeira por RNA's e PLS-R a partir dos decis dos espectros NIR.
- d) Determinar qual método de processamento de dados gera modelos mais robustos para predição da umidade e densidade básica da madeira.
- e) Desenvolver uma rotina para elaboração de RNA's para estimativa da umidade e densidade básica da madeira;

3 REFERENCIAL TEÓRICO

3.1 Espectroscopia no infravermelho próximo (NIRS)

O estudo das propriedades da madeira é de extrema importância para utilizar a mesma de forma adequada e as técnicas não-destrutivas são necessárias quando se objetiva realizar a sua caracterização, pois proporciona rapidez, simplicidade e confiabilidade. Nesses ensaios os dados são obtidos de forma indireta, o que reduz o tempo e custo das análises laboratoriais (PASQUINI, 2003). Dentre estas técnicas a espectroscopia no infravermelho próximo (NIRS) se destaca.

3.1.1 Evolução da técnica NIRS

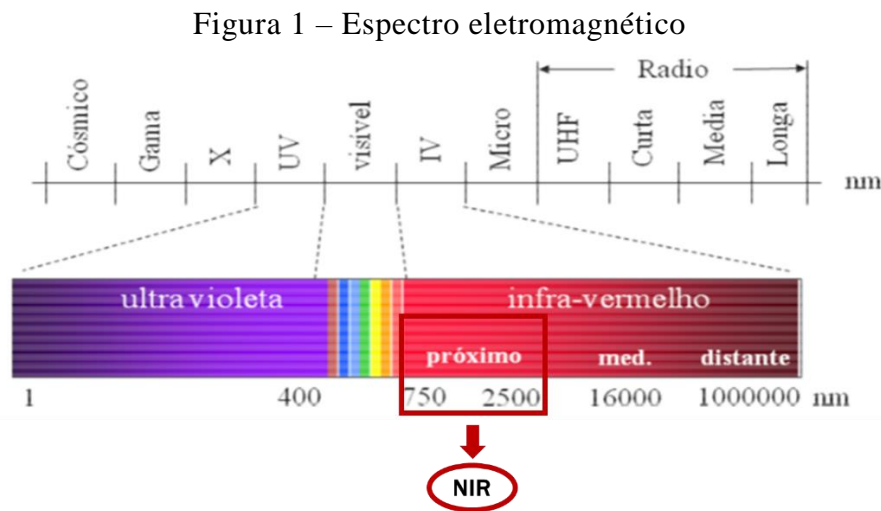
A região do infravermelho próximo foi descoberta em 1800 pelo astrônomo e músico inglês Frederick Willian Hershel, que verificou que algumas cores de luz conduziam calor em ondas mais longas do que as luzes visíveis e se apresentavam invisíveis aos olhos humanos, denominando-os de raio infravermelho (GIVENS et al., 1997). Nesta época, acreditava-se que espectros no infravermelho armazenavam ampla gama de informações relacionadas a amostra e, portanto, apresentavam potencial de utilização em diversos tipos de análises químicas e físicas (PASQUINI, 2003).

Na década de 30 foram registradas utilizações da técnica NIRS, mas foi na década de 60 que Karl Norris, em um grupo de pesquisa no Departamento de Agricultura dos Estados Unidos despertou interesse pela técnica, por meio de trabalhos relacionados a espectroscopia no infravermelho próximo para análises industriais. Os estudos iniciais visavam à procura de novos métodos para a determinação de umidade em produtos agrícolas (BOKOBZA, 1998). Mas foi na década de 80 e 90 que os estudos relacionados a técnica NIRS alavancaram, devido o avanço da instrumentação utilizada para obtenção e tratamento de dados e o surgimento da quimiometria (WOLD e SJÖSTRÖM, 1998).

No Brasil, as primeiras pesquisas referentes a aplicação da espectroscopia no NIR foram realizadas em 1960 na área agrícola, enquanto na área da tecnologia da madeira os primeiros trabalhos utilizando a técnica foram realizados em 1989, para predizer a composição química da madeira e propriedades do papel (SCHIMLECK et al., 2007). Posteriormente, a espectroscopia no NIR se tornou um importante e rápido método de previsão e classificação das propriedades da madeira (TSUCHIKAWA e KOBORI, 2015).

3.1.2 Fundamentos da técnica NIRS

A espectroscopia no infravermelho próximo é uma técnica que emprega energia no comprimento de onda de 750 a 2500 nm (Figura 1). Segundo Burns e Ciurczak (2009) as vibrações moleculares que causam transições harmônicas são responsáveis pela absorção nesta região e as vibrações que ocorrem no comprimento de onda de uma amostra qualquer estão relacionadas a sua estrutura e composição química da mesma.



Fonte: Pasquini, 2003.

O princípio da técnica NIRS consiste na utilização dos espectros obtidos pela interação da radiação eletromagnética com as ligações químicas que constituem a amostra, medindo desta forma, a interação da luz com a matéria. O espectro do NIR é gerado pela absorção de energia na forma de luz por moléculas orgânicas, principalmente as que possuem ligações do tipo C-H, N-H e O-H (BRERETON, 2003).

O equipamento utilizado para medição no NIR é o espectrofotômetro, sendo que atualmente, o mais utilizado é o FT-NIR (Fourier Transform Near Infrared) devido a sua alta tecnologia. Na técnica NIRS a emissão da radiação na região do infravermelho próximo é emitida pelo equipamento e após ocorrer a interação com o material em estudo, os detectores do equipamento registram a intensidade da energia que foi absorvida, refletida ou transmitida. Após a exposição do material a radiação, o equipamento produz um espectro de absorbância, reflectância ou transmitância. A informação contida no espectro é correlacionada com os valores obtidos por métodos convencionais, ou seja, obtidos em laboratório. Assim, um modelo

é calibrado e avaliado, podendo ser utilizado para predição dessas propriedades em amostras desconhecidas (SEFARA et al., 2000).

Dentre as inúmeras vantagens que a técnica NIRS possui em relação aos métodos convencionais, destacam-se a rapidez na leitura e amostragem do material, ser considerado um método não destrutivo e não invasivo, permitir aplicações online, ou seja, enquanto o processo produtivo encontra-se em andamento, e possibilitar sua utilização em quaisquer materiais que apresentem principalmente ligações do tipo CH, O-H, N-H ou S-H. De acordo com Williams e Norris (2001), a utilização da técnica também gera benefícios por necessitar de mínimo preparo da amostra e do operador, pois a aquisição dos espectros é simples.

A técnica NIRS apresenta também algumas desvantagens, como interferência de fatores externos como temperatura e umidade nas análises (HEIN et al., 2010). Além disso, a granulometria, umidade e heterogeneidade do material podem causar problemas nos resultados. Há também a dependência de métodos convencionais para a realização da calibração, dependendo de tempo para a realização das análises até o desenvolvimento do modelo. Portanto, a precisão das estimativas pela técnica NIRS depende da acurácia do método de referência e que este seja confiável (SANDAK et al., 2016).

Devido as inúmeras vantagens proporcionadas pela técnica, a espectroscopia no NIR vem sendo amplamente utilizada nos mais diversos setores industriais como agricultura, combustível fóssil, biocombustível, indústria de polímeros, fármacos e indústria têxtil (SHENK; WESTERHAUS, 1993; WOLD, 1978). Na área da tecnologia da madeira pesquisas tem comprovado o sucesso da aplicação do NIRS, sendo que há estudos que demonstraram a sua capacidade do NIR em estimar a umidade da madeira (EOM et al., 2013; WATANABE; MANSFIELD; AVRAMIDIS, 2011), densidade básica (FUJIMOTO; KOBORI; TSUCHIKAWA, 2012; COSTA et al. 2018), prever o percentual de celulose, hemicelulose, lignina e extrativos (ALVES et al., 2012; SILVA et al., 2013), determinar a resistência mecânica (SCHIMLECK et al., 2011; XU et al., 2011), ângulo de microfibrila (HEIN, 2012; SUN et al., 2011) e morfologia das fibras (MEDER; THUMM; MARSTON, 2003; SCHIMLECK; EVANS, 2004).

A espectroscopia no NIR também tem se demonstrado eficiente na resolução de problemas, quando associada com técnicas de modelagem, dentre estas as Análises de Regressão dos Mínimos Quadrados Parciais e as Redes Neurais Artificiais e destacam.

3.2 Quimiometria

O desempenho da aplicação da técnica NIR depende principalmente do desenvolvimento de ferramentas para interpretação e manipulação dos dados da análise. Sendo que de acordo com Pasquini (2003) a espectroscopia no NIR e a quimiometria são fortemente associadas, uma vez que a técnica NIR faz uso de bandas largas e sobrepostas que utilizam a quimiometria para tornar-se um instrumento robusto na identificação e quantificação de diversas propriedades em diferentes matrizes, já a quimiometria utiliza a elevada quantidade de informações espectrais para desenvolver novos métodos.

Desde o princípio da utilização dos espectros NIR as informações para fins analíticos baseiam-se na abordagem multivariada para calibração, sendo que a análise multivariada avalia todas as variáveis de forma conjunta, para explorar a relação entre estas e apresentar resultados mais congruentes (FERREIRA, 2008). Sendo assim, o objetivo da estatística multivariada é gerar modelos robustos o suficiente para prever certas propriedades, isto significa, a capacidade de extrair informações desejadas por dados analíticos (GELADI; DAVIES; WILLIAMS, 1995).

Dentre os métodos multivariados mais utilizados para a calibração de espectros no NIR pode-se citar a análise de Regressão Linear Múltipla (MLR), Regressão de Componentes Principais (PCR) e Regressão dos Mínimos Quadrados Parciais (PLS-R), sendo que estas ferramentas quimiométricas consideram que há uma relação linear entre os dados espectrais e a característica estudada (NAES et al., 2002). Entretanto, pesquisas indicam que outras técnicas de modelagem como as Redes Neurais Artificiais (RNAs) podem fornecer maior precisão preditiva que a regressão PLS, uma vez que este método pode lidar melhor com respostas espectrais não lineares, obtendo melhor precisão preditiva (ZHAO et al., 2006).

3.2.1 Análise de Regressão por mínimos quadrados parciais (PLS-R)

3.2.1.1 Definição

A análise de regressão dos mínimos quadrados parciais (*Partial Least Squares Regression*) é um método que utiliza a análise de componentes principais (PCA) nos dados de entrada e saída afim de aumentar a covariância entres os mesmos. Este método tem como objetivo assegurar que a informação modelada esteja, diretamente, associada à propriedade de interesse (HEIN, 2008). Além disso, a PLS-R é conhecida por evitar a colinearidade, ou seja, permite trabalhar com um número de observações maior que o número de amostras (NAES et

al., 2002).

A análise de regressão por mínimos quadrados parciais, é a técnica de regressão mais empregada, quando se deseja utilizar modelos de calibração multivariada utilizando dados de primeira ordem. Esta técnica permite que seja feita a previsão de amostras, mesmo sem o conhecimento exato de todos os componentes presentes na mesma, ou seja, permite que haja interferentes, desde que estes sejam utilizados na construção do modelo (BRERETON, 2000).

3.2.1.2 Histórico

O algoritmo PLS-R foi desenvolvido por Herman Wold nas décadas de 60 e 70 com o objetivo de resolver problemas relacionados a Econometria (AKARACHANTACHOTE, CHADCHAM e SAITHANU, 2014). Algum tempo depois, no ano de 1980 o filho de Herman Wold, Svante Wold juntamente com Harald Martens, realizaram a adaptação do algoritmo e utilizaram o mesmo como método de regressão na área de Quimiometria, após sua aplicação ter sido inicialmente sugerida por Kowalski em 1982 (GELADI e KOWALSKI, 1986).

Com os estudos apresentados, a análise PLS-R vem sendo amplamente utilizada como alternativa para regressões múltiplas simples, sendo aplicada principalmente nas áreas de bioinformática, *machine learning* e Quimiometria (AKARACHANTACHOTE, CHADCHAM e SAITHANU, 2014).

3.2.1.3 Funcionamento PLS-R

A PLS é uma técnica de calibração multivariada baseada no método de análise de componentes principais (PCA) que tem como objetivo reduzir a dimensão do conjunto de dados, para em seguida, projetar os espectros (matriz X) em um novo sistema de coordenadas, decompondo com as propriedades de interesse (matriz Y) da mesma maneira e de forma simultânea (SOUZA et al. 2013). Quando existe apenas uma propriedade, Y é um vetor e o método é identificado como PLS 1. Para capturar a variância dos dados da matriz X e da matriz Y a PLS faz o uso de respostas analíticas e informações de interesse, por meio de decomposições sucessivas e simultâneas correlacionando as mesmas (BERETON, 2003; GELADI e KOWALSKI, 1986).

O modelo PLS-R otimiza a projeção das amostras sobre os *loadings*, para a determinação dos *scores*, ao mesmo tempo em que os *scores* são ajustados até obter o melhor modelo linear entre eles, e alcançar a máxima covariância entre X e Y. Este processo é realizado

em uma série de etapas, que são repetidas para cada componente principal estimada por um processo iterativo.

A otimização simultânea realizada no modelo PLS-R causa pequenas distorções nas direções dos pesos de modo que, rigorosamente eles perdem a ortogonalidade, levando a pequenas redundâncias de informação. No entanto estas pequenas redundâncias, que melhoram a relação linear entre os *scores*, e estas distorções da ortogonalidade entre os componentes principais na PLS, são o que o fazem com que não sejam mais componentes principais (ortogonais) e sim variáveis latentes (BEEBE e KOWALSKI, 1987; CENTNER e MASSART, 1996).

No modelo PLS-R as matrizes X e Y são decompostas simultaneamente em uma soma de h variáveis latentes (Equações 1 e 2). O modelo PLS pode ser desenvolvido por meio de relações externas, onde as matrizes X e Y são correlacionadas individualmente ou por relações internas, em que as duas matrizes são correlacionadas (GELADI e KOWALSKI, 1986).

$$X = TP^T + E = \sum t_h p_h^T + E \quad (1)$$

$$Y = UQ^T + F = \sum u_h q_h^T + F \quad (2)$$

Em que: P e Q são as matrizes dos “*loadings*” das matrizes X e Y, respectivamente; T e U são as matrizes de “*scores*” das matrizes X e Y, respectivamente e E e F correspondem as matrizes de resíduos de X e Y, respectivamente.

A correlação interna dos *scores* das matrizes X e Y é uma relação linear que pode ser obtida pelo coeficiente de regressão linear, de acordo com a Equação 3:

$$u_h = b_h t_h \quad (3)$$

Em que: b_h é o vetor de coeficientes de regressão do modelo linear para cada variável latente, obtido através da Equação 4:

$$b_h = \frac{u_h^T t_h}{t_h^T t_h} \quad (4)$$

Em que: u e t são os elementos das matrizes U e T, respectivamente.

Os valores de b_h são agrupados na matriz diagonal B, que apresenta os coeficientes de regressão linear entre a matrizes de *scores* U de Y e T de X. A melhor relação linear entre os *scores* das matrizes é obtida por meio de pequenas rotações das variáveis latentes das matrizes X e Y. A matriz Y pode ser obtida através das informações contidas em u_h (Equação 3), conforme a Equação 5:

$$Y = TBQ' + F \quad (5)$$

Em que: T são os *scores* da matriz X, B é a matriz identidade de bh, Q` são os loadings da matriz Y e F é a matriz residual de Y.

A concentração de novas amostras pode ser calculada por meio dos novos *scores* de X, dado por T*, substituídos utilizando a Equação 6.

$$Y = T^*BQ' \quad (6)$$

A determinação do número de variáveis latentes é de suma importância para o desenvolvimento do modelo PLS-R, uma vez que, quanto maior o número de variáveis latente no modelo, menor o desvio da reta de calibração. Contudo, um grande número de variáveis latentes, pode aumentar o ruído e os erros de modelagem (FERRÃO e DAVANZO, 2015).

3.2.1.4 Características PLS-R

A PLS-R é uma técnica utilizada para estimativa e não para interpretação de fatores extraídos pela mesma. O algoritmo empregado examina a matrizes de espectros (matriz X) e matriz com propriedades de interesse (matriz Y), extraindo componentes que são diretamente relevantes a ambos os conjuntos de variáveis (AHMADI-NEDUSHAN, 2002).

