



JHENNYFER NAYARA NOGUEIRA GOMES

**TRANSFERÊNCIA DE CALIBRAÇÃO PARA
IDENTIFICAÇÃO DE MADEIRAS TROPICAIS POR
ESPECTROSCOPIA NIR INDEPENDENTE DA UMIDADE**

**LAVRAS - MG
2024**

JHENNYFER NAYARA NOGUEIRA GOMES

**TRANSFERÊNCIA DE CALIBRAÇÃO PARA IDENTIFICAÇÃO DE MADEIRAS
TROPICAIS POR ESPECTROSCOPIA NIR INDEPENDENTE DA UMIDADE**

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

Prof. Dr. Paulo Ricardo Gherardi Hein
Orientador

Profa. Dra. Lívia Cássia Viana
Coorientadora

**LAVRAS - MG
2024**

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

Gomes, Jhennyfer Nayara Nogueira.

Transferência de Calibração para Identificação de Madeiras
Tropicais por Espectroscopia NIR Independente da Umidade /
Jhennyfer Nayara Nogueira Gomes. - 2024.

81 p. : il.

Orientador(a): Paulo Ricardo Gherardi Hein.

Coorientador(a): Livia Cássia Viana.

Dissertação (mestrado acadêmico) - Universidade Federal de
Lavras, 2024.

Bibliografia.

1. Espectroscopia NIR. 2. Modelos Multivariados. 3. Espécies
amazônicas. I. Hein, Paulo Ricardo Gherardi. II. Viana, Livia
Cássia. III. Título.

JHENNYFER NAYARA NOGUEIRA GOMES

**TRANSFERÊNCIA DE CALIBRAÇÃO PARA IDENTIFICAÇÃO DE MADEIRAS
TROPICAIS POR ESPECTROSCOPIA NIR INDEPENDENTE DA UMIDADE**

**CALIBRATION TRANSFER FOR IDENTIFICATION OF TROPICAL WOOD BY
NIR SPECTROSCOPY INDEPENDENT OF MOISTURE CONTENT**

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

APROVAÇÃO em 21 de junho de 2024.
Dr. Paulo Ricardo Gherardi Hein (UFLA)
Dra. Anna Carolina de Almeida Andrade (UFS)
Dra. Lívia Cássia Viana (UFT)
Dr. Thiago de Paula Protasio (UFLA)

Prof. Dr. Paulo Ricardo Gherardi Hein
Orientador

Profa. Dra. Lívia Cássia Viana
Coorientadora

**LAVRAS - MG
2024**

A Deus, pois até aqui me ajudou o Senhor. E a minha família por acreditar em mim.

Dedico

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, pois sem Ele nada disso seria possível. À minha família e aos meus amigos, por todo o apoio e incentivo para que eu trilhasse esse caminho.

Aos meus colegas, por compartilharem seus conhecimentos e por todo o suporte e contribuição para o desenvolvimento deste trabalho. Em especial ao grupo de pesquisa em Espectroscopia NIR e Madeira e ao Núcleo de Estudos em Madeira (NEMAD).

Ao meu orientador, Dr. Paulo Hein, por dividir seus conhecimentos, pela confiança e paciência ao longo do desenvolvimento dessa pesquisa.

A minha coorientadora, Dra. Livia Viana, pela amizade, pelo encorajamento, apoio e parceria no desenvolvimento deste trabalho.

A Universidade Federal de Lavras, ao programa de Pós-graduação em Ciência e Tecnologia da Madeira e a CAPES, pela oportunidade de desenvolver esta pesquisa.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) (Código de Financiamento 001) e à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG) (Processo: APQ-00742-23), pelo apoio financeiro.

Muito obrigada!

“E graças a Deus, que sempre nos faz triunfar em Cristo, e por meio de nós manifesta em todo o lugar a fragrância do seu conhecimento.” 2 Coríntios 2:14

RESUMO

As limitações científico-tecnológicas para identificação de forma rápida e confiável da madeira de espécies florestais a partir de suas características dificultam o monitoramento da cadeia de custódia de madeira certificada. A existência de soluções para discriminação entre espécies é de fundamental importância para o controle e monitoramento da exploração e transporte de madeira nativa. A espectroscopia no infravermelho próximo (NIR) tem se mostrado promissora para essa finalidade devido a sua capacidade de gerar informações em tempo real a partir da leitura em amostras de madeira associada a técnicas de aprendizado de máquinas. Ainda existem lacunas sobre aplicação dessa técnica em madeira considerando a variação de umidade, sendo necessário entender sua influência no desempenho de modelos para classificação desses materiais. Diante disso, este trabalho objetivou avaliar o efeito da umidade da madeira na capacidade preditiva dos modelos para discriminação de espécies com base na assinatura espectral no NIR e aplicar transferência de calibração. Onze espécies nativas provenientes da floresta amazônica foram utilizadas para produzir 110 corpos de prova de madeira, com dimensões 100 x 25 x 4 mm (C x L x E). Os espectros no NIR foram coletados na face radial da madeira na umidade de equilíbrio (UE%), utilizando espectrômetro FT-NIR de bancada (Bruker, modelo MPA) com esfera integradora e espectrômetro MicroNir portátil (Viavi, modelo Onsite-W). Após a saturação dos corpos de prova, os espectros foram coletados na condição de máximo teor de água (MTU) e, posteriormente, a cada 10% da perda de massa da água (estimada) durante a secagem. A análise de componentes principais, análise discriminante por mínimos quadrados parciais (PLS-DA) e transferência de calibração pelo método *updating*, foram aplicadas aos dados espectrais por meio do software Chemoface® para discriminar e agrupar as espécies madeireiras conforme as assinaturas espectrais e testar a performance dos modelos. A primeira componente principal dos dados espectrais obtidos captou 99,87% da variação, sendo capaz de discriminar as espécies em função do gradiente de densidade das amostras de madeira. Os modelos PLS-DA, tanto para o equipamento de bancada quanto para o portátil, apresentaram taxas de eficiência de predição superiores a 80%. Os modelos de transferência de calibração entre equipamentos, apresentaram valores de predição entre 31 e 85% de acertos na predição. Frente aos resultados obtidos, conclui-se que as informações espectrais fornecidas pelos dois espectrômetros possibilitaram a geração de modelos robustos para a identificação das onze espécies de madeira nativa, independentemente de sua umidade. Além disso, a transferência de calibração entre os equipamentos apresentou resultados satisfatórios.

Palavras-chave: NIR. Madeiras nativas. Estatística multivariada. Aprendizado de máquinas. Inteligência artificial.

ABSTRACT

The scientific and technological limitations for the rapid and reliable identification of wood from forest species based on their characteristics hinder the monitoring of the chain of custody of certified wood. The existence of solutions for species discrimination is of fundamental importance for the control and monitoring of the exploitation and transportation of native timber. Near-infrared spectroscopy (NIR) has shown promise for this purpose due to its ability to generate real-time information through reading wood samples combined with machine learning techniques. There are still gaps in the application of this technique to wood considering moisture variation, and it is necessary to understand its influence on the performance of models for the classification of these materials. Therefore, the objective is to evaluate the effect of wood moisture on the predictive capacity of the models for species discrimination based on the spectral signature in the NIR and apply calibration transfer. Eleven native species from the Amazon rainforest were used to produce 110 wood specimens with dimensions of 100 x 25 x 4 mm (length x width x thickness). NIR spectra were collected on the radial face of the wood at equilibrium moisture content (EMC%) using a benchtop FT-NIR spectrometer (Bruker, model MPA) with an integrating sphere and a portable MicroNir spectrometer (Viavi, model Onsite-W). After the saturation of the specimens, spectra were collected at maximum water content (MWC) and subsequently at every 10% of estimated water mass loss during drying. Principal component analysis, partial least squares discriminant analysis (PLS-DA), and calibration transfer will be applied to the spectral data using Chemoface® software to discriminate and group the wood species based on their spectral signatures and test the performance of the models. Preliminarily, the first principal component of the obtained spectral data captured 99.87% of the variation, being able to discriminate the species depending on the density gradient of the wood samples. The PLS-DA models, both for benchtop and portable equipment, showed prediction efficiency rates above 80%. The calibration transfer models between equipment presented prediction values between 31 and 85% of correct predictions. In view of the results, it is concluded that the spectral information provided by the two spectrometers enabled the generation of robust models for identifying the eleven native wood species, regardless of their moisture content. Furthermore, the calibration transfer between the spectrometers was successfully carried out and yielded satisfactory results.

Keywords: NIR. Native woods. Multivariate statistics. Machine learning. Artificial intelligence.

INDICADORES DE IMPACTO

A adoção de tecnologias inovadoras para controle florestal pode fomentar a economia verde, incentivando práticas mais sustentáveis no setor madeireiro. O uso da espectroscopia NIR combinada com aprendizado de máquina oferece uma solução tecnológica promissora para a rápida identificação de espécies florestais, aprimorando o monitoramento da exploração madeireira e o controle da cadeia de custódia. A contribuição para o monitoramento de espécies madeireiras da Amazônia pode apoiar a preservação da biodiversidade, reforçando a importância cultural e ecológica dessas espécies para as comunidades locais e o mundo. Além disso, a identificação precisa e rápida de espécies de madeira auxilia na prevenção do comércio ilegal, protegendo espécies ameaçadas e contribuindo para a sustentabilidade das florestas. A aplicação prática dessa tecnologia auxilia na transparência e a confiabilidade da certificação de madeira, beneficiando tanto o consumidor quanto o meio ambiente. O uso de espectrômetros portáteis para identificação de madeira pode reduzir o custo e o tempo de análises laboratoriais, acelerando processos de fiscalização e certificação florestal. A criação de modelos quimiométricos que mantêm eficiência superior a 80%, mesmo com variação de umidade, contribui significativamente para a melhoria de tecnologias aplicadas à análise de materiais naturais. Ao explorar a influência da umidade na predição das espécies, a pesquisa preenche lacunas na aplicação dessa técnica em madeira, potencialmente inspirando novos estudos na área. Por fim, o estudo traz avanços no uso de diferentes tipos de espectrômetros, facilitando a aplicação da técnica em campo com equipamentos portáteis.

IMPACT INDICATORS

The adoption of innovative technologies for forest control can foster the green economy, encouraging more sustainable practices in the timber sector. The use of NIR spectroscopy combined with machine learning offers a promising technological solution for the rapid identification of forest species, improving the monitoring of timber exploitation and the control of the custody chain. The contribution to the monitoring of timber species from the Amazon can support biodiversity conservation, reinforcing the cultural and ecological importance of these species for local communities and the world. Moreover, the precise and rapid identification of timber species helps prevent illegal trade, protecting endangered species and contributing to forest sustainability. The practical application of this technology promotes transparency and reliability in timber certification, benefiting both consumers and the environment. The use of portable spectrometers for timber identification can reduce the cost and time of laboratory analyses, speeding up forest inspection and certification processes. The creation of chemometric models that maintain over 80% efficiency, even with moisture variation, significantly contributes to improving technologies applied to natural material analysis. By exploring the influence of moisture on species prediction, this research fills gaps in the application of this technique to wood, potentially inspiring new studies in the field. Finally, the study advances the use of different types of spectrometers, facilitating the application of the technique in the field with portable equipment.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Exportações de madeira serrada de 2013 a 2021.	19
Figura 2 - Desmatamento na região amazônica em 2004-2020 (1 mil km ²).	20
Figura 3 - Arrecadação em R\$ nas UMF das áreas de concessão florestal.	21
Figura 4 – Tipos de água e pontos de umidade na madeira.	24
Figura 5 – Ciclos de sorção subsequentes da madeira.	26
Figura 6 – Diagrama esquemático do sistema NIRS.	31
Figura 7 – Fluxograma metodológico.	39
Figura 8 – Espécies amazônicas.	41
Figura 9 – Esquema do preparo das amostras.	42
Figura 11 – Espectrômetros: Bruker (A) e MicroNIR (B).	44
Figura 12 – Esquema representativo da preparação dos lotes de calibração e validação.	45
Figura 13 – Esquema de padronização e transferência de calibração.	46
Figura 14 – Valores médios de perda de umidade durante a secagem.	50
Figura 15 – Espectros de absorvância obtidos nos espectrômetros MPA FT-NIR e MicroNIR.	52
Figura 17 – Espectros de absorvância por espécie obtidos nos equipamentos MPA FT-NIR e MicroNIR.	54
Figura 18 – PCA dos dados obtidos nos espectrômetros MPA FT-NIR (A) e MicroNIR (B).	55

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Exportações brasileiras de produtos florestais madeireiros em 2021.....	19
Tabela 2 – Espécies amazônicas utilizadas.	40
Tabela 3 - Características básicas dos espectrômetros testados.	43
Tabela 4 – Delineamento experimental	47
Tabela 5 – Densidade básica em kg m ⁻³ das espécies amazônicas estudadas.....	48
Tabela 7 - Modelos PLS-DA por Equipamento em Diferentes Etapas de Umidade da Madeira das Onze Espécies Amazônicas.....	56
Tabela 8 – Modelos PLS-DA Globais por equipamento.....	57
Tabela 9 – Matriz de confusão: Calibração e Validação do Modelos globais PLS-DA MPA FT-NIR global (SNV).....	59
Tabela 10 – Matriz de confusão: Calibração e Validação do Modelos globais PLS-DA MicroNIR global (SNV+ 2D 15.2.2).....	60
Tabela 11 – Indicadores de desempenho dos modelos globais (%)	61
Tabela 12 – Modelos PLS-DA Updating Padrão Nc1.....	62
Tabela 13 – Indicadores de desempenho dos modelos de transferência na validação (%)	63
Tabela 14 - Matriz de confusão: Calibração e Validação do Modelos de transferência PLS-DA.....	63

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	15
2 OBJETIVOS	17
2.1 Objetivo geral	17
2.2 Objetivos específicos.....	17
3 REFERENCIAL TEÓRICO	18
3.1 Importância e comercialização de madeira nativa.....	18
3.2 Propriedades da madeira.....	22
3.2.1 Densidade	23
3.2.2 Umidade.....	24
3.3 Identificação de madeiras	28
3.4 Uso da tecnologia NIR para identificação de madeiras.....	29
3.5 Espectroscopia NIR e análises multivariadas	30
3.5.2 Quimiometria.....	32
3.5.3 Análises estatísticas multivariadas	32
3.5.4 Métodos qualitativos de análise multivariada	33
3.5.5 Pré-tratamentos.....	36
3.5.6 Desenvolvimento do modelo	36
3.5.7 Métricas de desempenho de modelos discriminantes.....	37
3.6 Transferência de calibração	38
3.6.1 Updating	39
4 MATERIAL E MÉTODOS	39
4.1 Amostras de madeira	40
4.1.2 Preparação dos corpos de prova	41
4.2 Caracterização do material	42
4.2.1 Densidade básica	42
4.2.2 Umidade da madeira.....	42
4.3 Aquisição espectral.....	43
4.4 Preparação de dados, calibração e teste.....	44
4.4.1 Transferência de calibração	45
4.4.2 Construção dos modelos PLS-DA.....	46
4.4.3 Desempenhos de previsão	48
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	48
5.1 Caracterização das espécies.....	48
5.1.1 Densidade da madeira.....	48
5.1.2 Umidade da madeira.....	49
5.2 Assinaturas espectrais.....	51
5.3 Análises de componentes principais (PCA)	55

5.4 Análise discriminante por mínimos quadrados parciais (PLS-DA)	56
5.5 Transferência de calibração	62
6 CONCLUSÕES.....	65
REFERÊNCIAS.....	67

1 INTRODUÇÃO

A região amazônica é uma das principais produtoras de produtos madeireiros e não madeireiros provenientes de floresta nativa. A alta diversidade de espécies disponíveis chama a atenção do mercado externo, pela qualidade encontrada nessas madeiras para aplicação na construção civil e diversos outros setores que utilizam a madeira como matéria-prima. A alta demanda, associada à elevada similaridade entre o lenho de espécies comercializadas, contribui para a ocorrência de fraudes e exploração ilegal de madeiras nativas (ROCHA et al., 2019).

Uma forma de monitorar as atividades florestais no território nacional é pela fiscalização realizada pelos órgãos federais e estaduais, que seguem as diretrizes do código florestal brasileiro (citar a lei). Entretanto, devido às limitações científico-tecnológicas dos órgãos de fiscalização, a identificação das espécies por meio de análises rápidas e eficientes ainda é um dos grandes desafios do setor (SOARES et al., 2017). Dessa forma, é necessária a utilização de metodologias de identificação e caracterização dos produtos e subprodutos florestais que permitam em menor tempo, menor custo e com elevada precisão, realizar a discriminação das espécies de madeira. O estudo dessas madeiras e das novas tecnologias é de fundamental importância para encontrar formas viáveis de melhor aproveitamento desta matéria-prima e manejo adequado do ecossistema (WANG et al., 2022). Resultando em melhor qualidade no produto, redução de custos operacionais, desassociação do seu uso ao desmatamento ilegal e avançar no manejo sustentável (PASTORE et al., 2011; DIAS JÚNIOR et al., 2014).

A espectroscopia do infravermelho próximo (NIRS) é uma metodologia de análise não destrutiva associada as informações químicas dos materiais, que permite obter informações quantitativas e qualitativas do objeto de análise. A partir de técnicas de análises multivariada, possibilita a aquisição direta de medidas de absorbância que apresentam informações de diversos grupos funcionais presentes nas moléculas constituintes da madeira, celulose, hemiceluloses, lignina e extrativos, permitindo correlacioná-las com as propriedades físicas e anatômicas da madeira, gerando uma “impressão digital” de cada espécie florestal produtora de madeira (SOARES et al., 2017).

Os métodos de análises qualitativas possibilitam desenvolver modelos discriminantes para identificação de espécies, o que é essencial para a construção de um banco de dados robusto para caracterização ou discriminação de espécies nativas e melhorar o controle da exploração e transporte de recursos florestais (SOARES et al., 2017; AYANLEYE et al., 2020). A técnica NIRS vem se tornando muito promissora para aplicações florestais, sendo considerada uma ferramenta de auxílio na tomada de decisões das indústrias em processos produtivos, devido à

possibilidade de análises de várias propriedades simultaneamente (SIESLER et al., 2002; TSUCHIKAWA e KOBORI, 2015). Na literatura, há vários estudos sobre as aplicações da espectroscopia NIR para predição e classificação das propriedades da madeira de espécies florestais. Davrieux et al. (2010) para discriminar carvão de diferentes espécies de árvores; determinar a qualidade do carvão vegetal e classificar resíduos florestais (ACQUAH et al., 2016; KLEINDIENST et al., 2017; COSTA et al., 2018b) e prever a densidade básica (COSTA et al., 2018a; LI et al., 2019; ARRIEL et al., 2019). Bergo et al. (2016) desenvolveram modelos para discriminar três espécies brasileiras. Já Li et al. (2019) utilizaram a ferramenta para identificar diferentes espécimes de madeira e prever a densidade e, finalmente, Sharma et al. (2020) para identificação de madeira. Estes são alguns exemplos de uso da espectroscopia como método não destrutivo para determinação das propriedades da madeira.

A maioria dos estudos encontrados na literatura relacionada à transferência de calibração NIR é voltada para instrumentos de laboratório (MCVEY et al., 2021; NOURI et al., 2017), mas há poucos estudos que descrevendo o desempenho da transferência para instrumentos portáteis e aplicação em análises discriminantes para identificação de espécies nativas. Diante disto, o presente trabalho visa obter modelos multivariados robustos para discriminar espécies amazônicas independente das condições de umidade, com base nos espectros do infravermelho próximo de dois espectrômetros.

2 OBJETIVOS

2.1 Objetivo geral

Desenvolver modelos PLS-DA capazes de discriminar espécies, com base na assinatura espectral no espectro NIR, independentemente da condição de umidade da madeira, e facilitar a transferência desses modelos entre diferentes espectrômetros.

2.2 Objetivos específicos

- Avaliar o efeito da umidade da madeira na capacidade preditiva dos modelos.
- Avaliar a capacidade preditiva do espectrômetro portátil.
- Realizar transferência de calibração entre espectrômetros.