Segundo Garcia et al. (2015), a técnica PLS apresenta algumas características importantes como:

- Capacidade de modelar regressões com múltiplas variáveis respostas;
- Aceitar multicolinearidade, permite trabalhar com um número de observações maior que o número de amostras
- Alto poder de predição dos fatores produzidos, devido às altas covariâncias com as variáveis resposta.
- Dificuldade de interpretar as cargas dos fatores;
- Os testes de significância dos estimadores dos coeficientes de regressão são realizados via métodos de reamostragem, pois suas distribuições não são conhecidas
- Falta de estatísticas de teste para o modelo.

Devido a capacidade de predição da técnica PLS, sua aplicação na indústria madeireira pode ser considerada uma alternativa viável, uma vez que a correlação de espectros coletados no NIR, com os valores observados podem trazer informação úteis para o monitoramento e determinação propriedades da madeira.

Alguns estudos já foram realizados utilizando PLS na área de tecnologia da madeira, dentre estes pode-se mencionar Baldin et al. (2020) que utilizou análise de regressão para estimar qualidade da madeira e seleção genética de árvores de *Eucalyptus benthamii* produção de celulose. Costa, Trugilho e Hein (2018) demonstraram a eficácia da PLS na determinação do rendimento gravimétrico e temperatura final de carbonização de carvão vegetal de eucalipto, a partir de espectros do NIR. Mancini et al. (2021) construíram modelos PLS para estimar o conteúdo de extrativo total de madeiras de florestas plantadas e nativas utilizando espectros no NIR. Dos Santos et al (2020) estimaram a umidade da madeira por meio de espectros coletados no NIR por diferentes vias de aquisição superfícies da madeira utilizando a PLS. Arriel et al. (2019) utilizaram a ferramenta NIR associada com a PLS para prever a densidade da madeira de eucalipto por meio de medição indireta. Baldin et al (2020) desenvolveram modelos NIRS por meio de PLS para a determinação de características químicas de *Eucalyptus benthamii*.

3.2.2 Redes neurais artificiais

3.2.2.1 Histórico

O desenvolvimento de redes neurais artificiais teve início a aproximadamente 70 anos, a fim de se compreender o cérebro humano e simular algumas de suas forças (FAUSSET, 1993).

Em 1943 foram registradas as primeiras informações sobre a neurocomputação por meio de artigos do neurofisiologista McCulloch e o matemático Walter Pitts, que sugeriram a construção de uma máquina baseada e inspirada no cérebro humano. Desta forma, desenvolveram uma analogia entre as células vivas e o processamento eletrônico, onde o neurônio possuía apenas uma saída em função das suas diversas entradas, sendo capaz de calcular certas funções lógicas (KOIVÁCS, 2002).

O psicólogo Donald Hebb em 1949, demonstrou que a capacidade da aprendizagem em redes neurais biológicas vem da alteração da eficiência sináptica, ou seja, a conexão somente é reforçada se tanto as células pré-sinápticas quanto as pós-sinápticas estiverem excitadas. Hebb foi o primeiro a propor uma lei de aprendizagem específica para as sinapses dos neurônios (HEBB, 1949).

Minsky (1951) construiu o primeiro neuro computador denominado Snark, capaz de simular o aprendizado ajustando automaticamente os pesos entre as sinapses, operando com sucesso, no entanto, este não chegou a realizar nenhuma função útil.

Em 1958 Frank Rosenblatt propôs uma topologia de rede denominada Perceptron constituída por neurônios MLP (Perceptron de Múltiplas Camadas), que era uma rede em que

os neurônios eram organizados em camadas de entrada e saída, onde os pesos das conexões eram adaptados para se atingir a eficiência sináptica utilizada para reconhecimento de padrões. A rede MLP, foi considerada um avanço nos estudos desenvolvidos até então, o que possibilitou aumento dos trabalhos relacionados a RNA devido sua capacidade de reconhecimento de padrões simples.

Em 1960 Widrow e Hoff criaram dois outros tipos de redes, a Adaline e Madaline, que apresentavam arquitetura de três camadas, fundamentada na chamada regra Delta, conhecida como algoritmo de aprendizado LMS, do inglês Least Mean Square.

Minsky e Papert (1969) demonstraram deficiência e limitações do modelo percéptron, em que este só era capaz de resolver problemas com dados de classe linearmente separáveis. Estas dificuldades metodológicas e tecnológicas apresentadas pelos autores, provocaram desinteresse por estudos relacionados a redes neurais na década de 70.

Durante os anos 80 as pesquisas ligadas a RNA ressurgiram devido ao desenvolvimento de computador com maior capacidade de processamento, criação de algoritmos de otimização eficientes e robustos, bem como as descobertas ligadas ao sistema nervoso biológico.

A partir de 1982 o interesse relacionado as redes neurais artificiais foi novamente despertado por meio de uma publicação do trabalho de Jhon Hopfield (HOPFIELD, 1982). Após isso, a publicação do livro *Parallel distributed processing* as pesquisas relacionadas a RNA alavancaram, pois, os autores sanaram as deficiências existentes no treinamento das RNAs apontada por Minsky e Papert, implementando um algoritmo que permitia o ajuste de pesos em uma rede com mais de uma camada denominado de backpropagation. Neste algoritmo a correção do erro é realizada pelo método gradiente, onde o erro é propagado de camada para camada da rede para frente e os pesos são corrigidos da camada de saída até a camada de entrada (RUMELHART, HINTON e WILLIAMS, 1986).

3.2.2.2 Definição

A inteligência computacional é uma área da ciência da computação, que por meio de técnicas inspiradas na natureza desenvolve algoritmos, capazes de repetir algumas habilidades cognitivas, como reconhecimento, aprendizado e percepção. Dentre as principais técnicas desenvolvidas na inteligência computacional pode-se citar as redes neurais artificiais que são técnicas que apresentam semelhança com o cérebro humano, como a aprendizagem e a generalização de informações, devido ao processamento paralelo e em razão da intensa

conectividade dos elementos de processamento, denominados de neurônios (SILVA et al. 2009).

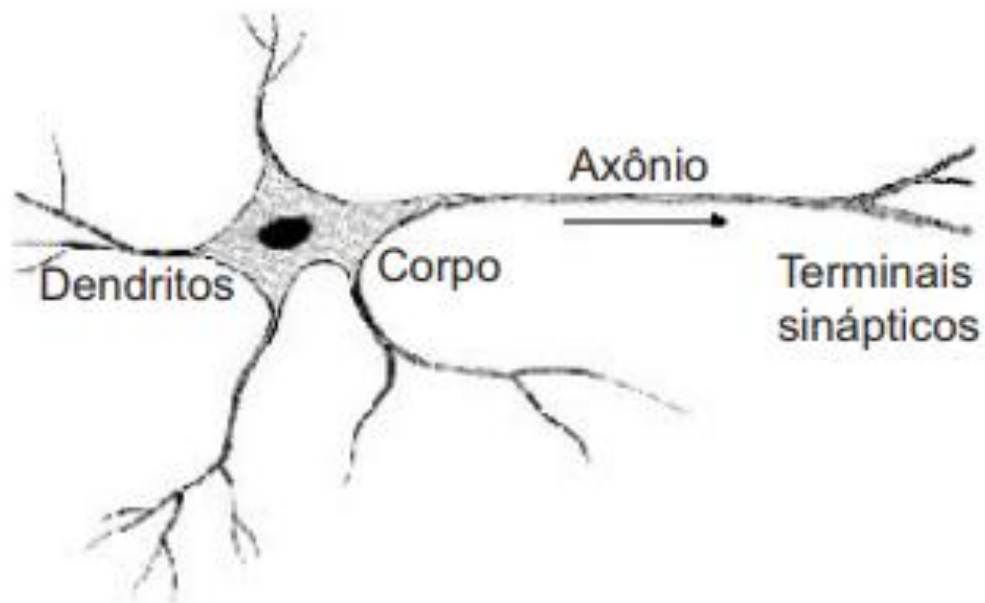
De acordo com Haykin (2001) as redes neurais se aproximam do cérebro humano em dois aspectos:

- O conhecimento é adquirido pela rede por meio do processo de aprendizagem;
- Para armazenar o conhecimento adquirido são utilizadas forças de conexão entre neurônios, denominadas de peso sinápticos.

3.2.2.3 Funcionamento das RNAs

Conforme Mehrotra, Mohan e Ranka (1997) o neurônio biológico é a principal célula do cérebro humano, que é constituído basicamente por três seções, com funções específicas e complementares, sendo estas o corpo celular, os dendritos e o axônio (Figura 2). Os dendritos desempenham a função de captar informações de outros neurônios e transmiti-las ao corpo do neurônio para que estas sejam processadas, podendo gerar novos impulsos que são transmitidos pelo contato entre o terminal axônico de um neurônio e o dendrito de outro neurônio, por meio de sinapses, sendo que são as sinapses que permitem a união dos neurônios que formam as redes neurais (FERNEDA, 2006).

Figura 2 - Representação de um neurônio biológico



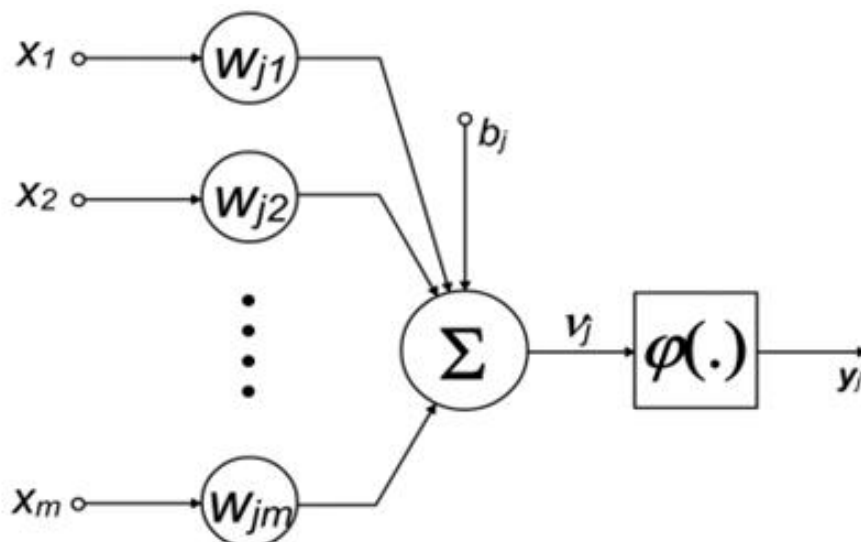
Fonte: Ferneda, 2006

De acordo com Cordeiro et al. (2015) as RNA, foram produzidas por meio de modelos matemáticos considerando os seguintes atributos:

- Processamento de grande quantidade de informações em elementos simples, chamados neurônios;
- Links de conexões entre os neurônios transmitem os sinais;
- Para cada conexão existe um peso associado, que em RNA típica é multiplicado pelo sinal transmitido;
- Cada neurônio utiliza uma função de ativação (não necessariamente linear) que determina a saída do neurônio a partir do somatório dos pesos e sinais recebidos.

Segundo Silva e Schmidt (2016) por meio do conhecimento em relação a estrutura e funcionamento biológico do cérebro se tem a representação matemática a partir de um neurônio artificial (Figura 3).

Figura 3 – Modelo de neurônio artificial



Fonte: adaptado de Fiorin et al., 2011

Os neurônios artificiais são formados basicamente pelas sinapses com seus pesos associados, a junção somadora e a função de ativação. O funcionamento de um neurônio artificial consiste na apresentação dos sinais de entrada (x) que são similares a impulsos nervosos. Cada sinal é multiplicado por um peso que indica sua influência na saída da unidade (w), posteriormente é feita a soma ponderada dos sinais que produz determinado nível de

atividade (u). A função de ativação (φ) limita a saída e introduz a não linearidade ao modelo, enquanto o bias (b) aumenta ou diminui a influência dos valores de entrada. Por fim, é gerada uma saída única do neurônio artificial (y). Estas relações podem ser observadas nas equações 1 e 2.

$$u_j = \sum_{i=1}^m w_{ji} x_i + b_j$$

$$y_j = \varphi(v_j) \quad (2)$$

A fase inicial de modelagem da RNA consiste na determinação dos parâmetros e de entrada/saída e o pré-processamento dos dados, enquanto a etapa principal, consiste no treinamento RNA e o teste das redes já treinadas. O desempenho das RNA está ligado ao treinamento em que os pesos juntamente com os sinais de saída devem ser adaptados de acordo com os resultados que se deseja obter, sendo que este treinamento consiste em ajustar pesos das conexões entre os neurônios e configurar os valores de saída para cada caso verificando a quantidade de erro sobre o valor de saída desejado. Este processo de treinamento é repetido até se obter um erro que seja aceitável (MAZI e PINO JÚNIOR, 2009).

Dois métodos de aprendizado são conhecidos, o mais utilizado é o supervisionado em que um supervisor externo fornece a rede os valores de entrada e os valores de saída desejados para aquela entrada. Depois que ocorre a iteração os valores de saída são comparados e os pesos ajustados, sendo que esse processo ocorre até que o erro seja minimizado. O outro método de aprendizado é o não-supervisionado, em que a rede aprende sozinha e apenas as amostras dos dados de entrada são apresentadas a rede, e ela deve ajustar os pesos e valores de saída automaticamente de acordo com classificação dos dados de entrada pelos neurônios (FIORIN et al. 2011).

Para confirmar o processo de aprendizagem da rede é realizado processo de validação, em que faz uso de conjunto de dados de entrada diferente dos que foram utilizados para o aprendizado. Desse modo consegue-se verificar o desempenho da rede e, uma vez que a rede é treinada, esta pode ser utilizada para prever a saída de diferentes conjuntos de entrada (Masters, 1993).

Backpropagation feedforward é uma rede neural típica muito utilizada no ramo da engenharia por ser capaz de resolver grande variedade de problemas de forma eficaz. O backpropagation é um método de aprendizado supervisionado que ocorre em duas fases, em

que altera os pesos das conexões para aproximar a saída da rede a saída desejada. Primeiramente ocorre o processo *feedforward*, em que a entrada é alimentada na camada inferior, e esses nós projetam para os nós das camadas ocultas que, por sua vez, projetam-se para a camada de saída, pois seu sinal de entrada sempre se propaga na rede de forma acíclica. Posteriormente, a ativação de cada nó de saída é comparada com seu destino e o erro é calculado. Já na segunda fase do *backpropagation* consiste em atualizar os pesos de conexão entre as camadas (XU et al., 2018).

A rede *feedforward* é organizada em camadas, sendo que na camada de entrada os dados são apresentados a rede, na camada intermediária ou oculta é feita a maior parte do processamento dos dados, por meio de conexões ponderadas, sendo que esta é considerada extratora de características. Já a camada de saída é onde o resultado final é concluído e apresentado (MIRANDA, FREITAS e FAGGION, 2009).

Para determinar a melhor arquitetura de rede e o desempenho da RNA alguns parâmetros podem ser ajustados, como o número de camadas de neurônios, o número de neurônios em cada camada, as funções de transferência, a regra de aprendizado, a taxa de coeficiente de aprendizado, número de ciclos de aprendizado, bem como a inicialização dos pesos e vieses (COINT e ROUGER, 2005).

De acordo com Özşahin (2012) redes neurais são treinadas com dados conhecidos e testadas com dados não utilizados. A medição do erro do resultado desejado e o resultado produzido pela RNA é realizado no processo de treinamento e teste, utilizando métodos de diagnóstico que indica se o desempenho da RNA é satisfatório ou não. Um método comum e bem conhecido é o *Root Mean Square Error* (RMSE) como pode ser observado na equação 3.

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N - P} \sum_{i=1}^N (t_i - td_i)^2} \quad (3)$$

Em que: t_i = estimado

td_i = observado

P = número de parâmetros

3.2.2.4 Características das RNAs

De acordo com Silva, Spatti e Flauzino (2010) as redes neurais apresentam características importantes, sendo estas:

- **Adaptação por Experiência:** adaptações dos parâmetros internos da rede (pesos sinápticos), são ajustados a partir da apresentação contínua de exemplos (padrões, amostras, medidas), relacionados ao comportamento do processo, possibilitando a aquisição do conhecimento por experiência;
- **Capacidade de aprendizado:** por meio de aplicações de um método de treinamento, a rede tem a capacidade de extrair a relação entre as variáveis que compõem a aplicação;
- **Habilidade de generalização:** Após o treinamento da rede, essa consegue generalizar o conhecimento obtido, possibilitando estimar soluções que eram desconhecidas até então.
- **Organização de dados:** baseado em características inerentes, envolvendo determinado conjunto de informações que dizem respeito a um processo, a rede tem capacidade de se organizar internamente, a fim de possibilitar o agrupamento de padrões que apresentam características comuns;
- **Tolerância a falhas:** devido ao elevado nível de interconexões entre neurônios artificiais, a rede neural torna-se um sistema tolerante a falhas quando parte de sua estrutura interna é sensivelmente corrompida;
- **Armazenamento distribuído:** o conhecimento do comportamento de determinado processo dentro de uma arquitetura neural é realizado de forma distribuída entre as diversas sinapses de seus neurônios artificiais, permitindo desta forma incremento da robustez da arquitetura perante a eventuais neurônios que se tornaram operantes;
- **Facilidade e prototipagem:** a implementação da maioria das arquiteturas neurais pode ser facilmente, dependendo da especialidade da aplicação, prototipada em hardware ou software, pois após o processo de treinamento, os resultados são normalmente obtidos por algumas operações matemáticas elementares.

As vantagens relacionadas as RNAs fizeram com que a mesma se estabelecesse nas últimas décadas, principalmente no meio científico, com modelos matemáticos que podem ser utilizados nas mais variadas áreas do conhecimento, inclusive na área da tecnologia da madeira.

Alguns estudos já foram realizados utilizando RNA na área de tecnologia da madeira, dentre estes podendo-se mencionar: Ozsahin e Murat (2018) realizaram estimativa da umidade

e densidade básica da madeira tratada termicamente por redes neurais artificiais. Nguyen et al. (2018) demonstraram a eficiência dos modelos de RNA para prever as mudanças de cor na madeira durante o tratamento térmico. Bedeleian (2018) aplicou as redes neurais artificiais e método de Monte Carlo para prever a confiabilidade do tratamento fitossanitário de radiofrequência da madeira. Tiryaki et al. (2017b) desenvolveram modelos preditivos para propriedades mecânicas de painéis de partículas fabricados em diferentes condições de prensagem. Tiryaki et al. (2017a) demonstrou a eficácia das redes neurais artificiais para minimizar a rugosidade superficial e o consumo de energia na usinagem abrasiva de madeira. Zanuncio et al. (2016) implementou redes neurais artificiais como nova ferramenta para avaliação e monitoramento da umidade da madeira. Zanuncio et al. (2017) realizaram predição de propriedades físicas, mecânicas e colorimétricas da madeira termorretrificada de *Eucalyptus grandis*.

3.3 Utilização da Espectroscopia no NIR associada as RNAs e PLS-R na tecnologia da madeira

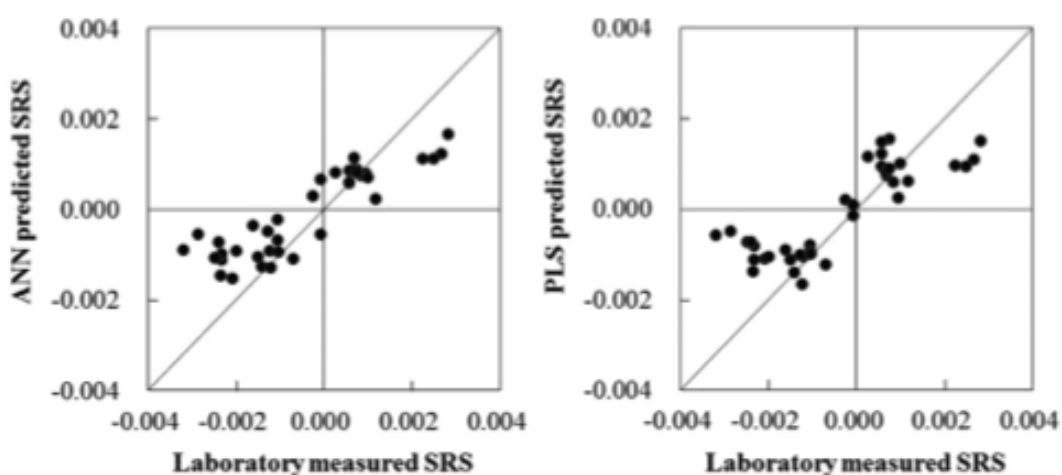
A técnica NIRS tem se mostrado como uma ferramenta eficiente no controle de qualidade industrial da madeira, devido a sua rapidez e acurácia na previsão e classificação das propriedades da madeira quando comparado com métodos convencionais que necessitam de técnicas onerosas e demandam tempo (MUNIZ et al., 2012). Para análise espectral do NIR algumas técnicas de modelagem podem ser utilizadas, dentre estas, destaca-se a PLS-R que é a técnica de regressão mais utilizada para modelos de calibração multivariada utilizando dados de primeira ordem. Ademais, a RNA é outra técnica que tem se destacado nos últimos anos, devido ao seu potencial na predição e modelagem de problemas lineares e não lineares.

A espectroscopia no NIR associada com redes neurais artificiais e/ou regressão dos mínimos quadrados tem sido utilizada no campo da ciência da madeira e alguns resultados promissores têm sido relatados. Uddin et al. (2017) utilizaram dados espectrais do NIR associado a RNA, PLS-R e PCR para quantificar lignina pentosana, holocelulose e α -celulose de *Sebania cannabina*. Antes da modelagem os autores avaliaram a eficiência de pré-processamento de dados espectrais, sendo a suavização Savitzky-Golay, normalização dos dados e a padronização normal de sinal (SNV). O estudo sugeriu que SNV foi o tratamento que forneceu as melhores estimativas. Ademais, após calibração com PCR, PLS-R e RNA, os resultados mostraram que a RNA forneceu melhores estimativas com R^2 0,97 para lignina, R^2 de 0,99 para pentosana, R^2 0,99 para holocelulose e R^2 de 0,93 α -celulose.

Costa et al. (2019) desenvolveram modelos para estimar a umidade de polpa celulósica de *Pinus* sp. a partir de espectros NIR utilizando PLS-R e RNA. Os autores calibraram o modelo PLS-R com todas as absorvâncias (1300) e com apenas seis absorvâncias, que julgaram mais representativas para a propriedade estudada, já a RNA também foi desenvolvida com seis absorvâncias. Os resultados obtidos na PLS-R apresentaram R^2 de 0,990 no teste e RMSE de 2,515 no teste ao utilizar as 1300 absorvâncias, e R^2 de 0,976 e RMSE de 3,986 no teste ao utilizar 6 absorvâncias, para rede neural o R^2 obtido foi de 0,9990 e RMSE de 2,546 no teste para 6 absorvâncias. Por fim, os autores concluíram que a RNA e a PLS-R são métodos eficientes para estimar a secagem da polpa de celulose.

Watanabe et al. (2014) aplicaram a espectroscopia no NIR para avaliar o esforço de secagem na superfície (SRS) da madeira serrada de *Cryptomeria japonica* e compararam as RNAs com a PLS-R. Os autores relataram que o modelo de RNA apresentou boa correlação entre o esforço de secagem medido em laboratório e previsto com R^2 de 0,79, erro médio quadrático de predição (RMSEP) de 0,0009. Já o modelo de regressão PLS apresentou R^2 de 0,69 e maior RMSEP de 0,0010 do que o modelo de RNA, indicando que o desempenho preditivo do modelo de RNA foi superior ao modelo de regressão PLS (Figura 4).

Figura 4 - Correlação do esforço de secagem medido em laboratório e previsto no conjunto de validação usando o modelo de RNA e o modelo de regressão PLS, respectivamente.



Fonte: Watanabe, 2014.

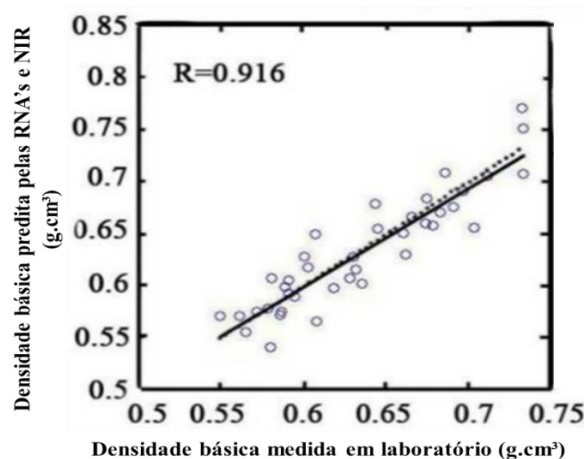
Ayanleye (2020) investigaram o uso de espectroscopia de infravermelho associada a RNA e PLS- R para prever a densidade, módulos de elasticidade (MOE) e ruptura (MOR) de madeira de *Tsuga heterophylla* e *Pseudotsuga menziesii*. Ao analisarem os resultados de

densidade a RNA apresentou R^2 de 0,72 e 0,49 e RMSE de 0,165 e 0,247 no treino e no teste, respectivamente, já na calibração por PLS-R o R^2 foi de 0,44 e 0,63 e RMSE de 0,265 e 0,184 no treino e no teste, respectivamente, no entanto o valor obtido no teste da PLS-R pode não ser confiável, uma vez que o modelo teve um baixo desempenho no treinamento. Ao estimarem o MOR, os autores alcançaram R^2 de 0,66 RMSE de 0,231 no teste por meio da RNA, enquanto na PLS-R obtiveram R^2 de 0,56 e RMSE 0,256 no teste. A estimativa do MOR por RNA apresentou R^2 de 0,70 e RMSE de 0,253 no teste, já por PLS-R o R^2 foi de 0,60 e RMSE de 0,253 no teste. Portanto, os autores concluíram que ao compara a modelagem por RNA e PLS-R a partir de espectros no NIR para a predição da densidade, MOR e MOE da madeira a RNA foi a que forneceu as melhores estimativas.

Dos Santos et al. (2020) desenvolveram modelos espectroscópicos no infravermelho próximo (NIR) para estimar a umidade da madeira de *Eucalyptus urophylla* x *Eucalyptus grandis* por meio de modelos construídos a partir de assinaturas NIR registradas por diferentes métodos de aquisição e superfícies de madeira utilizando PLS-R. O modelo para estimar a umidade da madeira que apresentou as melhores previsões, foi desenvolvido a partir de espectros NIR registrados na superfície transversal da madeira produzida com a serra de fita, pela via de aquisição esfera de integração com R^2 de 0,96 e RMSEP de 8,56%.

Li et al. (2010) aplicaram a rede neural *Backpropagation* e NIRS para estimar a densidade da madeira de lariço. O coeficiente de correlação da predição (R) obtido foi de 0,916, enquanto o erro médio quadrático de predição (RMSEP) foi de 0,0221 (Figura 5). Os autores concluíram que o uso do NIR associado a rede neural BP melhorou significativamente o desempenho do modelo, conseguindo estimar com rapidez e precisão a densidade da madeira.

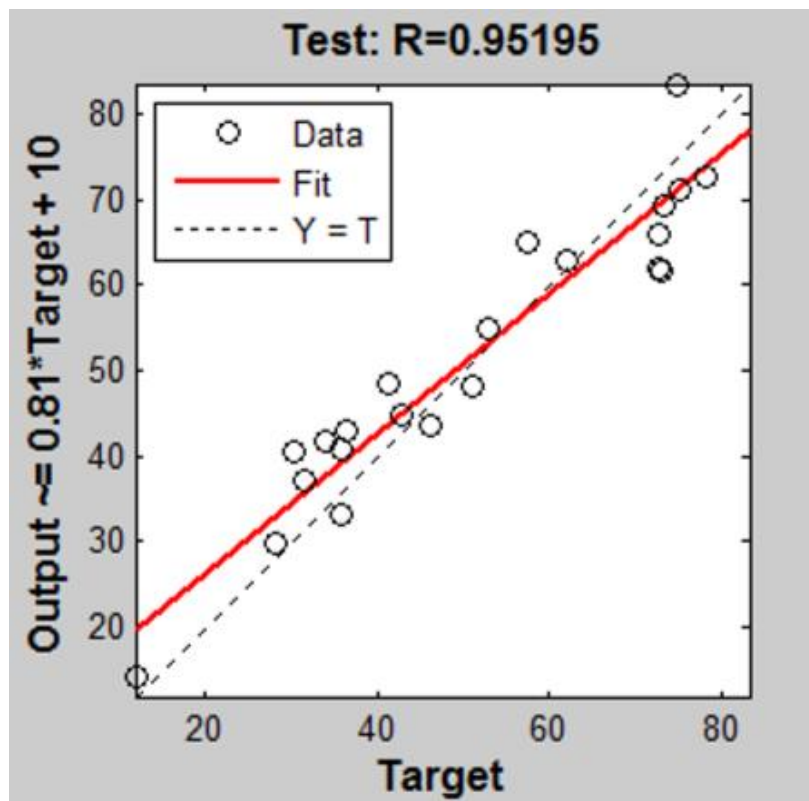
Figura 5 – Densidade básica medida em laboratório e previsto pelo NIR associado as RNA.



Fonte: Li et al., 2010.

Li e Li (2012) ao estimar a umidade da madeira de Larix baseada em NIR com uma integração de RNA e PCA, alcançaram coeficiente de correlação de predição (R) de 0,952, e erro quadrático médio de predição (RMSEP) de 38,27 (Figura 6). O estudo indicou que o NIR é uma ferramenta útil para a previsão rápida e precisa da umidade da madeira e a rede neural Backpropagation acoplada à PCA provou ser bem-sucedida na modelagem da umidade da madeira. Além disso, o método de integração para análise quantitativa de espectroscopia no infravermelho próximo, assegurou a precisão dos dados de entrada e reduziu o tempo de treinamento.

Figura 6 – Teor de água medido em laboratório e previsto pelo NIR associado as RNA.



Fonte: Li e Li, 2012.

Como exposto, percebe-se que os modelos preditivos desenvolvidos pela PLS-R e RNA a partir de assinaturas espectrais no NIR apresentam resultados promissores em estudos aplicadas em madeira. No entanto, ainda há uma escassez de estudos envolvendo o desempenho das RNA e PLS-R a partir de espectros coletado no NIR para estimativa da umidade e densidade básica da madeira, foco principal deste trabalho.

4 MATERIAL E MÉTODOS

4.1 Origem do material e preparação das amostras

As amostras utilizadas no estudo são de 110 cavacos comerciais de *Eucalyptus* spp., provenientes de doação realizada pela empresa Cavacos do Brasil e 110 amostras prismáticas de madeira de *Eucalyptus* spp., de 26 anos de idade, oriundas de plantio localizado no campus da UFLA.

As árvores de *Eucalyptus* spp. utilizadas para a fabricação de prismas de madeira foram abatidas e seccionadas em toras com três metros de comprimento, que, posteriormente, foram desdobradas na Unidade Experimental de Desdobro e Secagem da Madeira, da UFLA.

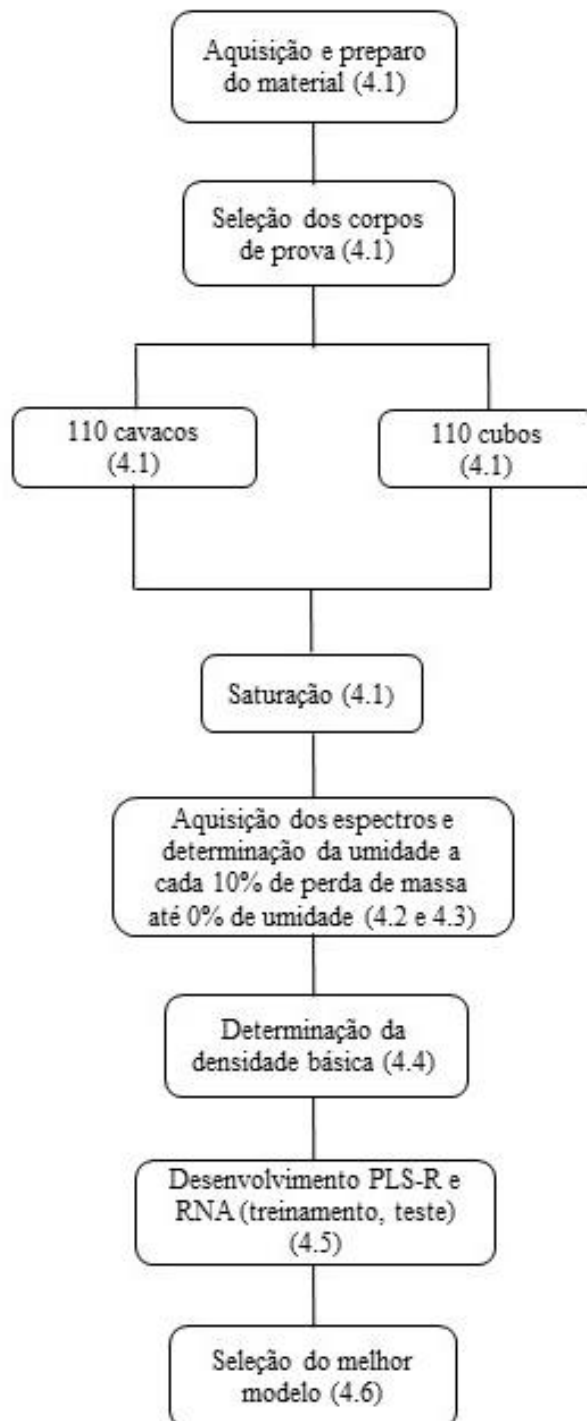
As pranchas centrais retirada das toras de madeira foram inicialmente processadas com serra circular. Posteriormente, processou-se a face transversal dos corpos de prova com uma serra de fita da marca Acerbi, com comprimento e largura da lâmina de 2,77 mm. Após processamento, as dimensões finais dos corpos de prova apresentaram um tamanho de 2,5 x 2,5 x 5 cm, representando a largura, espessura e comprimento, respectivamente.