3 REFERENCIAL TEÓRICO

3.1 Importância e comercialização de madeira nativa

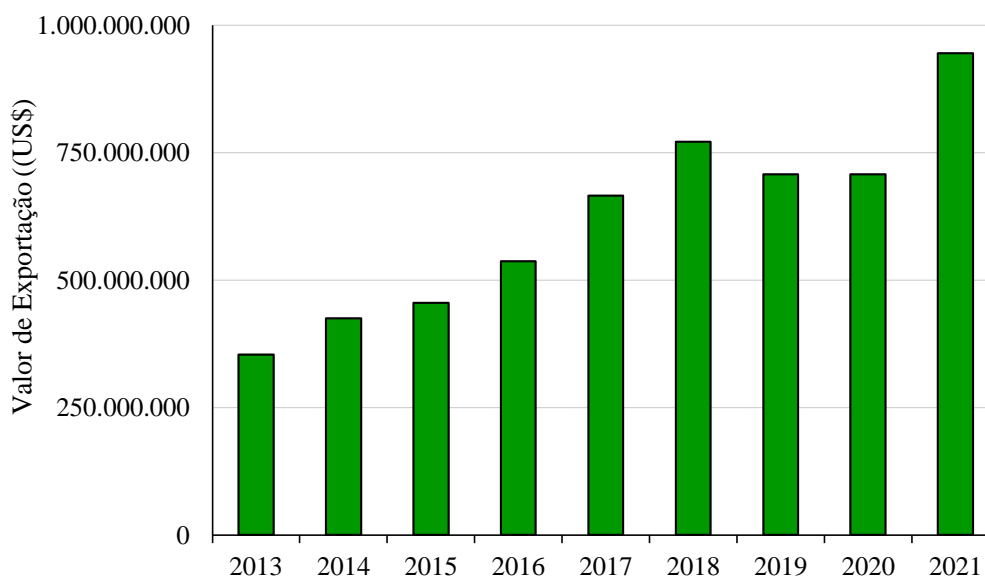
Desde os primórdios o ser humano faz uso da madeira devido sua versatilidade, resistência e abundância que permitiram sua aplicação para diversas finalidades, como na construção de abrigos, confeccionar ferramentas, cozinhar, aquecer, cada civilização a utilizou de acordo com suas necessidades e isto teve um impacto no desenvolvimento da humanidade (LEÃO, 2000; MALLO e ESPINOZA, 2015). Atualmente, por meio da exportação de seus produtos e subprodutos, a indústria madeireira desempenha um papel importante na economia nacional, exercendo um impacto socioeconômico significativo ao contribuir de forma expressiva para a geração de renda, impostos e divisas (ROCHA et al., 2019).

A madeira é um material orgânico, biodegradável, de fonte renovável obtido de espécies florestais, sendo caracterizado como anisotrópico, higroscópico e heterogêneo; por apresentar comportamento diferenciado em função dos eixos da madeira, possuir afinidade com a água podendo absorver ou perder água para o ambiente e possuir estrutura complexa formada por alburno e cerne, lenho inicial e tardio e estruturas celulares distintas quanto ao tipo, arranjo, quantidade e características (PANSHIN e ZEEUW, 1980).

Os principais componentes da madeira são os polímeros orgânicos de celulose, hemicelulose e lignina. Quimicamente, 50% da sua composição corresponde a átomos de carbono, o restante distribui-se entre as moléculas de oxigênio, hidrogênio, cálcio, potássio e magnésio (PETTERSEN, 1984). Apresenta variações morfológicas devido as diferentes estruturas anatômicas presentes e a distribuição dos componentes químicos entre as espécies, entre árvores de uma mesma espécie e dentro de uma mesma árvore (PANSHIN e ZEEUW, 1980). Há contínuas pesquisas a cerca deste material visando ao uso sustentável e eficiente deste recurso e melhor aproveitamento.

A madeira serrada é obtida pelo do processamento primário da madeira, no qual as toras são desdobradas utilizando serras. A peças obtidas são separadas conforme suas dimensões, formatos e utilizações, podendo ser classificadas como: bloco, pranchões, pranchas, vigas, vigotas, tábuas, sarrafos, ripas e caibros. Sua utilização depende das propriedades físicas e mecânicas inerentes as espécies utilizadas para sua produção (ABNT, 1997). A indústria moveleira e a construção civil estão entre os principais consumidores deste tipo de material, seguida pelas indústrias de embalagem e os setores de artefatos, decoração, artesanato e confecções de pallets (PEREZ e BACHA, 2006). A Figura 1 apresenta o quanto foi exportado de madeira serrada ao longo dos últimos 10 anos.

Figura 1 – Exportações de madeira serrada de 2013 a 2021.



Fonte: SNIF (BRASI, 2022b). Elaboração da autora.

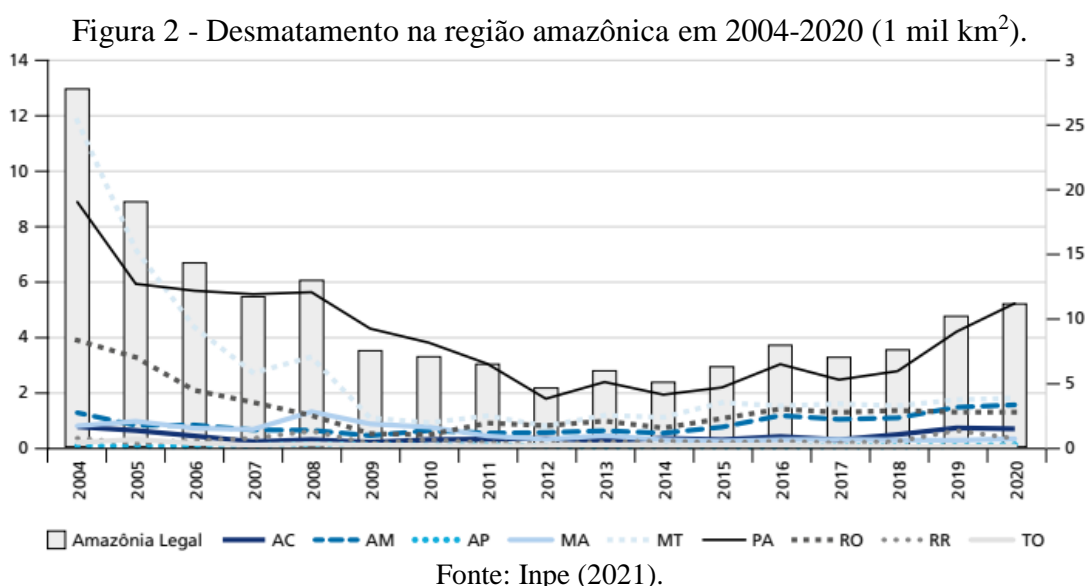
Observa-se na Figura 1 uma evolução crescente na demanda por madeira serrada no mercado externo entre os anos de 2013 e 2021. MacQueen et al. (2004) afirmam que há uma correlação entre o crescimento do comércio internacional de produtos madeireiros e a taxa de crescimento da exportação brasileira. O aumento da demanda por madeira tem impulsionado o mercado de madeiras nobres. Em 2021, foram exportados mais de 944 milhões de dólares em madeira serrada (Tabela 1). Entre agosto de 2021 e julho de 2022, as exportações de produtos florestais brasileiros totalizaram US\$ 15,90 bilhões, um crescimento de 27% em relação aos valores registrados entre o mesmo período dos anos anteriores, sendo US\$ 5,86 bilhões referentes as exportações de madeira e suas obras em valor. Os principais importadores de madeira brasileira em 2022 foram os Estados Unidos (US\$ 2.192.259.426), México (US\$ 269.985.072), China (US\$ 229.748.590), Portugal (US\$ 135.978.590) e França (US\$ 116.669.965) (BRASIL, 2023a).

Tabela 1 - Exportações brasileiras de produtos florestais madeireiros em 2021.

Produtos	Quantidade em m³	Valor em US\$
Madeira em tora	2.764.609	222.106.528
Madeira laminada	196.608	42.402.264
Madeira perfilada	597.533	713.186.928
Madeira serrada	3.880.865	944.869.534

Fonte: SNIF (BRASIL, 2022b).

A exploração de madeiras nativas de folhosas iniciou-se na década de 70, com o deslocamento da indústria madeireira para a região norte do país, que até então concentrava-se na região sul com a exploração da espécie *Araucaria angustifolia* (PEREZ e BACHA, 2006). Segundo o IBAMA, todos os anos são exportados aproximadamente 35.000 produtos provenientes de madeira nativa, originários dos Estados do Pará, Amazonas, Santa Catarina e Paraná. Geralmente este mercado está associado a práticas de exploração fora da legalidade (ASNER et al., 2009). A Figura 2 apresenta a série histórica da taxa de desmatamento de 2004 a 2020 na Amazônia Legal (INPE, 2021).

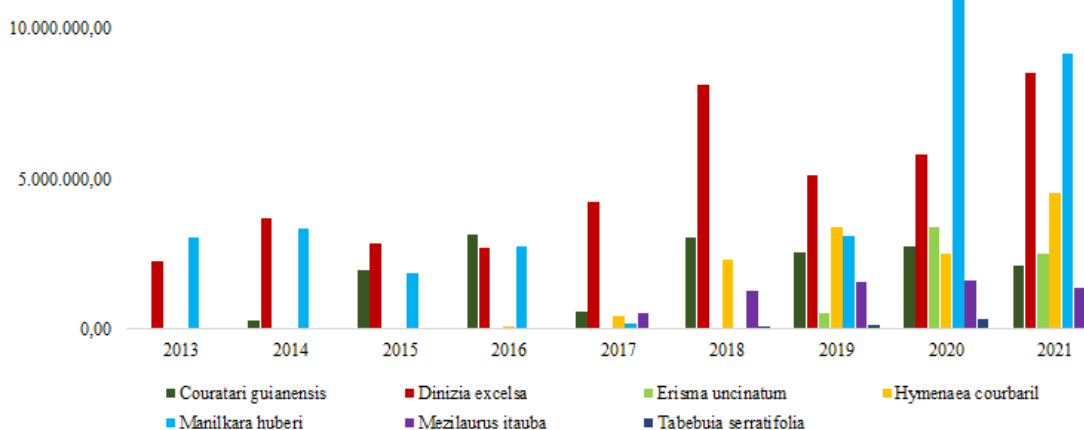


Observa-se que, de 2004 a 2014, as taxas de desmatamento apresentaram uma queda. No entanto, a partir de 2015, elas voltaram a crescer, com um aumento significativo entre 2019 e 2020, chegando a quase 1 milhão de quilômetros quadrados de área desmatada, com destaque para o Estado do Pará. Isso pode ser resultado das práticas de exploração de exploração madeireira em áreas e espécies protegidas, além de atividades extrativistas fora dos limites das unidades de concessão florestal (THOMPSON e MAGRATH, 2021). Bösch (2021) afirma que a extração madeireira embora sustentável pode ser tecnicamente ilegal quando relacionada à perda de biodiversidade e de outros serviços fornecidos ao ecossistema, como a conservação dos solos e da água e a estocagem de carbono. Pode ocasionar, também, conflitos armados pela disputa de terras e recursos, além de afetar as comunidades indígenas e locais que residem na região (GUAN et al., 2018).