Os 110 cavacos e as 110 amostras prismáticas dos corpos de prova foram acondicionados em câmaras climáticas, a $20^{\circ}\text{C} \pm 1^{\circ}\text{C}$ de temperatura e $60\% \pm 2\%$ de umidade relativa do ambiente. Posteriormente, os corpos de prova passaram por uma seleção, em que foram descartados os que apresentavam defeitos como nós, rachaduras, empenos, ataque aparente de patógenos, ou qualquer inconveniente que comprometesse a utilização do material na pesquisa.

As massas das amostras prismáticas foram aferidas em balança de precisão, a fim de classificá-las e se obter um lote de material bem representativo, abrangendo diversas massas. Os 220 corpos de prova classificados foram saturados, sendo que, para isso, aplicou-se vácuo intermitente a frio, com o auxílio de uma bomba a vácuo, a fim de acelerar a retirada de ar existente dentro dos corpos de prova e garantindo que, ao fim do processo, haveria apenas água nos capilares da madeira.

A Figura 7 apresenta o fluxograma resumido das etapas realizadas no trabalho.

Figura 7 - Fluxograma das etapas realizadas no trabalho.



Fonte: do autor (2021).

4.2 Aquisição dos espectros no NIR

Os espectros dos corpos de prova foram adquiridos por modo de reflexão difusa, por

meio do espectrômetro da marca Bruker (Modelo Vector 22/N, Bruker Optik GmbH, Ettlingen, Germany) que possui duas vias de aquisições, sendo estas a esfera de integração e a fibra ótica. No entanto, neste estudo, apenas a esfera de integração foi utilizada para realizar as leituras dos espectros nas amostras, em conjunto com o programa OPUS, versão 7.0.

A esfera de integração possui os seguintes elementos: uma fonte NIR, uma roda de filtros, um interferômetro, um detector e uma sonda de esfera de integração. A esfera de integração é um sistema de detecção de sulfureto de chumbo, a qual recebe o raio incidente após a reflexão na amostra, podendo ser utilizada para obter espectros em amostras sólidas e em pó. O método de medição utilizado é o da reflexão difusa.

Os espectros foram obtidos na região do infravermelho próximo entre 12.500 a 3.600 cm^{-1} (800 a 2.780 nm), com resolução espectral de 3,87 cm^{-1} (um espectro é composto por 2.199 valores de absorbância). Para calibrar a absorção da luz do infravermelho próximo, uma base com superfície banhada a ouro adotada pelo equipamento foi utilizada como referência.

Os espectros dos 220 corpos de prova foram coletados em 10 etapas de secagem (a cada 10% de perda de massa) desde a condição saturada até a condição anidra, ou seja, até apresentarem 0% de umidade. A obtenção dos espectros foi realizada pela via de aquisição esfera de integração na face transversal do cubo, confeccionada por serra fita, e na face longitudinal do cavaco.

4.3 Determinação da umidade

A umidade foi determinada nas etapas de secagem (a cada 10% de perda de massa), desde a condição saturada até a condição anidra de acordo com a norma NBR 14929 (ABNT, 2003). Dessa forma, a perda de massa dos 220 corpos de prova foi acompanhada constantemente, sendo que, no princípio, os corpos de prova (saturados) foram acondicionados em sala com temperatura controlada e a mensuração de massa foi realizada a cada 10% de perda da mesma, até as amostras entrarem em umidade de equilíbrio. Atingindo esta condição, as amostras foram levadas em estufa a $103 \pm 2^\circ\text{C}$, dando continuidade ao processo de monitoramento da perda de massa até atingir 0% de umidade.

A equação 4 fornece a relação para determinação umidade da madeira, em que μ é a massa inicial da madeira (massa úmida) e m_s é a massa de madeira seca.

$$U\% = \frac{\mu - m_s}{m_s} \times 100$$

μ = massa úmida (g);

m_s = massa seca (g).

4.4 Determinação da densidade básica

A densidade básica das amostras foi determinada utilizando o método de imersão, de acordo com a norma NBR 11941 (ABNT, 2003).

4.5 Desenvolvimento PLS-R e RNAs

O software *Chemoface* (versão 1.61, <http://ufla.br/chemoface/>) foi utilizado para as análises multivariadas dos dados (NUNES *et al.* 2012). A Análise de Componentes principais (PCA) foi realizada para avaliar o efeito da variação da umidade nas assinaturas espectrais do NIR, enquanto que a análise de regressão dos mínimos quadrados parciais (*PLS regression*) foi utilizada para ajustar os modelos, correlacionando os dados espectrais obtidos no NIR e a propriedade estudada, utilizando 10 variáveis latentes em todos os modelos. Os modelos foram ajustados conforme o valor sugerido pelo programa *Chemoface*, o qual determinou o número de componentes principais adotados, visto que esse valor tem como objetivo diminuir o erro e aumentar o coeficiente de determinação.

Para o desenvolvimento dos modelos RNA, foi desenvolvida uma rotina computacional para o cálculo da média, variância, área sob a curva e para os 10 decis da base de dados. Tais parâmetros foram utilizados como entrada da rede. Outro modelo RNA desenvolvido foi a partir da PCA, sendo que esta foi calculada no software *Chemoface*, e posteriormente foi utilizada como entrada da rede, juntamente com o cálculo da média e variância dos dados.

O treinamento da rede foi realizado com o linguagem computacional R (R CORE TEAM, 2021), utilizando o pacote *neuralnet*. Os dados foram normalizados e o ajuste da melhor arquitetura foi realizado de acordo com o menor RMSE e maior R^2 , sendo testadas manualmente o número de camadas e neurônios para cada rede, sendo por fim utilizado duas camadas com dois neurônios cada para o desenvolvimento do modelo. Posteriormente, o treinamento da rede foi realizado pelo método de *holdout*, em que 70% dos dados foram utilizados para treinamento e 30% para teste. O tipo de rede utilizada foi *Multilayer Perceptron*, e o algoritmo foi o *backpropagation*, sendo que a função de ativação de entrada utilizada foi a logística (ou sigmoïdal) e a de saída foi a função linear.

4.6 Critérios para seleção do melhor modelo

A escolha do melhor modelo foi feita por meio da análise do coeficiente de determinação de predição (R^2) e a raiz quadrada do erro quadrático médio de predição (RMSE), visto que estes são parâmetros que conseguem mensurar o quão bem uma calibração prediz as amostras desconhecidas, por isso são utilizados para determinar a qualidade do modelo.

A Relação de desempenho do desvio padrão (RPD) também foi utilizada para identificar a precisão do modelo, sendo esta, a relação entre o desvio padrão dos valores de referência e o erro padrão da validação cruzada (RMSE). Valores de RPD maiores que 1,5 são considerados aceitáveis para leituras e predições preliminares, em aplicações na área de ciências florestais. Normalmente, um valor de R^2 alto, de RMSE baixo e de RPD acima de 1,5 indica um bom desempenho do modelo.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 Estudo das propriedades do cavaco

Nesta parte do estudo, serão apresentados resultados referentes apenas aos dados relativos aos cavacos de madeira.

5.1.1 Dados de referência

Ao desenvolver modelos de calibração, é importante ter compreensão sobre a variação do conjunto de dados. As densidades básicas e umidades dos cavacos medidas em laboratório da condição saturada à condição anidra podem ser observadas de forma resumida na Tabela 1.

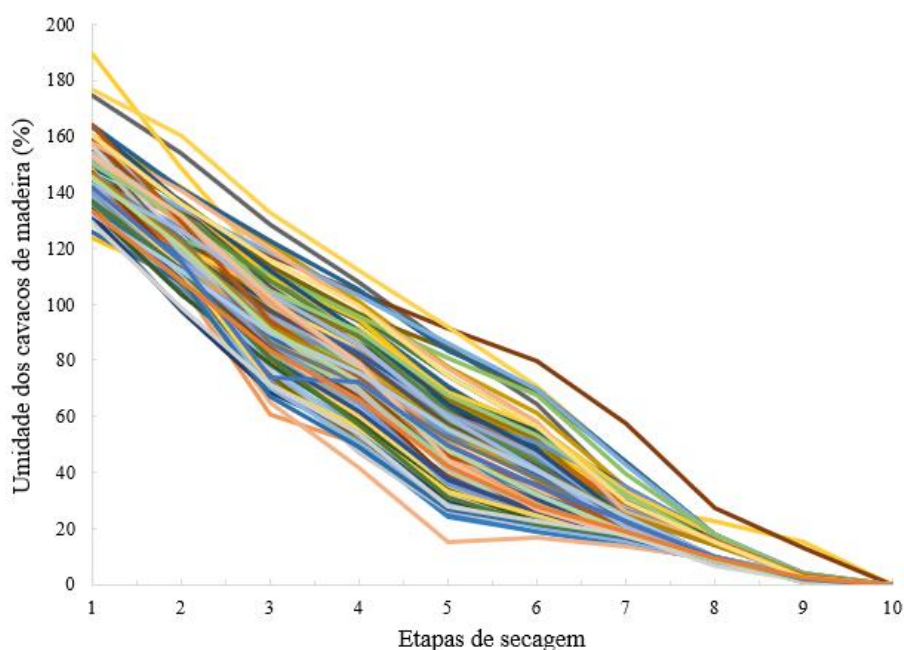
Tabela 1 – Faixa de umidade e densidade básica medidas em laboratório para o desenvolvimento do modelo.

Propriedade	Número de amostras	Mínimo	Máximo	Média	Coefficiente de variação	Desvio padrão
Umidade (%)	110	0	189,06	55,87	88,25	49,31
Densidade (g cm ⁻³)	110	0,39	0,53	0,47	4,25	0,02

Fonte: Da autora (2021).

Na Tabela 1 é possível observar que a variação de umidade obtida nos cavacos analisados. O alto valor do desvio padrão, de 49,31%, e do coeficiente de variação de 88,25%, foi intencional, uma vez que, desejava-se uma ampla variação de umidade, e para isso, a umidade foi medida em 10 etapas para acompanhar a dessorção, em que nas etapas de 1 a 9 a perda de água foi natural e na etapa de 9 a 10 em estufa convencional (Figura 8). Amaral et al. (2018) ao realizarem o monitoramento da umidade em cavacos de madeira de *Eucalyptus* obtiveram umidade média de 35,81%, variando entre 0 e 148,65% e um elevado coeficiente de variação de 104,79%.

Figura 8 - Etapas de secagem de cavacos de madeira.



Fonte: do autor (2021).

A densidade básica da madeira variou de $0,39$ a $0,53 \text{ g cm}^{-3}$, sendo a média de $0,47 \text{ g cm}^{-3}$. Costa et al (2018), ao estudarem a densidade básica de *Eucalyptus urophylla* x *Eucalyptus grandis* de seis anos de idade, encontraram a média de $0,460 \text{ g cm}^{-3}$.

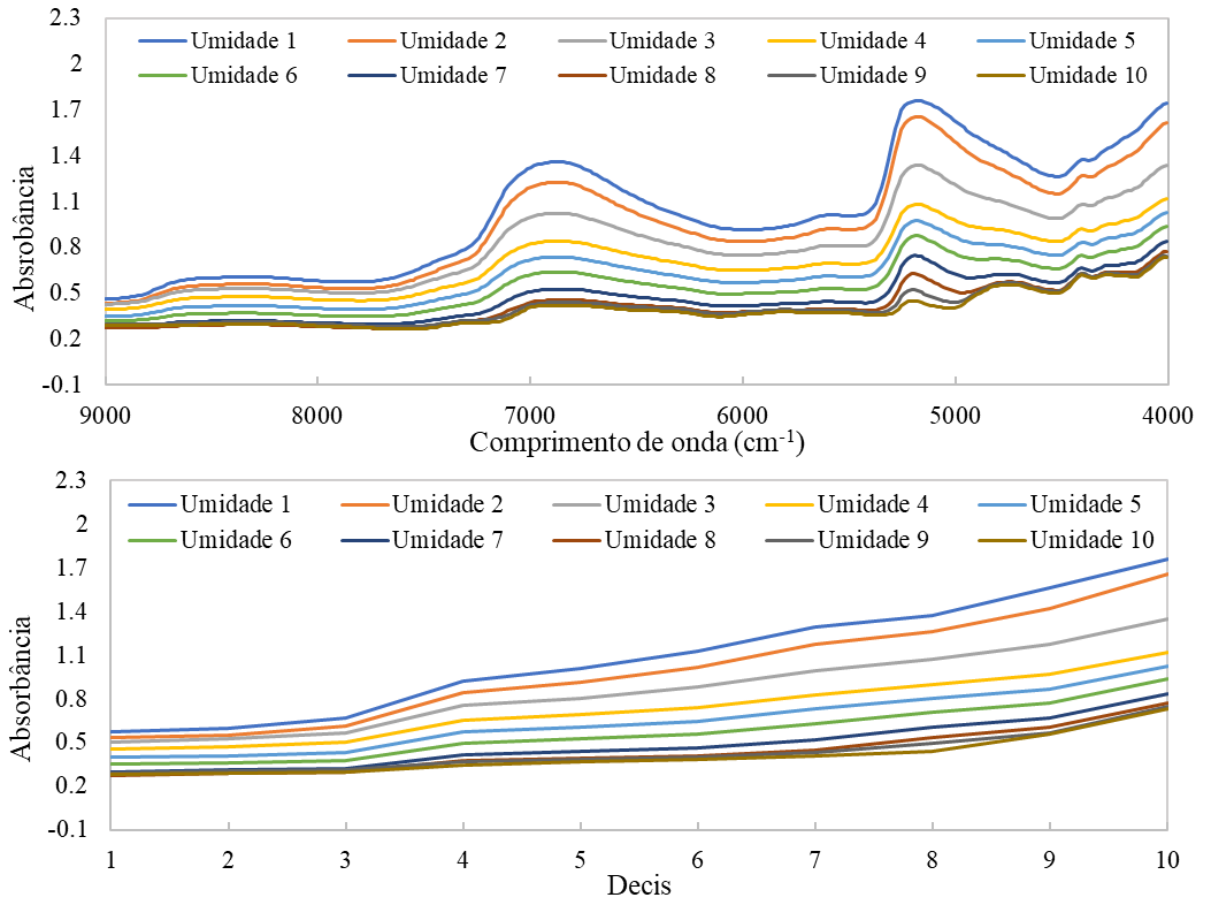
A densidade da madeira é um dos principais parâmetros que devem ser considerados na avaliação da qualidade da madeira para produção de polpa celulósica, uma vez que esta propriedade é considerada como um indicativo, quanto aos níveis de impregnação dos cavacos, rendimento e custos de produção (BALDIN et al., 2020). A densidade básica considerada ideal para a produção de celulose é em torno de $0,45 \text{ g cm}^{-3}$, com limite mínimo de $0,40 \text{ g cm}^{-3}$ e máximo de $0,55 \text{ g cm}^{-3}$. Sendo assim, pode-se observar que dentre os cavacos estudados alguns passam dos limites estipulados para a produção de celulose, por isso o controle da densidade básica é uma etapa importante no processo industrial (ADI et al., 2014; FOELKEL et al., 1992).