Conforme o relatório de Avaliação Global dos Recursos Florestais 2020 (em inglês, *Global Forest Resources Assessments - FRA*) divulgado pela Organização das Nações Unidas

para Alimentação e Agricultura- FAO, a taxa de perda de floresta vem reduzindo desde 1990, resultado da redução de desmatamento em alguns países e da expansão da floresta em outros. Segundo Martins e Nonnenberg (2022) mais de 80% da extração madeireira na Amazônia pode estar em inconformidade com os órgãos de fiscalização brasileiros. Apesar disso, as áreas de floresta com planos de manejo de longo prazo aumentaram em 13% nos últimos 20 anos correspondendo a mais da metade da área de floresta mundial, indicando seu uso sustentável (FAO, 2020). A Figura 3 apresenta as espécies nativas mais manejadas nas áreas de concessão florestal monitoradas pelo Serviço Florestal Brasileiro (SFB) na última década.

Figura 3 - Arrecadação em R\$ nas UMF das áreas de concessão florestal.



Fonte: Boletim SNIF 2022 (BRASIL, 2023b). Elaboração da autora.

Segundo o Boletim do Sistema Nacional de Informações Florestais (SNIF), do ano de 2022, foram repassados pelas concessionárias ao poder público R\$ 121.950.260,82 ao longo dos últimos 10 anos com o manejo florestal sustentável nas áreas de concessão das florestas públicas nacionais localizadas nos municípios de Altamira - PA, Caxiuanã - PA, Acará-Taquera - PA, Jacundá - RO e Jamari - RO. No ano de 2021, cerca de R\$ 28.434.539,32 foram arrecadados com o extrativismo madeireiro das espécies *Tabebuia serratifolia* (Vahl.) Nichols. (ipê amarelo), *Hymenaea courbaril* L. (jatobá), *Erisma uncinatum* Warm. (cambará), *Manilkara huberi* (Ducke) A.Chev. (maçaranduba), *Mezilaurus itauba* (Meisn.) Taub. ex Mez (itaúba), *Dinizia excelsa* Ducke (angelim vermelho), *Couratari guianensis* Aubl. (tauari), com destaque para o angelim vermelho e a maçaranduba.

Em relação ao volume de madeira extraída por metro cúbico, o jatobá e o angelim vermelho destacaram-se com valores equivalentes a 90.025,08 m³ e 81.670,40 m³ no ano de

2021; totalizando 336.717,65 m³ e 559.183,37 m³ explorados, respectivamente, ao longo da última década.

A Lei nº 12.651, de 25 de maio de 2012 do código florestal vigente, dispõe sobre a proteção da vegetação nativa para controle da origem da madeira e determina ao Ibama a criação da plataforma Sinaflor para cadastro e emissão de autorizações para a extração florestal (BRASIL, 2012). O Ibama por meio da Instrução Normativa Nº 8, de 25 de março de 2022, estabelece os procedimentos para a exportação de produtos e subprodutos madeireiros de espécies nativas oriundos de florestas naturais ou plantadas (BRASIL, 2022a).

Como forma de controle, os órgãos de fiscalização utilizam o DOF (Documento de Origem Florestal) como recurso para identificar a origem da madeira comercializada. Este documento consiste em uma licença exigida para transporte e armazenamento de produtos e subprodutos florestais de origem nativa, como toras de madeira e madeira serrada concedida pelo Sistema Nacional do Meio Ambiente (Sisnama). Para burlar o sistema, frequentemente as serrarias e madeireiras fraudam os registros para esconder madeiras originárias do desmatamento ilegal e facilitar o contrabando de espécies nativas, visto que muitas espécies apresentam similaridades e a insuficiência de informações relacionadas aos recursos florestais, somada a impunidade sobre as infrações ambientais e, a alta demanda por madeira de menor custo, asseguram os interesses das madeireiras que atuam de forma ilegal (MARTINS e NONNENBERG, 2022).

A Polícia Federal registrou o comércio de cerca de 12,5 mil toneladas de madeira, entre fevereiro de 2020 e maio de 2021, de espécies florestais consideradas ameaçadas pelo Serviço Florestal Brasileiro (SFB), entre elas: angelim-pedra, cedro-rosa, cerejeira, itaúba e garapeira; por madeireiras vinculadas à Associação das Indústrias Exportadoras de Madeiras do Estado do Pará (Aimex) tendo como principais destinos à França, os Estados Unidos, o Japão, a Alemanha e a Bélgica (BARROS, 2021).

A Convenção sobre o Comércio Internacional de Espécies da Flora e Fauna Selvagens em Perigo de Extinção (CITES, do inglês *Convention on International Trade in Endangered Species of Wild Flora and Fauna*) restringe a importação de espécies florestais ameaçadas de extinção, mas o contrabando é muito presente neste mercado. A falta de monitoramento adequado do comércio de madeiras nativas facilita a exploração ilegal e predatória das florestas, contribui para que muitas espécies florestais entrem para a lista de plantas ameaçadas de extinção no Brasil, o que gera repercussão negativa no comércio internacional de madeira (DORMONTT et al., 2015).

3.2 Propriedades da madeira

3.2.1 Densidade

A densidade é uma das propriedades físicas mais importantes utilizada como parâmetro para classificação da madeira e se relaciona, direta ou indiretamente, com as demais propriedades, como a rigidez e a resistência deste material. Refere-se a uma relação de massas específicas, entre a massa específica do material e a massa específica da água (DOWNES et al., 1997; MORESCHI, 2005; ROCHA et al., 2019).

Este parâmetro relaciona-se diretamente com a anatomia da madeira em estudo, tendo influência do tamanho das células e com as substâncias presentes na madeira. A presença de substâncias aromáticas, como a lignina e extrativos, em grandes quantidades podem influenciar no aumento das propriedades físico-mecânicas do material, como por exemplo elevados valores de densidade (BRITO e BARRICHELO, 1977; RAVEN et al., 1992; RICHARDSON, 1993).

Madeiras que apresentam maiores valores de densidade, também chamadas de madeiras pesadas ou duras, geralmente possuem o cerne bem distinto do alburno com cores diferentes, podendo apresentar colorações amarronzadas (*Caesalpinia férrea* Mart.), arroxeadas (*Dalbergia cearenses* Ducke), avermelhadas (*Caesalpinia echinata* Lam.), dentre outras colorações; são mais resistentes e elásticas, entretanto, apresentam maior variabilidade e difícil trabalhabilidade. Já em madeiras que possuem menores valores de densidade, a diferenciação entre o cerne e o alburno é quase inexistente, pois apresentam poucas alterações químicas no seu conteúdo celular e sua coloração geralmente é mais clara (RAVEN et al., 1992).

A partir da densidade é possível conhecer o comportamento da madeira e avaliar seu índice de instabilidade para posteriores aplicações. Há três tipos de densidade da madeira: real, aparente e básica. A densidade real desconsidera os espaços vazios presentes na madeira e está relacionada com a densidade da parede celular. Já a densidade aparente, considera os espaços vazios presentes na madeira e é determinada em função da umidade, ou seja, sofre interferência do ambiente, como da umidade relativa do ar e temperatura. Quanto maior a umidade de equilíbrio da madeira, maior a quantidade de água disponível para aumentar a massa da madeira. Por isso, à medida que a madeira seca, a densidade aparente diminui.

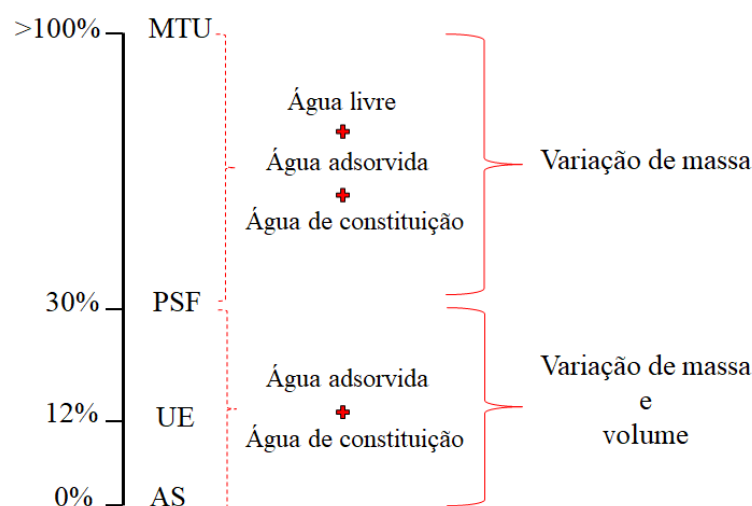
Para caracterização e classificação de madeiras utiliza-se a densidade básica, medida que não sofre variação em relação ao ambiente, visto que relaciona a massa seca, ou seja, o valor mínimo de massa da madeira em estudo e o seu volume quando está em sua máxima expansão, chamado de volume verde; mas depende da proporção da composição dos componentes da parede celular e lume da célula (MORESCHI, 2005). As espécies geralmente apresentam valores de densidade básica entre 0,13 e 1,4 g.cm⁻³, essa variação está relacionada com a vários fatores como: lenho inicial e tardio, cerne e alburno.

3.2.2 Umidade

A madeira é um material higroscópico, e ao interagir com as condições climáticas do ambiente suas propriedades sofrem alterações. Isto está relacionado com a quantidade de água presente na madeira (LOGSDON, 1998; TSUCHIKAWA e TSUTSUMI, 1998). Segundo a norma da NBR 14929 (ABNT, 2017) a umidade é uma relação entre a massa de água e massa de madeira. Esta característica influencia outras propriedades da madeira como a resistência, a secagem, a cura da cola e o seu desempenho tecnológico (LOGSDON e CALIL JUNIOR, 2002; GLASS e ZELINKA, 2010; LEBLON et al., 2013). Também está relacionada com a biodegradação e variação dimensional da madeira, além de ser um importante fator para a discriminação de madeiras similares (SIAU, 1995).

Há três tipos de água presentes na madeira: água livre ou de capilaridade, água adsorvida ou de impregnação e água de constituição. A água livre é a que preenche os espaços livres formados pelos lumes e espaços intercelulares, passando de uma célula para outra até atingir a superfície externa da madeira. Encontrada acima do ponto de saturação das fibras (PSF), realiza ligações fracas com a madeira, de forma que a coesão entre moléculas de água é forte, porém a coesão com a madeira é fraca; por isso sua retirada é mais fácil e não provoca grandes alterações na madeira. A água adsorvida é a água impregnada nos espaços submicroscópicos da parede celular, ligadas por forças polares, as moléculas de água fazem associação química a partir de ligações de hidrogênio com os carbonos 2, 3 e 6 na região amorfa da celulose. À medida que as moléculas de água se inserem entre as moléculas de celulose, a atração entre as moléculas de celulose é reduzida, provocando alterações dimensionais da madeira e, conseqüentemente, sua resistência. A água de constituição química está associada a estrutura molecular da madeira e permanece constante durante a secagem, sendo removida apenas com a degradação química ou térmica da madeira (KOLLMANN e CÔTÉ, 1968; FOREST PRODUCTS LABORATORY, 1999; MORESCHI, 2014).