5.1.2 Decis e Espectros no NIR

A média dos espectros originais medidos no NIR e a média dos decis calculados a partir dos espectros originais, coletados nas dez etapas de dessorção de água dos cavacos de madeira

podem ser visualizados na Figura 9. A aquisição dos espectros, foi realizada faixa entre 12.500 e 3.600 cm^{-1} , no entanto, faixa da região espectral entre 12.500 e 9.000 cm^{-1} foi excluída, uma vez que esta não é informativa e apresenta elevada quantidade de ruídos.

Figura 9 - Espectros de reflexão difusa e decis nas diferentes fases de umidade dos cavacos de madeira.



Fonte: Da autora (2022).

Os espectros originais e os decis calculados a partir dos espectros apresentaram comportamento similar de absorvância nas diferentes fases de umidade dos cavacos de madeira, como pode ser observado na Figura 9. No entanto, na figura, também é possível observar que os picos de absorção foram mais nítidos a partir da média dos espectros, quando comparada com a média dos decis.

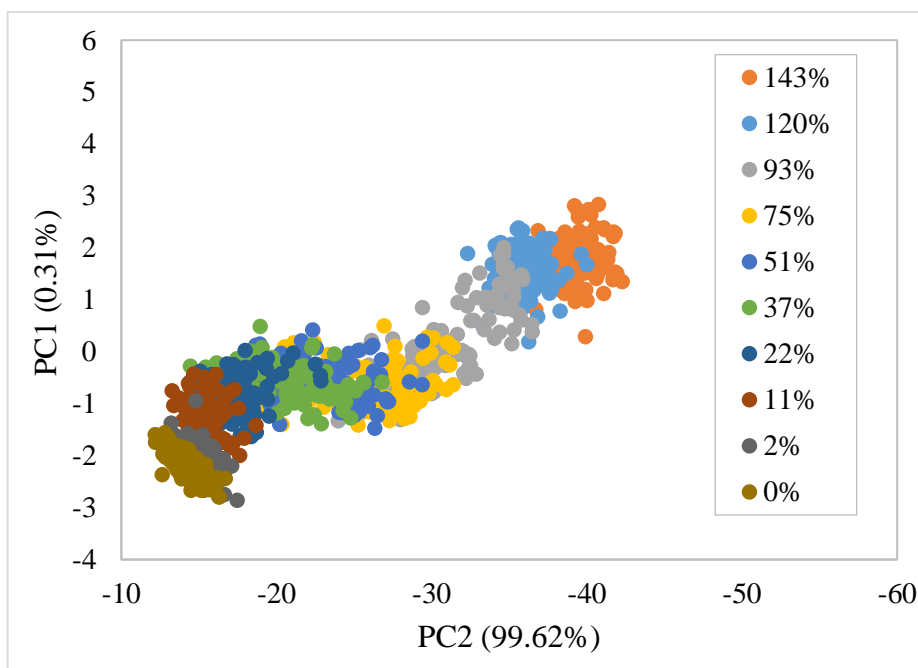
Os picos de absorvância podem ser observados nos comprimentos de onda de aproximadamente 7.100 e 5.300 cm^{-1} ou 1.428 e 1.924 nm. Estes picos de absorção se referem aos grupos funcionais encontrados na madeira como C-H, N-H, S-H ou O-H, os quais sofrem alterações de acordo com a umidade da mesma.

Os valores de absorvância deste estudo condizem com os resultados obtidos por Watanabe et al. (2011) que encontraram as maiores absorções no comprimento de onda de 1.430 e 1.910 nm e Dos Santos et al. (2020) que obtiveram os maiores picos de absorção no comprimento de onda de 7.100 e 5.300 cm^{-1} . Os autores atribuem os picos de absorção a assimilação de água pelas vibrações de grupos OH, que estão diretamente relacionados com a umidade.

5.1.3 Análise de Componentes Principais (PCA)

A Análise de Componentes Principais (PCA) foi realizada a partir dos espectros originais obtidos na face longitudinal dos cavacos de madeira utilizando a esfera de integração. Na Figura 10, é possível observar que a Componente Principal 1(PC1) explicou 99,62% dos dados, enquanto a Componente Principal 2 (PC2) explicou 0,31% dos dados, explicando juntas 99,93% da variação dos dados.

Figura 10 - Scores da análise de componentes principais dos espectros no NIR medidos em cavacos de madeira com diferentes níveis de umidade.



Fonte: Da autora (2022).

Na figura 10, os scores das amostras se agruparem de acordo com a dessorção de água dos cavacos de madeira, sendo que as amostras mais secas se agruparam de forma mais nítida,

quando comparadas as mais úmidas, isso ocorre devido a baixa variação de umidade. Amaral et al. (2018) observou agrupamento semelhante ao monitorar a secagem de cavacos de madeira.

5.1.4 Modelos PLS-R e RNA

A Tabela 2 apresenta os modelos desenvolvidos por PLS-R utilizando espectros originais do NIR e RNA utilizando decis e PCA para estimar a umidade de cavacos de madeira da condição saturada à condição anidra.

Tabela 2 - Modelos de treino e teste para estimar a umidade dos cavacos de madeira a partir de espectros NIR por PLS-R e RNA.

Modelo	Dados	Treino		Teste		RPD
		R ²	RMSE	R ²	RMSE	
RNA*	Decis	0,96	10,08	0,97	8,83	5,58
RNA*	PCA	0,97	9,31	0,96	9,78	5,04
PLS-R**	Espectros	0,96	9,18	0,96	9,00	5,47

R² – Coeficiente de determinação; RMSE – Raiz quadrada do erro médio; RPD – Relação de desempenho do desvio padrão; * - Modelo desenvolvido com duas camadas, com dois neurônios cada; ** Modelagem utilizando 10 variáveis latentes.

Fonte: Da autora (2022).

Os modelos desenvolvidos a partir das RNA, utilizando os decis para estimar a umidade de cavacos de madeira, apresentaram R² de 0,96 e RMSE de 10,08% no treino, R² 0,97 e RMSE de 8,83% no teste e RPD de 5,58. Já a modelagem RNA desenvolvida a partir da PCA alcançou R² 0,97 e RMSE de 9,31% no treino, R² 0,96 e RMSE de 9,78% no teste e RPD de 5,04. As estatísticas encontradas estão de acordo com resultados obtidos por Li e Li (2012) que, ao estimarem a umidade da madeira de Lariço com umidade de 9 e 85,17%, utilizando espectros no NIR e RNA, alcançaram R² de 0,95 e RMSE de 38,27%.

Zanuncio et al. (2016) demonstraram em seus estudos a acurácia da RNA para monitorar a umidade da madeira durante a secagem de *Eucalyptus urophylla* x *Eucalyptus grandis*, da condição saturadas até a umidade de equilíbrio, utilizando como dados de entrada a densidade e os dias de secagem. Os autores obtiveram R² de 0,99 e RMSE de 17,47%, comprovando, assim, que as RNA's podem ser utilizadas de forma eficiente o para controle da umidade da madeira durante a secagem. Ozahin e Murat (2018) ao utilizarem a modelagem RNA para

determinar umidade de equilíbrio da madeira de *Abies bornmülleriana* Mattf e *Carpinus betulus* L tratada termicamente, definindo como entrada da rede, os dados temperatura, tempo de exposição e umidade relativa da madeira obtiveram R^2 de 0,99 e RMSE de 0,0005.

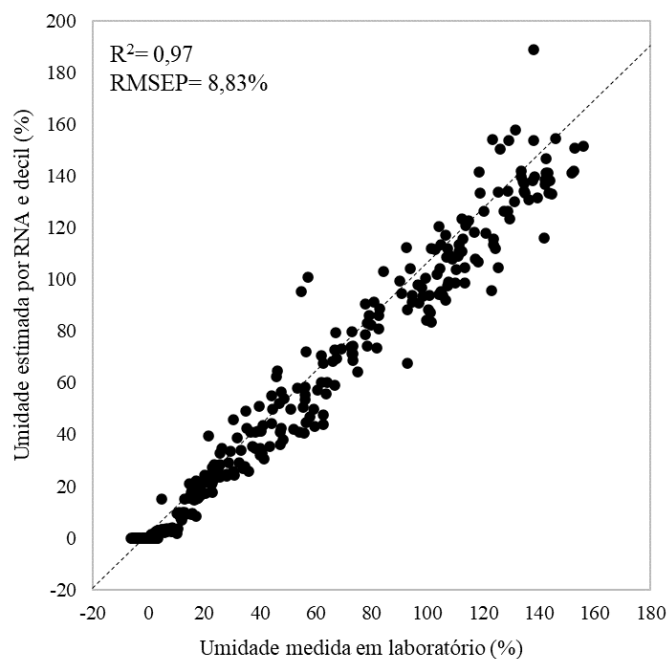
O modelo desenvolvido por PLS-R, a partir de espectros no NIR, para determinar a umidade dos cavacos de madeira da condição saturada a condição anidra apresentaram R^2 de 0,96 e RMSE de 9,18% no treino, R^2 de 0,96 e RMSE de 9,00% no teste e RPD de 5,47. Amaral et al. (2020), utilizando a espectroscopia no NIR associada a PLS-R para estimar a umidade de cavacos de *Eucalyptus urophylla* x *Eucalyptus grandis*, encontraram resultados semelhantes R^2 de 0,95 e RMSE de 7,54% no treino e R^2 de 0,95 e RMSE de 7,78% no teste.

Dos Santos et al. (2020) observaram R^2 de 0,95 e RMSE de 9,06% no treino e R^2 de 0,96 e RMSE de 8,64% no teste ao utilizarem o NIR e a PLS-R para monitorar a umidade da madeira de *Eucalyptus* spp. A partir de espectros coletados na face transversal de corpos de prova confeccionados com serra fita. Liang et al. (2019), ao realizarem o monitoramento da umidade de cavacos de *Populus* secos (9 a 11% de umidade), utilizando o NIR em conjunto com a PLS-R, obtiveram R^2 de 0,99 e RMSE de 2,03% na validação cruzada e R^2 de 0,97 e RMSE de 2,65% na validação independente.

Os modelos gerados pela PLS-R e pela RNA apresentaram correlações satisfatórias e semelhantes, no entanto, a modelagem RNA utilizando decis, forneceu o modelo com maior robustez, apresentando o maior R^2 e o menor RMSE (Figura 11). Os RMSE de aproximadamente 9%, apresentado pelos modelos, podem ser justificados pelas amplas bandas de absorção das moléculas de água, principalmente quando há água livre no lúmen das células, promovendo a ocorrência de sobreposição de sinais informativos, relacionados as propriedades da madeira, reduzindo assim, a robustez dos modelos (LIANG et al, 2020).

A correlação das umidades medidas em laboratório e estimadas pelos modelos RNA's a partir dos decis e PCA e PLS-R a partir dos espectros no NIR, foram semelhantes, sugerindo que os três métodos de modelagem podem ser utilizados de forma eficiente para monitorar a umidade de cavacos de madeira de *Eucalyptus* spp.

Figura 11 - Valores de umidade da madeira determinados em laboratório e estimados por RNA utilizando decil na fase de teste.



Fonte: do autor (2022).

Os modelos PLS-R utilizando espectros originais do NIR e RNA utilizando decis e PCA para estimar a densidade básica de cavacos de madeira, a partir de espectros coletados da condição saturada à condição anidra, podem ser observados na Tabela 3.

Tabela 3 - Modelos de treino e teste para estimar a densidade básica de cavacos de madeira em diferentes umidades a partir de espectros NIR por PLS-R e RNA.

Modelo	Dados	Treino		Teste		RPD
		R ²	RMSE	R ²	RMSE	
RNA*	Decis	0,23	0,02	0,17	0,02	1,00
RNA*	PCA	0,10	0,05	0,11	0,02	1,00
PLS-R**	Espectros	0,14	0,02	0,13	0,02	1,00

R² – Coeficiente de determinação; RMSE – Raiz quadrada do erro médio; RPD – Relação de desempenho do desvio padrão; * - Modelo desenvolvido com duas camadas, com dois neurônios cada; ** Modelagem utilizando 10 variáveis latentes.

Fonte: Da autora (2022).

Os resultados apresentados na Tabela 3 indicam que os valores de predição da densidade básica dos cavacos de madeira por RNA e PLS-R, utilizando espectros do NIR coletados da condição saturada a condição anidra, estão fracamente correlacionados com os valores

experimentais. O modelo desenvolvido por RNA utilizando os decis para a predição da densidade básica forneceu R^2 de 0,23 no treino e 0,17 no teste, RMSE de 0,02 no treino e no teste e RPD de 1,00, enquanto, na modelagem RNA utilizando PCA o R^2 foi de 0,10 no treino e 0,11 no teste, RMSE de 0,05 no treino e 0,02 no teste e RPD de 1,00.

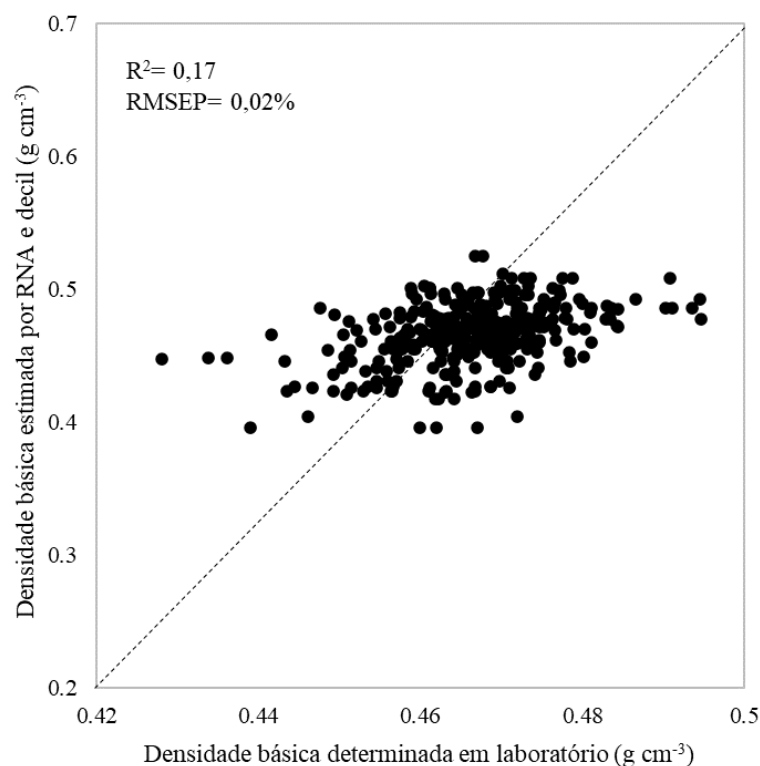
Li et al. (2010), ao utilizar a rede neural e o NIRS para predizer da densidade básica da madeira de lariço, encontraram R^2 de 0,91 e RMSE de 0,02, porém, os autores mediram os espectros NIR em madeira maciça e utilizaram corpos de prova com densidades que variavam de 0,48 a 0,78 g/cm³. Portanto, pode-se sugerir que o baixo desempenho dos modelos RNA a partir de espectros NIR no presente estudo, pode ser atribuído ao tipo/formato de material, bem como a baixa gama de variação da densidade básica apresentada pelos cavacos.

Os modelos PLS-R, desenvolvidos para a predição da densidade básica dos cavacos a partir de espectros NIRS, apresentaram valores semelhantes aos obtidos na modelagem por RNA. A modelagem PLS-R, para estimar a densidades básica dos cavacos de madeira, da condição anidra a condição saturada apresentou R^2 de 0,14 no treino e 0,13 no teste, com RMSE de 0,02 no treino e no teste e RPD de 1,00. Desta forma, os resultados encontrados não são satisfatórios, uma vez que os valores estimados não apresentaram correlação com os valores medidos.