Figura 4 – Tipos de água e pontos de umidade na madeira.



Fonte: Moreschi (2014). Elaboração da autora.

O Máximo Teor de Umidade (MTU) é o estágio em que tanto o lúmen como as paredes das células estão completamente saturados de água, representa a capacidade máxima da madeira de sorção de água. O alto percentual de umidade melhora a trabalhabilidade, o que é desejado em toras a serem laminadas. O ponto de saturação das fibras (PSF) é o estágio em que toda a água livre foi retirada, mas as paredes celulares permanecem saturadas devido a associação química das moléculas de água à madeira por ligações de hidrogênio dos carbonos das regiões amorfas da celulose. A partir da quantidade de água presente nas paredes celulares é determinada a umidade da madeira (LIMA et al., 1986).

Em relação as propriedades anatômicas, espécies de coníferas e folhosas que possuem cerne indistinto e porosidade difusa foram encontrados valores de PSF entre 32 e 35%. Em folhosas com porosidade em anel e cerne distinto, os valores encontrados foram de 22 a 24% de umidade. Porém, assume-se o valor padrão de 30% de umidade, valor médio do ponto em que a estabilidade na relação entre a umidade e as propriedades de resistência mecânica é atingida (LIMA et al., 1986; GLASS e ZELINKA, 2010; MORESCHI, 2012).

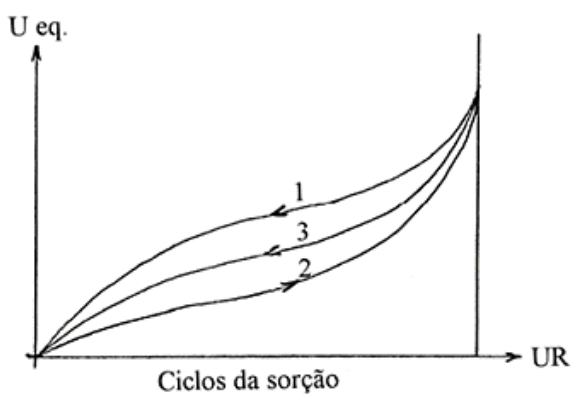
Acima do PSF, a resistência da madeira é afetada em função da umidade, quanto maior a umidade menor é a resistência. Quando as madeiras atingem valores de umidade abaixo de 20%, aumentam sua resistência a ataque de xilófagos. A maior parte das espécies atingem o equilíbrio higroscópico, também chamado de umidade de equilíbrio da madeira, em valores de umidade próximos a 12%, em função da espécie e das condições climáticas. Quando resta apenas a água de constituição na madeira, ela atinge 0% de umidade, sendo considerada absolutamente seca (AS). Geralmente a madeira apresenta comportamentos diferentes durante o processo de secagem em seus eixos devido sua anisotropia, apresentando variação

dimensional em função da variação de umidade abaixo do PSF até o AS, ocorrendo contração ou expansão radial e tangencial e perda de volume (JANKOWSKY, 1990).

Uma das propriedades físicas que afeta a umidade da madeira é a densidade. Quanto maior a densidade do material, menor a quantidade de espaços disponíveis na sua estrutura anatômica. Brown et al. (1949) afirmam que madeiras de alta densidade são mais difíceis de serem secas ou impregnadas com soluções preservativas. A afinidade da madeira por moléculas de água deve-se à composição química das moléculas de celulose, hemiceluloses e lignina. Dentre elas, as hemiceluloses são os componentes químicos que apresentam maior capacidade de sorção por possui maior número de grupos hidroxilas disponíveis para ligações com a água na sua estrutura amorfa (MORESCHI, 2014). No processo de adsorção, a interação das moléculas de água (H_2O) entre as hidroxilas livres (OH^-), ocasionam o distanciamento lateral entre as microfibrilas de celulose pela inclusão das moléculas de água entre as micelas e nas regiões amorfas, aumentando as dimensões da madeira (KOLLMANN e CÔTÉ, 1968).

Na Figura 5, a curva 1 corresponde a primeira dessorção da madeira verde, a curva 2 à adsorção após a primeira secagem e a curva 3 à dessorção após a adsorção. A variação existente entre as curvas é chamada de histerese, esse fenômeno resultante da reidratação incompleta dos sítios de sorção na celulose durante os ciclos de adsorção, onde a perda de água provoca a ligação dos elementos da parede celular, reduzindo a disponibilidade dos grupos hidroxílicos e afetando a diferença energética entre os processos de secagem e umedecimento. Ao secar a madeira, as ligações entre as microfibrilas de celulose se fortalecem e tornam-se irreversíveis, sendo mais resistentes a entrada de água. Consequentemente, a adsorção subsequente é menor. Portanto, a umidade de equilíbrio de uma madeira sempre é mais alta no processo de dessorção/secagem do que no processo de adsorção, que necessita de mais energia para diminuir as forças de atração das moléculas (MORESCHI, 2014).

Figura 5 – Ciclos de sorção subsequentes da madeira.



Fonte: MORESCHI (2014).

Madeiras recém abatidas apresentam altos valores de umidade variando entre 30% e 200% de umidade na base seca e são chamadas de “madeiras verdes”, devido a saturação da parede celular das suas células. À medida que interage com o a umidade relativa do ar e a temperatura, a água livre presente no lúmen, espaços intercelulares e na parede celular evapora e a madeira perde massa de água até atingir equilíbrio higroscópico (SILVEIRA et al., 2013). Após o processamento primário da tora em tábuas ou pranchas, a umidade continua a diminuir (GALVÃO e JANKOWSKY, 1985; MARTINS, 1988; SILVEIRA et al., 2013).

A velocidade de remoção da água depende das condições do ambiente, e as características anatômicas da madeira, também influenciam no processo (SKAAR, 1972). No início a secagem ao ar livre é rápida, ou seja, para reduzir de 60% para 40% de umidade levará menos tempo do que para reduzir de 40% para 20% de umidade, isto justifica-se pelas forças das ligações químicas entre as moléculas. A espessura da peça de madeira influencia na velocidade da perda de água na madeira, quanto mais espessa mais lento é o processo de secagem (JANKOWSKY, 1990).

Na espectroscopia, a umidade da madeira pode influenciar negativamente a diferenciação de espécies. Segundo Igne et al. (2014), a presença de água na madeira interfere na intensidade das bandas de absorção referentes às ligações O-H, causando variação no espectro. Isso significa que quanto maior a umidade do material maior a absorbância. Esta variabilidade interfere no desempenho dos modelos de discriminação e compromete a validação do modelo de treinamento restringindo sua aplicabilidade (ZHOU et al., 2020). Ao monitorar a umidade em troncos de *Abies alba* Mill. utilizando assinatura NIR adquirida em superfícies tangenciais e transversais, Hans et al. (2013) encontraram bons desempenhos dos modelos. O mesmo ocorreu com Kobori et al. (2013) ao aplicar imagens hiperespectrais na região do infravermelho próximo para monitoramento da distribuição de água na madeira de espécimes de *Fagus sylvatica* L.

Giordanengo et al. (2008), ao estudarem os efeitos da umidade na absorção e calibração de modelos no infravermelho próximo, corrigiram esses efeitos para analisar o teor de fenóis em extratos de madeira de eucalipto e verificar a aplicabilidade dessa técnica em rotina. Os autores constataram que o aumento da umidade afetou todo o espectro, causando um deslocamento na linha de base. Bertrand e Dufour (2000) afirmam que este efeito aditivo provocado pode ser explicado pela dispersão da radiação. As ondas infravermelhas próximas são desviadas de sua direção de incidência e espalhadas em todas as direções. As ondas refletem no material várias vezes e a intensidade da radiação refletida é compensada pelo fenômeno de

dispersão, o que aumenta a absorção espectral (BÜNING-PFAUE, 2003; WILLIAMS e NORRIS, 2001).

3.3 Identificação de madeiras

A identificação de espécies é muito importante para a indústria madeireira. Muitas espécies nativas apresentam madeiras valorizadas no comércio externo, logo é importante a identificação correta de cada madeira para melhor controle do mercado. A identificação está relacionada com a distribuição dos componentes principais da madeira: celulose, hemiceluloses, lignina e extrativos (TOSCANO et al., 2017). O método mais utilizado para discriminação de espécies é a anatomia da madeira. Este método compara as características morfológicas e anatômicas da madeira com as xilotecas registradas por meio de análises convencionais e destrutivas de amostras, com rotinas de ensaios padronizados e capazes de fornecer resultados confiáveis. Porém, requer um longo tempo de preparação das amostras e apresenta custos elevados que variam de acordo com a espécie em análise, gerando momentos de dúvidas tanto ao comércio como na fiscalização de pátios e serrarias (SOARES et al., 2017; SOUZA et al., 1997).

A dendrocronologia, por exemplo, estuda os anéis de crescimento, os quais apresentam informações sobre o período vegetativo da árvore. A dendrocronologia fornece informações específicas sobre a idade da árvore e sua localização geográfica. Ainda assim é necessário um processo que consiga em tempo real e com fácil manuseio, identificar as madeiras de forma prática e fácil aplicação para serem utilizadas em operações de rotina por órgãos de fiscalização. É importante considerar que as madeiras podem apresentar características diferentes para uma mesma espécie sob influência das condições climáticas, do solo, das práticas silviculturas e densidade da floresta (SILVA et al., 2018).

Na identificação, é necessário considerar a procedência da madeira, analisar os caracteres gerais e macroscópicos, levar em conta as características marcantes da espécie, verificar o nome popular de comercialização e encaminhar ao laboratório as amostras que não foram identificadas em campo (CORADIN, 2002). Muitas espécies apresentam similaridades em sua estrutura, o que pode causar confusões e dificultar a classificação. Entre elas estão a Maçaranduba (*Manilkara* spp.), o Jatobá (*Hymenaea* spp.), o Ipê (*Handroanthus* spp.), o Cumaru (*Dipteryx odorata*) e a Peroba-rosa (*Aspidosperma* spp.) (LEM e DALLWITZ, 2000; LEMMENS, SOERIANEGARA e WONG, 1995; MAINIERI e CHIMELO, 1989; MACEDO e PASTORE, 2013; CORADIN, CAMARGOS e MELLO, 2010).