Costa et al. (2018), ao analisarem os espectros do NIR utilizando PLS-R para estimar a densidade básica de híbridos de *Eucalyptus urophylla* x *Eucalyptus grandis*, encontraram R^2 de 0,98 e RMSE de 23 kg m⁻³, valores estes que divergem dos encontrados neste estudo. No entanto, os autores realizaram as leituras dos espectros em prismas de madeira e a densidade do material investigado apresentava variação de 290 a 680 kg m⁻³. Já Baldin et al. (2020), ao utilizarem espectros NIR e PLS-R para estimar a densidade básica de cavacos de *Eucalyptus* sp com densidades variando entre 357 kg/m³ e 491 kg/m³, obtiveram R^2 de 0,73 e RMSE de 16 Kg/m³, porém os autores relataram que vários outliers foram removidos do conjunto inicial da amostra.

A correlação dos modelos desenvolvidos pela PLS-R e pela RNA apresentaram correlações insatisfatórias, sendo que a modelagem RNA utilizando decis, forneceu o melhor correlação, como pode ser observado na Figura 12. No entanto, os modelos obtidos não apresentaram forte relação entre as densidades básicas medidas em laboratório e estimadas pelos modelos RNA's e PLS-R, sugerindo que os três métodos de modelagem não são eficientes para determinar a densidade de cavacos de madeira de *Eucalyptus* spp. independente da umidade.

Figura 12 - Valores de densidade básica de cavacos de madeira determinados em laboratório e estimados por RNA utilizando decil na fase de teste.



Fonte: do autor (2022).

5.2 Estudo das propriedades dos prismas

Nesta seção serão abordados/apresentados somente os resultados referentes aos dados provenientes dos prismas de madeira de *Eucalyptus* spp.

5.2.1 Dados de referência

As umidades e densidades básica dos prismas de madeira, medidas em laboratório da condição saturada à condição anidra podem ser observadas na Tabela 4. As amostras prismáticas de *Eucalyptus* spp. apresentaram densidade básica média de 0,49 g cm⁻³, variando entre 0,23 e 0,82g cm⁻³. O coeficiente de variação obtido foi de 29,66% o desvio padrão de 0,14. As medidas de umidade variaram de 14,83 a 184,25%, com coeficiente de variação de 59,94% e desvio padrão de 34,69, é importante ressaltar que o valor alto do coeficiente de variação foi induzido, uma vez que desejava-se uma ampla variação de umidade.

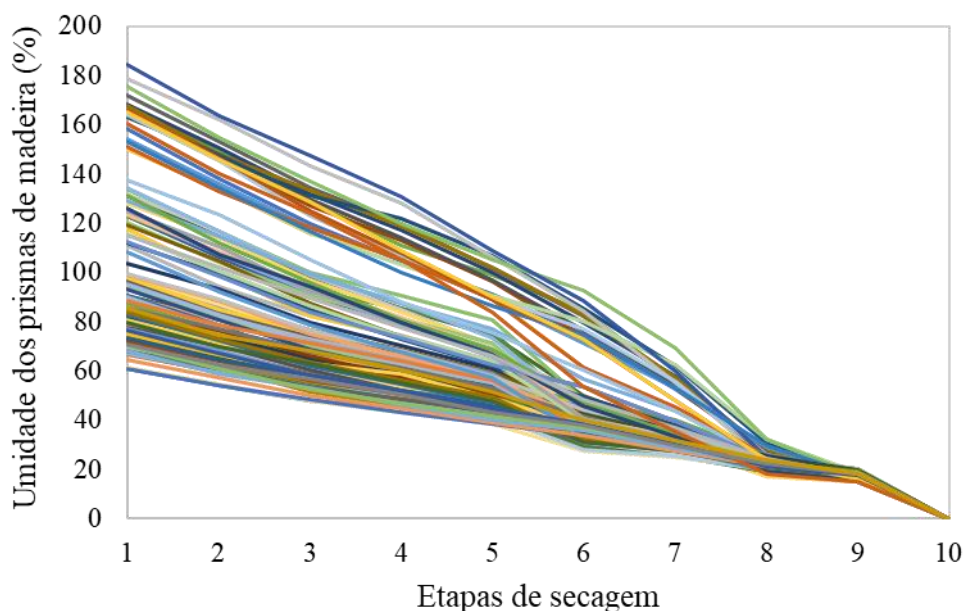
Tabela 4 – Faixa de umidade e densidade básica medidas em laboratório para o desenvolvimento do modelo dos prismas de madeira.

Propriedade	Número de amostras	Mínimo	Máximo	Média	Coefficiente de variação	Desvio padrão
Umidade (%)	110	14,83	184,25	57,87	59,94	34,69
Densidade (g cm ⁻³)	110	0,23	0,82	0,49	29,66	0,14

Fonte: Da autora (2022).

Os resultados de umidade apresentados na Tabela 4 foram semelhantes aos encontrados no estudo com os cavacos de madeira de *Eucalyptus* spp.. Dos Santos et al. (2020), ao determinarem a umidade da madeira de *Eucalyptus urophylla* x *E grandis* da condição saturada até a condição anidra, obtiveram umidade média de 45,08%, com o mínimo de 0% e máximo de 252,62, e coeficiente de variação de 106,89%. Os valores obtidos no cálculo do coeficiente de variação e do desvio padrão, são considerados altos, e assim como ocorreu nos cavacos, podem ser justificados, pela alta variação de umidade, que foi medida desde a condição saturada até a condição anidra, como pode ser observado na Figura 13.

Figura 13 - Etapas de secagem de cavacos de madeira.



Fonte: do autor (2022).

As amostras prismáticas de *Eucalyptus* spp. apresentaram densidade básica média de 0,49 g cm⁻³, variando entre 0,23 e 0,82 g cm⁻³. O coeficiente de variação foi de 29,66% e desvio padrão de 0,14. Ao comparar estes valores com o obtidos no estudo de cavacos de *Eucalyptus*

spp., percebe-se que os prismas demonstraram maior variação de densidade, abrangendo uma ampla gama de densidade entre as amostras.

A densidade média obtida a partir de prismas de madeira de *Eucalyptus* spp., condiz com os valores encontrados na literatura, em que Alves et al. (2011), ao determinar a densidades básica de *Eucalyptus globulus* aos seis anos de idade, obtiveram média de 0,472 g cm⁻³. Já Costa et al. (2018) ao determinar a densidade básica de *Eucalyptus* de 6 e 6,5 anos de idade encontrou a média de 0,46 g cm⁻³, com a densidade básica variando de 0,290 a 0,680 g cm⁻³. Jesus et al. (2019) ao determinarem a densidade básica de *Eucalyptus grandis* x *E. urophylla* com oito anos de idade, plantados em dois locais, encontraram densidade básica média de 0,556 g cm⁻³ no sítio 1 e de 0,542 g cm⁻³ no sítio dois, sendo estes valores superiores aos alcançados neste estudo.

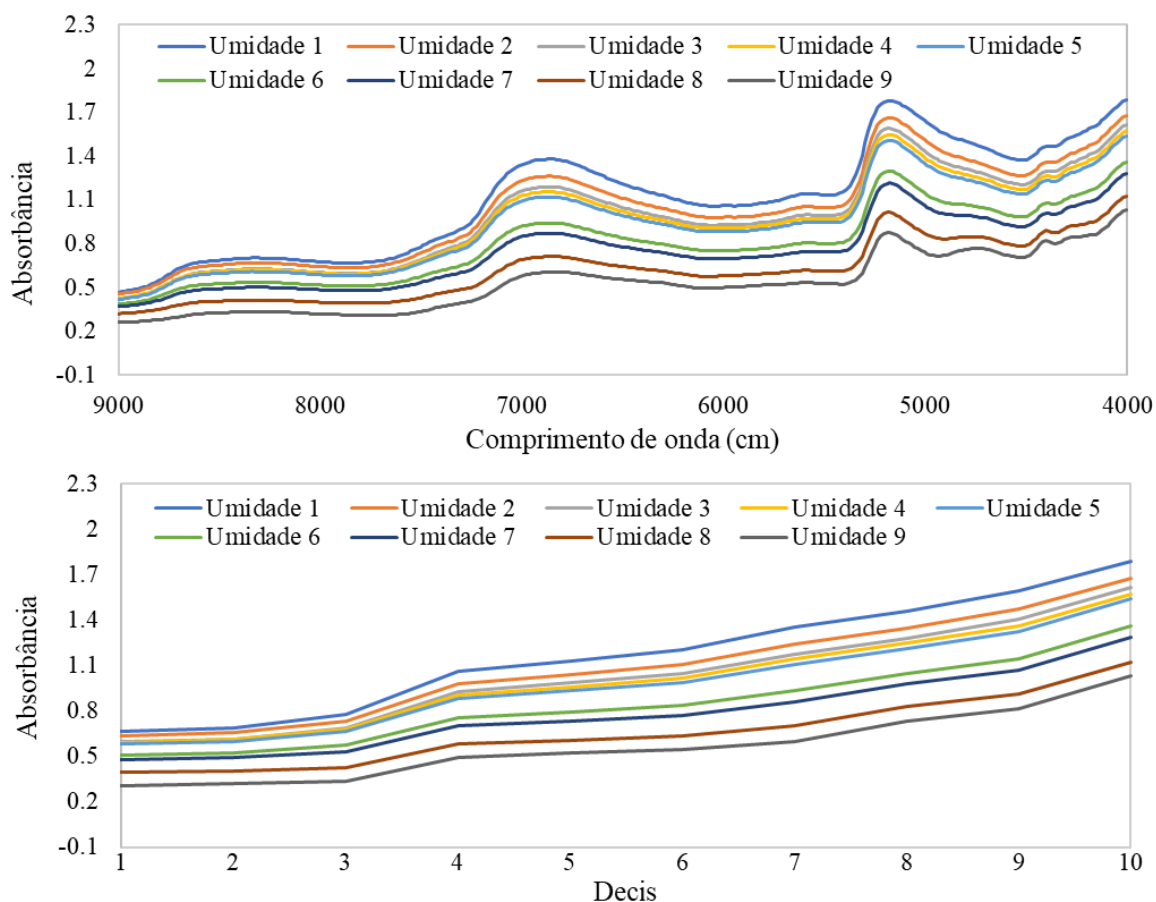
5.2.2 Decis e espectros no NIR

As médias dos espectros originais medidos no NIR e as média dos decis calculados a partir dos espectros, podem ser observadas na Figura 14. A leitura dos espectros foram realizadas por meio da via de aquisição esfera de integração, na face transversal dos prismas de madeira, nas nove fases de dessecção de água da madeira. A aquisição dos espectros foi efetuada na faixa espectral de 12.500 a 3.600 cm⁻¹, sendo a faixa compreendida entre 12.500 e 9.000 cm⁻¹ excluída, por ser informativa e apresentar ruídos.

O comportamento da média dos espectros originais e dos decis nos prismas de madeira foram similares aos obtidos nos cavacos, uma vez que, os picos se apresentaram de forma mais evidentes nas médias dos espectros originais quando comparados as médias dos decis. No entanto, o comportamento das médias dos espectros e dos decis nas diferentes fases de umidade foram semelhantes, em que quanto menor a umidade da madeira menor a absorbância.

Os maiores picos de absorbância, assim como no estudo realizado com os cavacos de madeira, foram observados no comprimento de onda de 7.100 e 5.300 cm⁻¹ ou 1.428 e 1.924 nm. Estes, se referem aos grupos funcionais específicos encontrados na madeira, os quais sofrem alterações de acordo com a umidade da mesma. Estes picos de absorbância condizem com os valores encontrados por Watanabe et al. (2018) e Santos et al (2021) ao estudarem a umidade de madeira *Tsuga heterophylla* e *Eucalyptus*, respectivamente.

Figura 14 - Espectros de reflexão difusa e decis nas diferentes fases de umidade dos prismas de madeira.



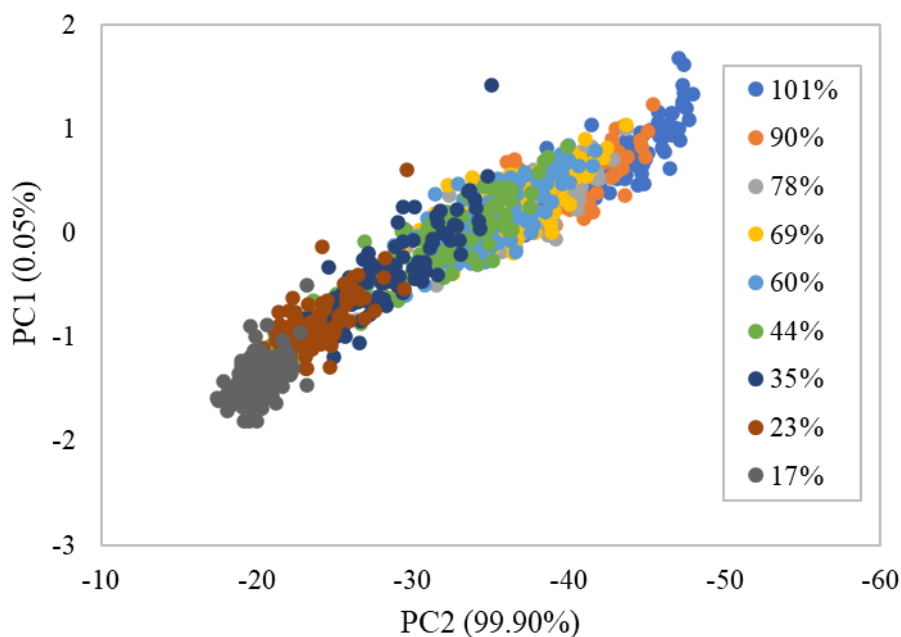
Fonte: Da autora (2022).

5.2.3 Análise de Componentes Principais (PCA)

A figura 15, apresenta o gráfico de scores da análise de componentes principais, obtidos a partir da leitura dos espectros nos 110 corpos de prova prismáticos, nas nove fases de umidade da madeira, desde a condição saturada até a umidade de equilíbrio. A Componente Principal 1 (PC1), juntamente com a Componente Principal 2 (PC2), explicaram 99,95% dos dados, sendo que a PC1 explicou 99,90% da variação dos dados, enquanto a PC2 explicou 0,05%.

Os espectros obtidos no NIR a partir das amostras prismáticas, apresentaram agrupamento semelhante aos obtidos no cavaco, em que, principalmente as amostras mais secas se agruparam de forma mais evidente, devido a baixa variação de umidade. Este resultado apresenta similaridade ao encontrado por Amaral et al. (2020).

Figura 15 - Scores da análise de componentes principais dos espectros no NIR medidos em prismas de madeira em diferentes níveis de umidade.



Fonte: Da autora (2022).

5.2.4 Modelos PLS-R e RNA

A Tabela 5 apresenta as estimativas de umidades dos prismas de madeira *Eucalyptus* spp., a partir da modelagem PLS-R, utilizando os espectros originais e RNA por meio dos decis e PCA, calculados a partir dos espectros. Esta estimativa corresponde as diferentes umidades da madeira, medidas desde a condição saturada das amostras até a umidade de equilíbrio.

Tabela 5 - Modelos de treino e teste para estimar a umidade de primas de madeira de *Eucalyptus* spp. a partir de espectros NIR por PLS-R e RNA.

Modelo	Dados	Treino		Teste		RPD
		R ²	RMSE	R ²	RMSE	
RNA*	Decis	0,92	10,52	0,92	10,38	3,34
RNA*	PCA	0,94	13,32	0,87	13,94	2,48
PLS-R**	Espectros	0,91	10,44	0,88	10,90	3,18

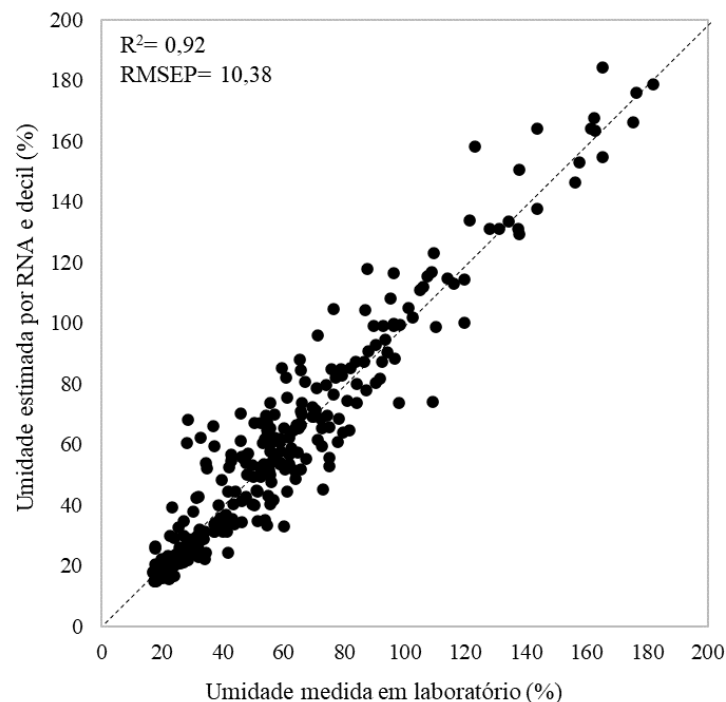
R² – Coeficiente de determinação; RMSE – Raiz quadrada do erro médio; RPD – Relação de desempenho do desvio padrão; * - Modelo desenvolvido com duas camadas, com dois neurônios cada; ** Modelagem utilizando 10 variáveis latentes.

Fonte: Da autora (2022).

Os valores obtidos por meio de modelos RNA a partir dos decis apresentaram R^2 de 0,92 no treino e no teste, RMSE de 10,52 no treino e 10,38 no teste e RPD de 3,34, enquanto o desenvolvido pelo cálculo da PCA apresentou R^2 0,94 no treino e 0,87 no teste, RMSE de 13,32 no treino e 13,94 no teste e RPD de 2,48. Já o modelo PLS-R utilizando os espectros originais alcançou R^2 de 0,91 no treino e 0,88 no teste, RMSE 10,44 no treino e 10,90 no teste e RPD de 3,18. Portanto, pode-se afirmar que os três métodos de processamento se demonstrado satisfatórios para a determinação da umidade de cavacos e prismas de *Eucalyptus* spp., no entanto, o modelo RNA utilizando decis foi o que forneceu a melhor previsão de umidade como pode ser observado na Figura 16.

Os resultados encontrados para a modelagem RNA condizem com os descritos na literatura, sendo que Li e Li (2012) ao estimarem a umidade da madeira de Lariço com umidade de 9 e 85,17%, utilizando espectros no NIR e RNA, alcançaram R^2 de 0,95 e RMSE de 38,27%. Zanuncio et al. (2016) ao determinarem a umidade *Eucalyptus urophylla* x *Eucalyptus grandis*, da condição saturadas até a umidade de equilíbrio, obtiveram R^2 de 0,99 e RMSE de 17,47%, comprovando, que as RNA's podem ser utilizadas de forma eficiente na estimativa da umidade da madeira durante a secagem.

Figura 16 – Valores de umidade da madeira determinados em laboratório e estimados por RNA utilizando decil na fase de teste.



Fonte: do autor (2022).

O modelo desenvolvido por PLS-R a partir dos espectros originais, método tradicionalmente utilizado para análises espectrais do NIR, forneceu valores semelhantes aos encontrados na literatura. Amaral et al. (2020), ao estimar a umidade de cavacos de *Eucalyptus urophylla* x *Eucalyptus grandis*, utilizando espectros NIR e PLS-R, alcançaram semelhantes R^2 de 0,95 e RMSE de 7,54% no treino e R^2 de 0,95 e RMSE de 7,78% no teste. Dos Santos et al. (2020) observaram R^2 de 0,95 e RMSE de 9,06% no treino e R^2 de 0,96 e RMSE de 8,64% no teste ao utilizarem o NIR e a PLS-R para monitorar a umidade da madeira de *Eucalyptus* spp.

A Tabela 6 apresenta as previsões da modelagem RNA utilizando decis e PCA e da modelagem PLS-R a partir espectros originais do NIR, para estimar a densidade básica de prismas de *Eucalyptus* spp., independente da umidade, uma vez que, os espectros foram coletados da condição saturada à umidade de equilíbrio.

Tabela 6 - Modelos de treino e teste para estimar a densidade básica de prismas de madeira de *Eucalyptus* spp. a partir de espectros NIR por PLS-R e RNA.

Modelo	Dados	Treino		Teste		RPD
		R^2	RMSE	R^2	RMSE	
RNA*	Decis	0,77	0,07	0,78	0,06	2,33
RNA*	PCA	0,50	0,10	0,55	0,10	1,40
PLS-R**	Espectros	0,85	0,05	0,80	0,07	2,00

R^2 – Coeficiente de determinação; RMSE – Raiz quadrada do erro médio; RPD – Relação de desempenho do desvio padrão; * - Modelo desenvolvido com duas camadas, com dois neurônios cada; ** Modelagem utilizando 10 variáveis latentes.

Fonte: Da autora (2022).

Como pode ser observado na Tabela 6 os resultados obtidos a partir do modelo RNA utilizando decis apresentou R^2 de 0,77 no treino e 0,78 no teste, com RMSE de 0,07 no treino e 0,06 no teste e RPD de 2,33, já o modelo RNA a partir da PCA forneceu R^2 de 0,50 no treino e 0,55 no teste, RMSE de 0,10 no treino e 0,10 no teste e RPD de 1,40, enquanto a PLS-R alcançou R^2 de 0,85 no treino e 0,80 no teste e RMSE de 0,05 no treino e 0,07 no teste, bem como RPD de 2,00. Portanto, é possível afirmar que o modelo RNA construído a partir dos decis e o PLS-R desenvolvido a partir dos espectros apresentaram correlações satisfatórias para a estimativa da densidade, independente da umidade, enquanto o modelo RNA utilizando a PCA não demonstrou robustez em suas previsões.

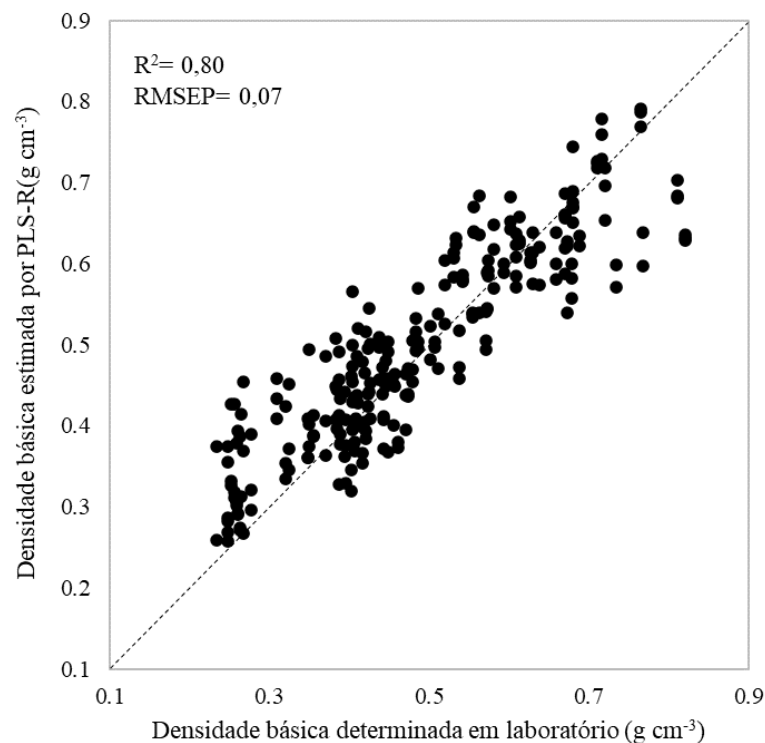
Li et al. (2010), ao determinarem a densidade básica de madeira de lariço utilizando espectro do NIR e RNA, obtiveram R^2 de 0,91 e RMSE de 0,02, em corpos de prova com

densidade variando entre 0,48 a 0,78 g/cm³. No entanto, os espectros NIR foram coletados na madeira apenas na condição de umidade de equilíbrio, e não na ampla gama de umidade, como realizado no presente estudo.

Baldin et al. (2020), ao utilizarem espectros NIR e PLS-R para estimar a densidade básica de madeira de *Eucalyptus* sp. moída, com densidades variando entre 357 kg/m³ e 491 kg/m³, encontraram R² de 0,73 e RMSE de 16 Kg/m³, porém os autores relataram que vários outliers foram removidos do conjunto inicial da amostra e não especificaram em qual condição de umidade os espectros foram coletados. Já Costa et a. (2018), ao analisarem os espectros do NIR utilizando PLS-R para estimar a densidade básica de híbridos de *Eucalyptus urophylla* x *Eucalyptus grandis*, com densidade variando entre 290 e 680 kg m⁻³, encontraram R² de 0,98 e RMSE de 23 kg m⁻³, valores estes, superiores aos encontrados neste estudo. No entanto, os autores realizaram as leituras dos espectros em prismas de madeira na condição de umidade de equilíbrio.

A relação entre densidade básica da madeira medida em laboratório e estimada pela PLS-R a partir dos espectros NIR, independente da umidade em que esta se apresentava pode ser observada na Figura 17.

Figura 17 – Valores de densidade básica de cavacos de madeira determinados em laboratório e estimados por PLS-R no modelo de teste.



Fonte: do autor (2022).

Na figura 17 percebe-se que os valores de densidade medidos em laboratório, independente da umidade em que os primas de madeira de *Eucalyptus* spp., são semelhantes aos estimados pela PLS-R utilizando os espectros NIR. É importante ressaltar que a modelagem RNA utilizando os decis, apresentou valores semelhantes a PLS-R, por isso, ambos os métodos de processamento podem ser utilizados de forma eficiente para prever a densidade independente da umidade da madeira.

Os resultados encontrados na predição da densidade dos prismas de *Eucalyptus* spp. se demonstram eficientes, diferentemente dos encontrados na predição da densidade de cavacos de madeira, que não apresentaram resultados satisfatórios. O desempenho insatisfatório dos modelos desenvolvidos a partir dos espectros coletados em cavacos de madeira, pode ser atribuído, a baixa variação de densidade do material estudado.

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os modelos de treino e testes desenvolvidos por RNA utilizando PCA e decis e PLS-R utilizando espectros originais do NIR, se mostraram eficientes para a estimativa da umidade de cavacos de *Eucalyptus* spp. a partir de espectros NIR. No entanto o modelo RNA utilizando decis forneceu as melhores estimativas.

A estimativa da densidade básica de cavacos de madeira utilizando espectros NIR, associado a modelagem por RNA e PLS-R, não apresentaram resultados satisfatórios e a baixa correlação entre os valores medidos e preditos pode ser atribuída à baixa variação de densidade do conjunto de dados.

Os modelos para estimativa da umidade dos prismas de madeira de *Eucalyptus* spp. apresentaram estatísticas satisfatórias nos três métodos de processamento a partir dos espectros coletados no NIR. No entanto, o modelo RNA, utilizando decis, forneceu as melhores estatísticas. Os modelos de treino e testes desenvolvidos por RNA, utilizando decis, e por PLS-R, utilizando espectros originais do NIR, se mostraram eficientes na determinação da densidade básica de prismas de *Eucalyptus* spp. independente da umidade da madeira.

REFERÊNCIAS

- ADI, D. S.; RISANTO, L.; DAMAYANTI, R.; RULLYATI, S.; DEWI, L. M.; SUSANTI, R.; DWIANTO, W.; HERMIATI, E.; WATANABE, T. Exploration of unutilized fast growing wood species from secondary forest in central kalimantan: study on the fiber characteristic and wood density. **Procedia Environmental Sciences**, v, 20, p. 321-327, 2014.
- ALVES, A. M. M. et al. Determination of *Eucalyptus globulus* wood extractives content by near infrared-based partial least squares regression models: comparison between extraction procedures. **Journal Near Infrared Spectroscopy**, v. 20, n. 2, p. 275–285, Jan. 2012.
- AHMADI-NEDUSHAN, B. Multivariate Statistical Analysis of monitoring data for concrete dams. Tese de Doutorado do Departamento de Engenharia Civil e Mecânica Aplicada, McGill University. Montreal, p. 211. 2002.
- AKARACHANTACHOTE, N.; CHADCHAM, S.; SAITHANU, K. Cutoff threshold of variable importance in projection for variable selection. **International Journal of Pure and Applied Mathematics**, v. 94, n. 3, p. 1-16, 17, 2014.
- Alves, A.; Simões, R.; Stackpole, D. J.; Vaillancourt, R. E.; Potts, B. M.; Schwanninger, M.; & Rodrigues, J. C. Determination of the syringyl/guaiacyl ratio of *Eucalyptus globulus* wood lignin by near infrared-based partial least squares regression models using analytical pyrolysis as the reference method. **Journal of Near Infrared Spectroscopy**, v. 19, n. 5, p. 343-348, 2011.
- AMARAL, E. A. **Estimativa da umidade em cavacos de madeira por espectroscopia no infravermelho próximo**. 2018. 58 p. Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia da Madeira) - Universidade Federal de Lavras, Lavras, 2018.
- ARRIEL, T. G.; RAMALHO, F. M. G.; Lima, R.A.B.; SOUSA, K. I. R.; HEIN, P.R.G; TRUGILHO, P.F. Developing near infrared spectroscopic models for predicting density of *Eucalyptus* wood based on indirect measurement. **Cerne**, v. 25, p. 294-300, 2019.
- AYANLEYE, S.; NASIR, V.; AVRAMIDIS, S.; COOL, J. Effect of wood surface roughness on prediction of structural timber properties by infrared spectroscopy using ANFIS, ANN and PLS regression. *European Journal of Wood and Wood Products*. v. 79, p. 101–115, 2021.
- BALDIN, T.; TALGATTI, M.; DA SILVEIRA, A. G.; MARCHIORI, J. N. C.; DOS SANTOS, G. A.; DOS SANTOS, O. P.; VALENTE, B. M. R. T. Qualidade da madeira de *Eucalyptus benthamii* para produção de celulose por espectroscopia no infravermelho próximo (NIRS). **Scientia Forestalis**, v. 48, n. 126, p. 1-13, 2020.
- BALDIN, T.; Talgatti, M.; GRASSMANN, A.; DOS SANTOS, G. A.; Santos, O.; VALENTE, B. M. R. T. Modelos NIRS para as características químicas da madeira de *Eucalyptus benthamii* Maiden & Cabbage. **Caderno de Ciências Agrárias**, v. 12, p. 1-9, 2020.
- BEEBE, K. R.; KOWALSKI, B. R. An Introduction to Multivariate Calibration and Analysis, **Analytical Chemistry**, v.59, n.17, 1007-1017, 1987.

BEDELEAN, B. Application of artificial neural networks and Monte Carlo method for predicting the reliability of RF phytosanitary treatment of wood. **European Journal of Wood and Wood Products**, v. 76, p. 1113–1120, 2018.

BOKOBZA, L. Near Infrared Spectroscopy. **Journal of Near Infrared Spectroscopy**, Nagoia, v. 6, n.1, p. 3-17, 1998.

BRERETON, R. G.; Introduction to multivariate calibration in analytical chemistry, **Analyst**, v. 125, p. 2125-2154, 2000.

BRERETON, R. G. Chemometrics: Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant. Chichester, Wiley, p. 489. 2003.

BURNS, D.A.; CIURCZAK, E.W. **Handbook of near-infrared analysis**. 3.ed. Boca Raton: CRC, 2008. 808p.

CENTNER, V.; MASSART, D. Elimination of uninformative variables for multivariate calibration. **Analytical Chemistry**, v.68, n.21, p. 3851-3858, 1996.

CEYLAN, R., ÖZBAY, Y. Comparison of FCM, PCA and WT techniques for classification ECG arrhythmias using artificial neural network. **Expert Systems with Applications**, v. 33, n. 1, p. 286–295, 2007.

COINTE, A.; ROUGER, F. Improving the evaluation of multiple-dowel-type connection strength. **Wood Science and Technology**, v. 39, n. 1, 259-269, 2005.

CORDEIRO, M. A. et al. Estimativa do volume de Acacia mangium utilizando técnicas de redes neurais artificiais e máquinas vetor de suporte. **Pesquisa Florestal Brasileira**, v. 35, n. 83, p. 255– 261, 2015

COSTA, E. V. S. et al. Influence of spectral acquisition technique and wood anisotropy on the statistics of predictive near infrared–based models for wood densit. **Journal of Near Infrared Spectroscopy**, v. 26, n. 2, 106–116, 2018.

COSTA, L. R.; TURGILHO, P. F.; HEIN, P. R. G. Evaluation and classification of eucalypt charcoal quality by near infrared spectroscopy. **Biomass and Bioenergy**, v. 112, n. 1, p. 85-92, 2018.