A falta de profissionais qualificados e a grande diversidade de espécies nativas dificultam os processos de monitoramento da cadeia de custódia da madeira. Sendo necessária a aplicação de técnicas rápidas para obtenção das informações de forma confiável para ser possível realizar a identificação de madeiras em tempo real (TSUCHIKAWA et al., 2003; NISGOSKI et al., 2017; YU et al., 2017).

3.4 Uso da tecnologia NIR para identificação de madeiras

No setor florestal, a crescente demanda por métodos rápidos e confiáveis de seleção, classificação e identificação de madeiras impulsionou o avanço de técnicas de análise não destrutiva, desenvolvendo métodos práticos que aumentam a velocidade de resposta e reduzem os custos operacionais, com o objetivo de criar bancos de dados precisos e abrangentes, otimizando o processo de identificação das espécies e prevenindo fraudes, sem comprometer a integridade da madeira e sua destinação final (ANDRADE et al., 2010; HEIN et al., 2017; LAZZAROTTO et al., 2016).

Muitos estudos têm conciliado os métodos tradicionais aos métodos alternativos de análises para caracterização da madeira, com o objetivo de avaliar as propriedades da madeira com precisão, baixo custo e em menor tempo. Essas metodologias permitem estimar vários parâmetros, como: local de origem, umidade, densidade, níveis de degradação e características energéticas (HEIN, 2012; TSUCHIKAWA; KOBORI, 2015; LAZARESCU et al., 2016; SILVA et al., 2018). Permitem compreender a variabilidade entre indivíduos e realizar a caracterização dos materiais em campo (ROSS e PELLERIN, 1994; ANDRADE et al., 2010; ROCHA et al., 2019).

Dentre os vários métodos não destrutivos, a espectroscopia no infravermelho próximo (NIRS), técnica indicada no guia de boas práticas para a identificação de madeira para fins forenses publicado pelo Escritório das Nações Unidas para Drogas e Crime (em inglês, *United Nations Office on Drugs and Crime*), vem sendo muito utilizada para análises em madeira e seus subprodutos, a fim de determinar suas propriedades de forma rápida e precisa (ABASOLO et al., 2013; UNODC, 2016).

A tecnologia NIRS permite a aquisição direta de medidas de reflectância e absorbância que possuem informações dos grupos funcionais presentes nas moléculas de celulose, hemiceluloses, lignina e extrativos, referentes à distribuição desses constituintes químicos na madeira, produzindo uma “impressão digital química” para cada espécie florestal produtora de madeira (TSUCHIKAWA, 2007). A partir da interação dos espectros com a madeira é possível expressar detalhadamente a identidade fisionômica, a proporção, forma, movimento e

comportamento das moléculas que compõem a madeira, permitindo diferenciá-las mesmo que apresentem características semelhantes (NOVAES et al., 2022).

Diversas pesquisas têm sido desenvolvidas aplicando esta técnica, com o objetivo de identificar as espécies e determinar suas propriedades, apresentando modelos com elevada acurácia (BERGO et al., 2016; LAZARESCU et al., 2016; RAMALHO et al., 2017; SOARES et al., 2017). Tsuchikawa e Kobori (2015), atestam que a técnica pode ser utilizada para identificar amostras de coníferas e folhosas, o que corrobora com os resultados encontrados por outros autores, que desenvolveram modelos capazes de discriminar espécies de diferentes gêneros e do mesmo gênero (PASTORE et al., 2011; BRAGA et al., 2011; TSUCHIKAWA e KOBORI, 2015; SOARES et al., 2017). Pace et al. (2019), utilizaram a espectroscopia NIR para discriminar 12 espécies produtoras de madeira com cores distintas, enquanto Santos et al. (2020) aplicaram a técnica para discriminar quatro espécies de Tauari (*Couratari* spp). Braga et al. (2011) utilizando varredura NIR de fibra óptica em superfícies de madeira sólida, constataram que podem ser feitas identificações confiáveis com NIRS de superfícies de madeira maciça.

Em geral, os modelos desenvolvidos têm como base a umidade de equilíbrio da madeira, devido à dificuldade de monitorar a umidade da madeira de diferentes espécies ao mesmo tempo e a viabilidade de seguir os padrões já estabelecidos nas normas para posterior comparação (SANTOS et al., 2020). Tsuchikawa et al. (2003), acompanharam a variação de umidade de nove espécies de madeira, de seco em estufa até o estado de água livre totalmente saturada e desenvolveram modelos de predição com estatísticas satisfatórias. Lazarescu et al. (2017), também afirmam que a espectroscopia NIR pode ser utilizada para identificação correta de espécies utilizando grupos de madeiras com umidade semelhantes.

3.5 Espectroscopia NIR e análises multivariadas

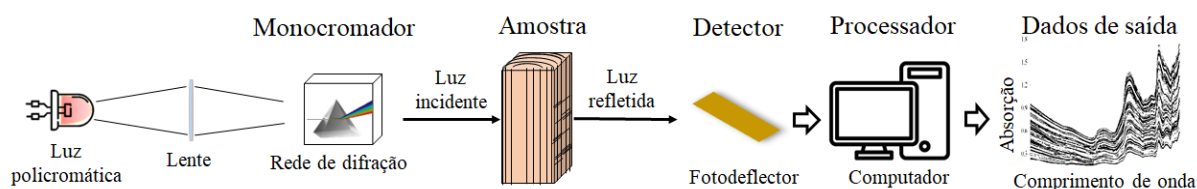
3.5.1 Princípio da técnica

A espectroscopia no infravermelho próximo (NIRS) é um método de análise não destrutiva, método rápido e não invasivo, pode ser aplicado em qualquer material que possua ligações C-H, N-H, S-H ou O-H, com preparo mínimo das amostras (WILLIAMS e NORRIS, 2001; PASQUINI, 2003). Baseado na interação da energia eletromagnética com as moléculas orgânicas do material, que consistem em vários grupos funcionais, cuja vibração molecular pode ser observada na faixa do espectro eletromagnético, que corresponde a região do infravermelho próximo (NIR) que compreende a faixa entre 12.500 e 4000 cm^{-1} . Essa região

espectral é considerada de difícil interpretação, pois os espectros são constituídos por inúmeras bandas de absorção sobrepostas (TSUCHIKAWA e KOBORI, 2015).

A radiação emitida sobre a amostra gera espectros de absorbância, contendo informações físicas e anatômicas do material, que permitem medir a interação da luz com o material e monitorar as mudanças vibracionais associadas a mudanças na estrutura molecular, possibilitando a discriminação do material (BAILLÈRES et al., 2002; NAES et al., 2002; PASQUINI, 2003; TSUCHIKAWA et al., 2003) (Figura 6). A faixa espectral de 11.111 a 10.000 cm^{-1} , por exemplo, é caracterizada pela presença de muitos ruídos e ausência de informações significativas. Já a faixa de 9.000 cm^{-1} possibilita identificar polímeros lignocelulósicos que fazem parte da constituição da madeira (HEIN et al., 2009). Os valores de absorbância variam de acordo com a espécie estudada, o tipo de superfície, a faixa espectral utilizada, tipo de produto de madeira e as condições de temperatura. Porém, as informações intrínsecas aos constituintes da madeira, presentes nos espectros, não dependem das condições de medição e podem ser usadas para a classificar espécies de madeira (LEBLON et al., 2013).

Figura 6 – Diagrama esquemático do sistema NIRS.



Fonte: Autora (2023).

Para obtenção dos espectros utiliza-se equipamentos que medem a intensidade da radiação eletromagnética em diferentes faixas de comprimento de onda. Conforme Siesler et al. (2002), os espectrômetros são capazes de decompor a luz em diferentes componentes espectrais e quantificar a intensidade em cada componente, fornecendo resultados mais precisos e confiáveis. São amplamente utilizados na física, química, astronomia, ciências ambientais, ciências dos materiais e biologia. Geralmente, os espectrômetros utilizados em laboratório são de bancada e não possuem portabilidade, sendo inviáveis para utilização em campo (PASQUINI, 2003; ADEDIPE et al., 2008; YANG et al., 2023).

Adedipe et al. (2008), afirmam que os espectrômetros NIR são suficientemente pequenos e robustos para serem instalados e operados em linha em situações industriais. A aquisição rápida dos dados demonstra que esta técnica tem grande potencial para aplicação

aplicações on-line ou portáteis no setor de controle de qualidade de produtos madeireiros e na caracterização da madeira em campo (AYANLEYE et al., 2020).

Os principais desafios para a técnica de espectroscopia NIR em condições de campo são a umidade do material, a portabilidade do equipamento e a sensibilidade do equipamento às variações de temperatura e umidade do ar em ambientes florestais (HEIN et al., 2017). Ainda assim, podem ser uma estratégia promissora para a identificação de espécies nos pátios de armazenamento de madeiras (WANG et al., 2022).

Hadlich et al. (2018) utilizaram espectrômetro portátil para obter espectros de tecidos de casca na Floresta Amazônica e identificaram 11 espécies de árvores com 98% de precisão usando estatística multivariada. Soares et al. (2017) avaliaram a capacidade de um espectrômetro portátil para desenvolver modelos discriminantes para seis espécies de madeira tropical visualmente semelhantes. Rocha et al. (2021) utilizaram para discriminar lâminas de madeira de espécies com características gerais semelhantes. Toscano et al. (2022) testaram um espectrômetro portátil para medição de umidade em cavacos de madeira. Nesses estudos o equipamento portátil demonstrou confiabilidade para a determinação das propriedades de interesse.

3.5.2 Quimiometria

A quimiometria é uma área de estudo da química que associa ferramentas de análises matemáticas, estatísticas e tecnológicas para obter informações químicas significativas de amostras com complexidade variável (FERREIRA et al., 1999). Correlaciona os espectros a modelos de regressão, para desenvolver calibrações multivariadas com o objetivo de extrair informações quantitativas e qualitativas do material de estudo, que permitam auxiliar na classificação, planejamento e otimização dos processos (TSUCHIKAWA e KOBORI, 2015). Traduz bases de dados extensas, reduz os ruídos e avalia a importância das variáveis na análise para construir modelos com ótimas capacidades preditivas (ROSSO et al., 2013; BERGO et al., 2016; HEIN et al., 2017; RAMALHO et al., 2017).

Em conjunto com a técnica NIRS e as técnicas de estatística multivariada, tem se confirmado como uma interessante ferramenta para avaliação não destrutiva de produtos agrícolas, alimentos, polímeros, têxteis, produtos farmacêuticos, petroquímicos, na madeira e em seus subprodutos (HEIN et al., 2017; NASCIMENTO et al, 2017; RAMALHO et al, 2017; SOARES et al., 2017; TOSCANO et al., 2017).

3.5.3 Análises estatísticas multivariadas

Métodos de análise estatística multivariada associada à técnica NIRS são considerados uma alternativa viável aos métodos tradicionais para determinação das propriedades da madeira. São capazes de extrair informações relevantes dos espectros em uma ampla faixa de comprimentos de onda, incluindo propriedades físicas e químicas (TSUCHIKAWA et al., 2003; ADEDIPE et al., 2008). Diante disto, possui grande potencial para discriminar madeiras em tempo real e estabelecer relação entre as medidas instrumentais e a propriedade de interesse da amostra.

Os espectros podem ser obtidos em uma quantidade N de medidas e organizados em uma matriz \mathbf{X} , enquanto a informação sobre a espécie da madeira, que é a propriedade de interesse, é organizada pelo vetor \mathbf{y} ou por uma matriz \mathbf{Y} caso haja mais de uma propriedade a ser determinada a partir das amostras. Cada amostra é disposta em uma linha da matriz \mathbf{X} representado por n . E cada coluna de \mathbf{X} corresponde a um comprimento de onda específico, que são as variáveis k independentes, que traz uma informação de absorbância diferente (FERREIRA et al., 1999). A matriz \mathbf{X} é representada a seguir:

$$X_{(n \times k)} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{1k} \\ x_{21} & x_{22} & x_{2k} \\ x_{n1} & x_{n2} & x_{nk} \end{bmatrix}$$

A análise multivariada permite que todos os dados sejam inseridos na análise em vez da seleção tradicional de um subconjunto de dados. Essa abordagem é possível porque as variáveis tendem a ser colineares e as informações que a estatística multivariada extrai estão localizadas no padrão de correlação em vez de pontos de dados individuais (ADEDIPE et al., 2008).

3.5.4 Métodos qualitativos de análise multivariada

Os métodos qualitativos de análise multivariada comparam os espectros de amostras desconhecidas com os de amostras conhecidas, por meio de algoritmos matemáticos (WANG et al., 2022). A discriminação dos materiais está relacionada principalmente às diferenças na sua composição química, ou seja, celulose, hemiceluloses, lignina e extrativos (TOSCANO et al., 2017). Alguns estudos avaliaram a utilização da espectroscopia NIR para classificação e discriminação de espécies de madeiras utilizando métodos distintos de análise qualitativa multivariada (TSUCHIKAWA e KOBORI, 2015; WANG et al., 2022). Dentre os métodos mais utilizados estão: análise de componentes principais (PCA), análise discriminante de mínimos quadrados parciais (PLS-DA), modelagem independente suave de analogia de classe (SIMCA), máquina de vetor de suporte (SVM).

3.5.4.1 PCA

A técnica de análise de componentes principais (PCA) é utilizada para reorganizar as informações de um conjunto de dados de amostragem. Avalia as correlações existentes entre as amostras e as variáveis, verifica padrões, identifica as amostras mais representativas e as agrupa de acordo com as similaridades encontradas, servindo de critério de avaliação das amostras (SANDAK et al., 2016). Este método reduz o número de variáveis originais em componentes principais (PC), para explicar as possíveis tendências de diferenciação ou não dos dados e sua variabilidade, reescrevendo a matriz em outras duas matrizes, uma de *scores* e outra de *loadings* (HEIN et al., 2009; ROSSO et al., 2013; ESTOPA et al., 2017; RAMALHO et al., 2017).

Cada componente principal retém a variância presente nas variáveis originais, permitindo utilizar menos variáveis para explicar as informações dos dados originais, diminuindo a dimensionalidade dos dados. Essa variação espectral corresponde a variação da composição química do material (DAVIES e FEARN, 2004; TOSCANO et al., 2022). Malegori et al. (2017) afirma que a utilização de componentes principais maximiza a estabilidade do modelo e reduzem o sobreajuste os dados. Além disso, a técnica é utilizada para classificação de espécies de folhosas (RUSS e FISEROVA, 2011; BRUNNER et al., 1996). Yang et al. (2012) verificaram a viabilidade da análise de componentes principais para distinguir espécies de jacarandá (cite o gênero) e encontraram valores satisfatórios, conseguindo categorizar as espécies em oito grupos distintos. Toscano et al. (2017), visando discriminar a casca e a madeira das espécies mais comuns do setor de peletização, constataram que a PCA associada a espectroscopia NIR é uma ferramenta útil para avaliar a qualidade da biomassa.

3.5.4.2 PLS-R

A regressão dos mínimos quadrados parciais (em inglês, *Partial Least-Squares Regression* PLS-R) ou regressão múltipla, é um método de processamento de dados multivariados utilizado para desenvolver modelos capazes de explicar o comportamento de uma variável pelo comportamento das outras n variáveis, determinando qual a melhor combinação do conjunto para prever a variável de interesse e compreender as relações entre os conjuntos de dados (MALEGORI et al., 2017). Visa prever um conjunto de dados y a partir do outro conjunto X usando um modelo linear multivariado, criando componentes chamados variáveis latentes relacionadas a X e y para maximizar a covariância e expressar a regressão de y em X . O número ideal de variáveis latentes pode ser determinado por meio da validação cruzada para cada modelo PLS-R desenvolvido (NOURI et al., 2017; WOLD, 1978). A PLS-R associada a

espectroscopia NIR pode ser utilizada para prever, diferenciar, identificar espécies, características e propriedades da madeira (HEIN et al., 2009; ROSSO et al., 2013; ESTOPA et al., 2017; HEIN et al., 2017; SOARES et al., 2017).

3.5.4.3 PLS-DA

A análise discriminante por mínimos quadrados parciais (em inglês, *Partial Least Squares - Discriminant Analysis* PLS-DA), assemelha-se a PLS-R, entretanto, considera os escores discriminantes, que são os coeficientes da regressão multiplicados pelas variáveis, fundamentais para desenvolvimento do modelo e estabelece combinações lineares das variáveis independentes com as variáveis dependentes (BERGO et al., 2016; COSTA et al., 2017; SOARES et al., 2017; FERREIRA, 2018). Nos modelos PLS-DA, o vetor y é composto por valores que são atribuídos para separar por classe as amostras pertencentes ao conjunto de dados a qual pretende-se discriminar. Outro produto deste algoritmo é a elaboração de uma matriz de classificação, também denominada matriz de confusão, que apresenta o total de acertos e identifica os erros de classificação por grupo (FERREIRA, 2018).

Ao desenvolver modelos PLS-DA para avaliar a precisão na distinção de tábuas de madeira de *Tsuga heterophylla* e *Abies amabilis*, Lazaresco et al. (2017) verificaram o efeito da umidade acima do PSF nos algoritmos de separação e encontrou valores satisfatórios, com identificação correta entre 86-94% nos modelos aplicados nos grupos com umidade semelhantes. Novaes et al. (2022), visando identificar madeira de espécies amazônicas processados por serras circulares e motosserras, obtiveram 99,2% de classificações corretas para os modelos utilizando espectros obtidos em superfícies processadas por serra circular e 95,2% para superfícies de madeira processadas com motosserra.

Ramalho et al. (2018) testaram modelos para discriminar espécies de madeira provenientes de florestas naturais e plantadas e obtiveram 86 a 100% de precisão para as espécies de madeira natural a partir de espectros NIR não tratados. Soares et al. (2017), ao avaliarem seis espécies amazônicas similares obteve taxas de eficiência superiores a 90% para todas as espécies. Lima et al. (2022) utilizaram a PLS-DA para classificar espécies amazônicas em função da densidade para posterior uso energético. Soares et al. (2017), com o objetivo de realizar a discriminação de seis espécies brasileiras de madeiras anatomicamente similares: *Carapa guianensis* Aubl. (andiropa), *Cedrela odorata* L. (cedro), *Erismia uncinatum* Warm. (cedrinho), *Micropholis melinoniana* Pierre (curupixá), *Hymenea coubaril* L. (jatobá) e *Swetenia macrophylla* King. (mogno), encontrou taxas de eficiência superiores a 90%, variando entre 90,4 e 99,7%, o que demonstra que os modelos apresentaram uma elevada taxa de acerto.

3.5.5 Pré-tratamentos

Os espectros de absorvância das amostras geralmente sofrem efeitos de dispersão, deslocamento e efeitos não lineares sendo necessário aplicar tratamentos matemáticos para retirar os ruídos para evidenciar os picos de absorvância, melhorar a qualidade do sinal, melhorar o ajuste e a precisão dos modelos (HEIN et al., 2009; NISGOSKI et al., 2017; TOSCANO et al., 2017). Esses tratamentos são aplicados para melhorar a calibração os modelos e reduzir a variância dentro das variáveis.

Os tratamentos matemáticos da primeira e segunda derivada de Savitzky-Golay (1964) são os mais utilizados na literatura. A 1ª derivada é utilizada para remover diferenças de deslocamento, os picos terão valores próximos de zero e aumentarão a influência da inflexão; a 2ª derivada remove os efeitos de inclinação nos dados, os picos aparecem como vales nas cargas e melhora a qualidade dos espectros (SANDAK et al. 2011; HORIKAWA et al. 2015; MUNIZ et al. 2016; AYANLEYE et al., 2020). Toscano et al. (2017) utilizaram pré-tratamentos com derivadas de segunda ordem para remover os efeitos aditivos e de inclinação nos espectros.

Há também outras formas de pré-tratar os dados espectrais, como a exclusão de *outliers* (FERREIRA et al., 1999; LAZZAROTO et al., 2016; RAMALHO et al., 2017); a aplicação do algoritmo SNV - variação normal padrão (em inglês, *standard normal variate*), e do MSC-método do espalhamento multiplicativo (em inglês, *Multiplicative Scatter Correction*) tem como objetivo reduzir a dispersão e eliminar os valores discrepantes, corrigindo a linha de base e remoção de ruídos, como a mudança na distância da luz (BARNES et al. 1989; ZHOU et al., 2020).

Para identificar amostras anômalas (*outliers*) no conjunto de dados utiliza-se os valores de leverage e resíduos de Student. A leverage refere-se à influência que uma amostra tem na estimativa dos coeficientes de regressão, quanto menor o valor, menor será a influência no modelo. O resíduo de Student refere-se a diferença entre o valor real e o valor calculado pelo modelo de regressão, obtido pela razão entre o valor do resíduo e seu desvio padrão. Quando as amostras possuem distribuição normal com probabilidade de 95%, elas distribuem-se aleatoriamente ao redor da origem. Quando apresentam comportamento divergente devem ser excluídas do conjunto de dados (FERREIRA et al., 1999; HEIN et al., 2018; MARTINS e FERREIRA, 2013).