COSTA, L. R.; TONOLI, G. H. D.; MILAGRES, F. R.; HEIN, P. R. G. Artificial neural network and partial least square regressions for rapid estimation of cellulose pulp dryness based on near infrared spectroscopic data. **Carbohydrate Polymers**, v. 224, p. 115-186, 2019.

DOS SANTOS, L. M.; AMARAL, E. A.; NIERI, E. M.; COSTA, E. V. S.; TRUGILHO, P. F.; CALEGÁRIO, N.; HEIN, P. R. G. Estimating wood moisture by near infrared spectroscopy: Testing acquisition methods and wood surfaces qualities. **Wood Material Science and Engineering**, v. 15, p. 1-8, 2020.

EOM, C. D. et al. Determining surface emission coefficient of wood using theoretical methods and near-infrared spectroscopy. **Wood Fiber Science**, Hanover, v. 45, n. 1, p. 76–83, Oct. 2013.

FAHEY, L. M.; NIEUWOUTD, M. K.; HARRIS, P. J. Predicting the cell-wall compositions of solid *Pinus radiata* (radiata pine) wood using NIR and ATR FTIR spectroscopies. **Cellulose**, v. 26, n. 1, 2019.

FAUSETT, L. V. *Fundamentals of Neural Networks: Architectures, Algorithms and Applications*. 1ª Ed. ed. New York: Pearson. 1993.

FERRÃO, M. F.; DAVANZO, C. U. Horizontal attenuated total reflection applied to simultaneous determination of ash and protein contents in commercial wheat flour. **Analytica Chimica Acta**, v. 440, p. 411-415, 2005.

FERNEDA, E. Redes neurais e sua aplicação em sistemas de recuperação de informação. **Ciências da Informação**, Brasília, v. 35, n. 1, p. 25-30, 2006.

FERREIRA, D. F. **Estatística multivariada**. Lavras: Editora da UFLA, 2008. 662 p.

FIORIN, D. V. et al. Aplicações de redes neurais e previsões de disponibilidade de recursos energéticos solares. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 33, n. 1, p. 1309-(1)-13019(20), 2011.

FOELKEL, C.; MORA, E.; MENOCELLI, S. Densidade básica: sua verdadeira utilidade como índice da qualidade da madeira de eucalipto para produção de celulose. **O Papel**, v. 53, n. 5, p. 35-40, 1992.

FUJIMOTO, T.; KOBORI, H.; TSUCHIKAWA, S. Prediction of wood density independently of moisture conditions using near infrared spectroscopy. *Journal Near Infrared Spectroscopy*, Sussex, v. 20, p. 353–359, 2012.

GARCIA, S. R. P., CHAVES NETO, A.; ORO, S. R.; MALFIOLETI, T. R. NEUMANN JUNIOR, C. Modelo de regressão por mínimos quadrados parciais para dados de monitoramento de barragens. *Revista Engenharia*, v. 11, p. 1-20, 2015.

GELADI, P.; DAVIES, A. M. C.; WILLIAMS, P. An overview of multivariate spectral data analysis. **Near infrared spectroscopy: the future waves**. Chichester: NIR Publications, 1995. p. 165-173.

GELADI, P.; KOWALSKI, B. R. Partial Least-Square regression: a tutorial. **Analytica Chimica Acta**, Amsterdam, v. 185, n. 1, p. 1-17, July 1986.

GIVENS, D. I., De BOEVER, J. L., DEAVILLE, E. R. The principles, practice and future applications of near infrared spectroscopy for predicting the nutritive value of foods for animals and humans. **Nutrition Research Reviews**, v. 10, n. 1, p. 83-114, 1997.

GLASS, S. V., ZELINKA, A. L. 2010. Moisture relations and physical properties of wood. **General Technical Report FPL- GTR-190**. 20P

HAYKIN, S. Redes neurais: princípios e práticas. 2. ed. Porto Alegre: Bookman, 900 p., 2001.

HEBB, D. O. The organization of behavior: a neuropsychological theory. New York, USA: Wiley, 1949.

HEIN, P. R. G. **Avaliação das propriedades da madeira de *Eucalyptus urophylla* por meio da espectroscopia no infravermelho próximo**. 2008. 75 p. Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia da Madeira) – Universidade Federal de Lavras, Lavras, 2008.

HEIN, P. R. G.; LIMA, J. T.; CHAIX, G. Effects of sample preparation on NIR spectroscopic estimation of chemical properties of *Eucalyptus urophylla* S.T. Blake wood. **Holzforschung**, Berlin, v. 64, n. 1, p. 45–54, 2010.

HEIN, P. R. G. Estimating shrinkage, microfibril angle and density of *Eucalyptus* wood using near infrared spectroscopy. **Journal Near Infrared Spectroscopy**, Sussex, v. 20, n. 4, p. 427–436, June 2012.

HOPFIELD, J. J. Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities. **Proceedings of the National Academy of Science of the USA**. v.79, n.8, p.2554-2558, 1982.

JESUS, D. S.; BORGES, R. N.; SILVA, J. S. Densidade básica e dimensões de fibra de um clone de eucalipto cultivado em diferentes locais. **Cadernos de Ciência & Tecnologia**, Brasília, v. 36, n. 3, p. 1-8, 2019.

KOIVÁCS, Z. L. (2002). Redes neurais artificiais: fundamentos e aplicações. 3^a ed., São Paulo, Editora Livraria da Física, 174p.

LENGOWSKI, E. C.; MUNIZ, G. I. B.; KLOCK, U.; NISGOSKI, S. Potential use of NIR and visible spectroscopy to analyze chemical properties of thermally treated wood. **Maderas Ciencia y tecnología**, v. 20, n. 4, 2018.

LI, P. et al. Use of BP neural network in near-infrared spectroscopy calibrations for predicting of wood density. **Advanced Materials Research**, v. 129-131, p. 306-311, 2010.

LI, P.; LI, Y. NIR-based wood water content prediction with an integration of ann and PCA. **Advanced Materials Research**, v. 502, p. 253-257, 2012.

LIANG, L.; FANG, G.; DENG, Y.; XIONG, Z. WU, T. Determination of moisture content and basic density of poplar wood chips under various moisture conditions by near-infrared spectroscopy. *Forest Science*, v. 65, n. 5, p. 548–555, 2019.

MANCINI, L. T.; RAMALHO, F. M. G.; TRUGILHO, P. F.; HEIN, P. R. G. Estimation of total extractive content of wood from planted and native forests by near infrared spectroscopy. **iForest-Biogeosciences and Forestry**, v. 14, p. 18-25, 2021.

MASTERS, T. Practical neural network recipes in C++. San Diego: Academic Press, 1993.

- MEDER, R.; THUMM, A.; MARSTON, D. Sawmill trial of at-line prediction of recovered lumber stiffness by NIR spectroscopy of *Pinus radiata* cants. **Journal Near Infrared Spectroscopy**, Sussex, v. 11, n. 2, p. 137-143, Apr. 2003.
- MEHROTRA, K.; MOHAN, C. K.; RANKA, S. Elements of Artificial Neural Networks. Cambridge, 1997. 344 p.
- MIRANDA, F. A.; FREITAS, S. R. C.; FAGGION, P. L. Integração e interpolação de dados de anomalias ar livre utilizando-se a técnica de RNA e Krigagem. **Boletim de Ciências Geodésicas**, Curitiba, v. 15, n 3, p.428-443, 2009.
- MINSKY, M. L.; PAPERT, S. A. Perceptrons: an introduction to computational geometry. Cambridge, Massachusetts, USA: The MIT Press, 1969.
- MUNIZ, G. I. B.; MAGALHAES, W. L. E.; CARNEIRO, M. E.; VIANA, L. C. Fundamentos e estado da arte da Espectroscopia no Infravermelho Próximo no setor de base florestal. **Ciência Florestal**, v. 22, n. 4, p. 865- 875, 2012.
- NAES, T.; ISAKSSON, T.; FEARN, T.; DAVIES, T.; Multivariate Calibration and Classification, NIR Publications: Chichester, 2002.
- NGUYEN, T. et al. Predicting color change in wood during heat treatment using an artificial neural network model. **BioResources**, v. 13, n. 3, p. 6250-6264, 2018.
- Nisgoski, S.; Muñiz, G. I. B.; & Klock, U. Caracterização anatômica da madeira de *Eucalyptus benthamii* Maiden et Cabbage. **Ciência Florestal**, v.8, n. 1, p. 67-76, 1998.
- NUNES, C. A.; FREITAS, M. P.; PINHEIRO, A. C. M.; BASTOS, S. C. Chemoface: a novel free user-friendly interface for chemometrics. **Journal Brazilian Chemical Society**, São Paulo, v. 23, n. 11, 2012
- OZSAHIN, S.; MURAT, M. Prediction of equilibrium moisture content and specific gravity of heat treated wood by artificial neural networks. **European Journal of Wood and Wood Products**, v. 76, n. 2, p. 563–572, 21 mar. 2018.
- ÖZŞAHIN, S. The use of an artificial neural network for modeling the moisture absorption and thickness. **BioResources**, v. 7, n. 1, p. 1053–1067, 2012.
- PASQUINI, C. Near infrared spectroscopy: fundamentals, practical aspects and analytical applications. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, São Paulo, v. 14, n. 2, p. 198-219, 2003.
- QU, Z.; WANG, L. Prediction of lignin content of manchurian walnut by bp neural network and near-infrared spectroscopy. **Advanced Materials Research**, v. 267, p. 991-994, 2011.
- R CORE TEAM (2021). R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria, 2021. Disponível em: <<https://www.R-project.org/>>.
- ROSA, G. M.; LUZ, J. A. M. Simulação de moagem mista por rede neural artificial. **Revista**

Escola de Minas, v. 65, n. 2, p. 247-255, 2012.

RUMELHART, D. E.; HINTON, G. E.; WILLIAMS, R. J. Learning internal representations by error propagation. In: *Parallel distributed processing*. 1. ed. Cambridge, Massachusetts, USA: The MIT Press, 1986. p. 567.

SANDAK, J.; SANDAK, A.; MEDER, R. Tutorial: Assessing trees, wood and derived products with near infrared spectroscopy. **Journal of Near Infrared Spectroscopy**. v. 24, p. 485–505, 2016.

SCHIMLECK, L. R. et al. Microfibril angle prediction of *Pinus taeda* wood samples based on tangential face NIR spectra. **IAWA Journal**, Raleigh, v. 28, n. 1, p. 1–12, 2007.

SCHIMLECK, L. R. et al. Non-destructive estimation of Pernambuco (*Caesalpinia echinata*) clear wood properties using near infrared spectroscopy. **Journal Near Infrared Spectroscopy**, Sussex, v. 19, n. 5, p. 411–419, Nov. 2011.

SCHIMLECK, L. R.; EVANS, R. Estimation of *Pinus radiata* D. Don tracheid morphological characteristics by near infrared spectroscopy. **Holzforschung**, Berlin, v. 58, n. 1, p. 66-73, Feb. 2004.

SEFARA, N. L.; CONRADIE, D.; TURNER, P. Progress in the use of near-infrared absorption spectroscopy as a tool for the rapid determination of pulp yield in plantation eucalyptus. **Tappsa Journal**, v.53, n. 11, p. 15-17, 2000.

SHENK, J. S.; WESTERHAUS, M. O. Near infrared reflectance analysis with single and multiproduct calibration. **Crop Science**, Madison, v. 33, n. 3, p. 582-584, Feb. 1993.

SILVA, M. L. M. Ajuste do modelo de Schumacher e Hall e aplicação de redes neurais artificiais para estimar volume de árvores de eucalipto. **Revista Árvore**, Viçosa, v. 33, n. 6, p. 1133-1139, 2009.

SILVA, I. N.; SPATTI, H. D.; FLAUZINO, R. A. *Redes Neurais Artificiais: para engenharia e ciências aplicadas*. 2. ed. São Paulo: Artliber, 2010.

SILVA, A. R. et al. Assessment of total phenols and extractives of mahogany wood by near infrared spectroscopy (NIRS). **Holzforschung**, Berlin, v. 67, n. 1, p. 1–8, Jan. 2013.

SILVA, S. R. e SCHIMIDT, F. Redução de variáveis de entrada de redes neurais artificiais a partir de dados de análise de componentes principais na modelagem de oxigênio dissolvido. **Química Nova**, São Paulo, v. 39, n. 3, 273-278, 2016.

SOUZA, A. M.; BREITKREITZ, M. C.; FILGUEIRAS, P. R.; ROHWEDDER, J. J. R.; POPPI, R. J. Experimento didático de quimiometria para calibração multivariada na determinação de paracetamol em comprimidos comerciais utilizando espectroscopia no Infravermelho próximo: um tutorial, parte II. **Química Nova**, v. 36, n. 7, p. 1057-1065, 2013.

SUN, B. L. et al. Application of NIR spectroscopy to estimate of MFA and fiber length of *Neosinocalamus affinis*. **Spectroscopy and Spectral Analysis**, Beijing, v. 31, n. 12, p. 3251–3255, June 2011.

TIRYAKI, S.; ÖZŞAHİN, Ş.; AYDIN, A. Employing artificial neural network for minimizing surface roughness and power consumption in abrasive machining of wood. **European Journal of Wood and Wood Products**, v. 75, n. 3, p. 347–358, 2017.

TIRYAKI, S. et al. Predictive models for modulus of rupture and modulus of elasticity of particleboard manufactured in different pressing conditions, **High Temperature Materials and Processes**, v. 36, n. 6, p. 623–634, 2017.

TSUCHIKAWA, S.; KOBORI, H. A review of recent application of near infrared spectroscopy to wood science and technology. **Journal Wood Science**, Madison, v. 61, n. 3, p. 213-220, June 2015.

UDDIN, M. N.; RAY, S. K.; ISLAM, M. S.; NAYEEM, J.; JAHAN, M. S. Development of method for rapid prediction of chemical components of dhaincha using ft-nir spectroscopy and chemometrics. **Journal of Science & Technology for Forest Products and Processes**, v. 6, n. 4, p. 22-28, 2017.

WATANABE, K.; MANSFIELD, S. D.; AVRAMIDIS. Application of near-infrared spectroscopy for moisture-based sorting of green, hem-fi timber. **Journal Wood Science**, v. 77, n. 1, p. 288-294, 2011.

WATANABE, K. et al. Application of Near-Infrared Spectroscopy for Evaluation of Drying Stress on Lumber Surface: A Comparison of Artificial Neural Networks and Partial Least Squares Regression. **Drying Technology**, v. 32, n. 1, p. 590–596, 2014.

WIDROW, B.; HOFF, M.E. (1960). Adaptive switching circuits. Institute of Radio Engineers, Western Electronic Show and Convention, pp. 96-104.

WILLIAMS, P. C.; NORRIS, K. Near-Infrared Technology in the Agricultural and Food Industries. Second Edition, St. Paul, Minnesota, USA: American Association of Cereal Chemists, Inc. 2001.

WOLD, S. Cross-validation estimation of the number of components in factor and principal components models. **Technometrics**, Canada, v. 20, n. 2, p. 397–405, 1978.

WOLD, S.; SJÖSTRÖM, M., Chemometrics, present and future success, **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, v. 44, p. 3-14, 1998.

XU, Q. et al. Predictions of wood density and modulus of elasticity of balsam fir (*Abies balsamea*) and black spruce (*Picea mariana*) from near infrared spectral analyses. **Canadian Journal Forest Research**, Ottawa, v. 41, n. 2, p. 352–358, Jan. 2011.

XU, D. et al. Symmetric predictive estimator for biologically plausible neural learning. **IEEE transactions on neural networks and learning systems**, Kingston, v. 29, n. 9, p. 4140-4151, 2018.

ZANUNCIO, A. J. V.; CARVALHO, A. G.; SILVA, L. F. Prediction of the physical, mechanical and colorimetric properties of Eucalyptus grandis heat-treated wood using artificial neural networks. **Scientia Forestalis**, Piracicaba, v. 45, n. 113, p. 109-118, 2017.

ZANUNCIO, A. J. V. et al. Artificial Neural Networks As a New Tool for Assessing and Monitoring Wood Moisture Content. **Revista Árvore**, v. 40, n. 3, p. 543– 549, 2016.

ZHAO, S.J.; ZHANG, J.; XU, Y.M. & XIONG, Z.H. Non-linear projections to latent structures method and its applications. **Industrial & Engineering Chemistry**, v. 45, n. 11, p. 3843-3852, 2006.