3.5.6 Desenvolvimento do modelo

Para desenvolvimento dos modelos, o banco de dados é subdividido em dois conjuntos, um para calibração dos modelos e outro para validação (ROSSO et al., 2013; ESTOPA et al., 2017). A base de dados destinada a calibração do modelo deve conter espectros associados às variáveis de interesse (NOURI et al., 2017). Os tipos de validação mais utilizados são a validação cruzada completa (em inglês, *full cross validation*) e a validação independente.

Na validação cruzada completa são utilizadas amostras da mesma base de dados para validar o modelo. As amostras que participaram da calibração participam da validação do modelo, sendo selecionadas de forma aleatória ou pré-definidas em grupos, utilizando cada linha da matriz como lote de validação. Serve como indicador da robustez e capacidade de predição do modelo. Se o coeficiente de determinação na validação (R^2) for baixo, significa que o modelo provavelmente não será eficiente para predição de amostras independentes, ou o número de repetições está insuficiente (FERREIRA, 2018). Na validação independente o lote da validação é menor que o de calibração, podendo conter de 20% a 40% das amostras da matriz principal, que não são utilizadas na calibração do modelo. A seleção das amostras pode ser feita de forma aleatória ou sistemática (RAMALHO et al., 2008; HEIN et al., 2009; ROSSO et al., 2013; SOARES et al., 2017; NOVAES et al., 2022).

Para gerar modelos robustos e com alta capacidade de predição deve-se levar em consideração os fatores que podem influenciar na eficiência dos modelos de predição, como: temperatura, umidade, rugosidade, tamanho de partículas e qualidade da superfície (TSHABALADA et al., 2005). Os modelos globais, por exemplo, caracterizam-se por incluir todas as variáveis de referência na calibração do modelo. Entretanto, em algumas situações é necessário selecionar faixas espectrais específicas para o desenvolvimento dos modelos. Isso ocorre quando a variação de umidade das madeiras está associada as bandas espectrais e quando o componente químico do material se relaciona com a análise discriminante (TSUCHIKAWA et al., 2003). Adedipe et al. (2008), durante o processo de calibração dos modelos, selecionaram três faixas espectrais para identificar qual comprimento de onda forneceria mais informações quantitativas úteis para distinguir as espécies e observaram que a região correspondente a 12.500 a 4.000 cm^{-1} apresentaram os melhores resultados.

3.5.7 Métricas de desempenho de modelos discriminantes

O número de variáveis latentes (LV) utilizados na calibração é um dos parâmetros de eficiência dos modelos PLS-DA, estimadas como médias ponderadas das variáveis de referência e estimadas. Utiliza-se o LV que minimiza a variância residual da calibração e da validação cruzada e aumenta a porcentagem de acertos na predição (SILVA et al., 2014;

NOURI et al., 2017). Os valores percentuais de acertos nas predições é uma das formas de avaliar o desempenho do modelo na predição das variáveis categóricas de interesse.

Outras métricas de desempenho são os índices de desempenho da calibração e da validação dos modelos, como a acurácia, taxa de eficiência, sensibilidade e especificidade, que relacionam os erros dos valores estimados para a classe ou espécie discriminada no modelo PLS-DA. Acurácia e a taxa de eficiência são indicadores que avaliam a proporção de predições corretas de um modelo, considerando verdadeiros positivos e negativos. A sensibilidade mede a capacidade de identificar corretamente os casos positivos, enquanto a especificidade avalia a correta classificação dos casos negativos, sendo ambas essenciais para otimizar a detecção de verdadeiros positivos e a minimização de falsos positivos (FAWCETT, 2006; POWERS, 2011; ZWEIG & CAMPBELL, 1993; ALTMAN & BLAND, 1994). Elevados erros nos valores estimados podem indicar a presença de erro nos dados instrumentais ou que a amostra apresenta características distintas das demais amostras do conjunto de calibração (HEIN et al., 2009; ROSSO et al., 2013; BERGO et al., 2016, LAZZAROTO et al., 2016; ESTOPA et al., 2017; RAMALHO e tal., 2017; SOARES et al., 2017).

3.6 Transferência de calibração

O desenvolvimento de modelos multivariados requer um banco de dados robusto para obter eficiência e aplicabilidade. Porém, novas circunstâncias podem ser impostas aos modelos e, conseqüentemente, diminuir a capacidade de previsão, como: substituição do equipamento de medida ou de alguns de seus componentes, mudança na constituição física ou química das amostras e alteração das condições ambientais.

Outros fatores como as características do equipamento (resolução espectral, faixa de aquisição) e as características da amostra (tamanho, umidade e rugosidade) podem ter influência na aquisição espectral e, conseqüentemente, afetar a robustez do modelo. Isso pode ser solucionado sem a necessidade de novas calibrações com a aplicação de uma calibração robusta, padronização dos espectros e aplicando a transferência de calibração para melhorar o desempenho dos modelos e otimizar o processo (FEARN, 2001; NOURI et al., 2017). Entretanto, é importante realizar as validações de forma adequada, aplicando os modelos em dados que possuam relação com a variável de interesse, para obter resultados confiáveis e precisos.

A transferência de calibração visa transferir um modelo de calibração para uma condição diferente da qual foi desenvolvido, como utilizar modelos de calibração desenvolvidos por um instrumento primário e transferir o modelo gerado para um instrumento secundário, sem realizar

novas medições (FEARN, 2001). Porém, equipamentos diferentes fornecem respostas distintas, resultando na perda da eficiência da calibração, necessitando de padronização (NOORD, 1994; NAES et al., 2004). Vários métodos de padronização têm sido propostos para a transferência de modelos de calibração entre equipamentos. Isto é possível devido a correlação existente entre os espectros de absorvância das amostras de referência e as amostras utilizadas para nova predição.

Na literatura, estudos comprovaram a eficiência da transferência de calibração entre bancos de dados de calibração adquiridos em momentos, locais e equipamentos diferentes. As principais técnicas de transferência de calibração utilizadas na espectroscopia NIR encontradas na literatura são: *reprofile* (SHENK e WESTERHAUS, 1991), padronização direta por partes (BOUVERESSE e MASSART, 1996), correção de inclinação (FEARN, 2001), *updating* (FEUDALE et al., 2002; GUERRERO et al., 2010; NOURI et al., 2017) e ortogonalização (ANDREW e FEARN, 2004; ROGER et al., 2003, YANG et al., 2023).

3.6.1 Updating

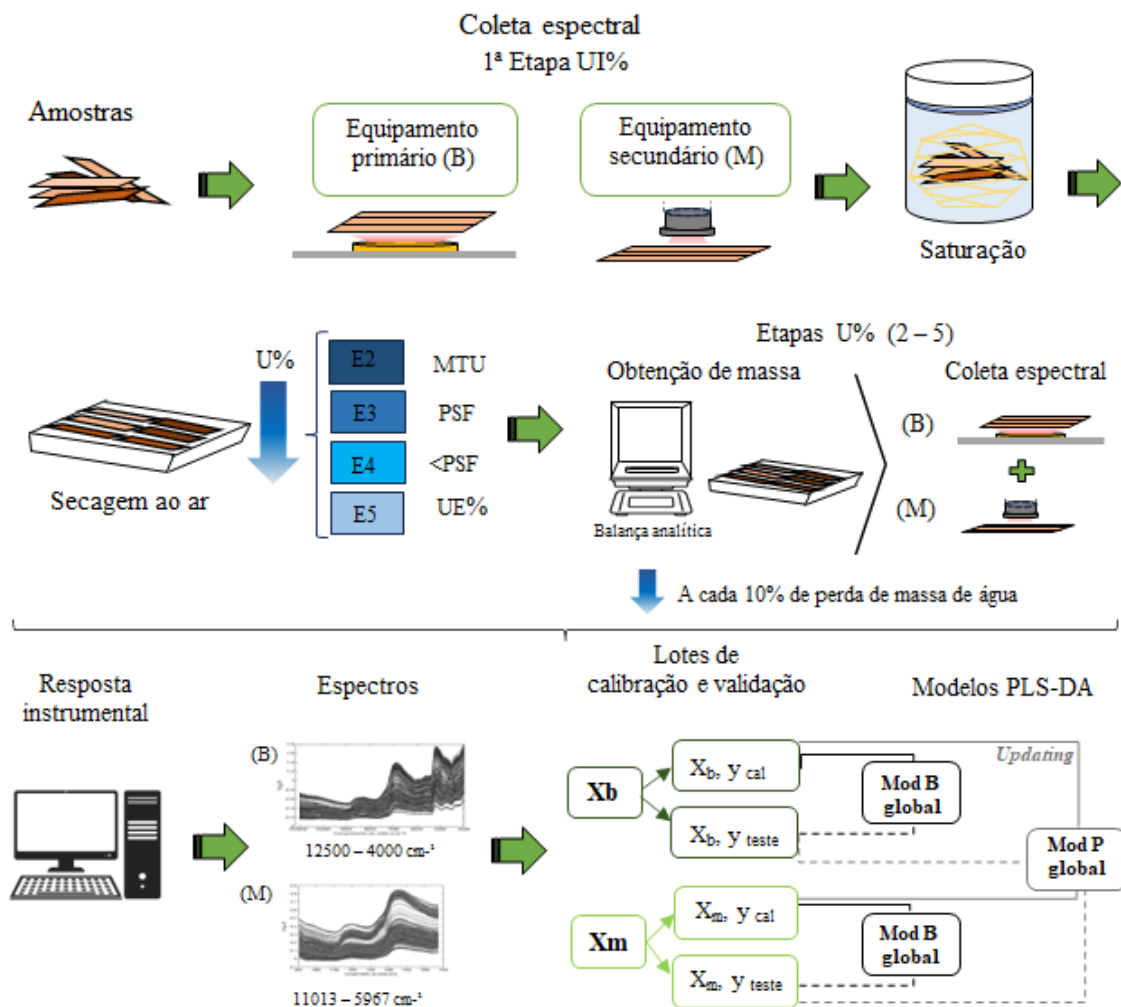
O método *updating* consiste em adicionar amostras medidas no equipamento secundário ao conjunto de dados de calibração obtidas no equipamento primário, fazendo uma recalibração (FEUDALE et al., 2002; GUERRERO et al., 2010; NOURI et al., 2017). Também conhecido como *spiking* pode ser descrito como método de correção implícita. Pois, as novas amostras inseridas na regressão podem tornar o modelo independente das perturbações espectrais, enriquecendo o banco de dados e melhorando progressivamente o desempenho dos modelos (GUJRAL et al., 2009).

Os modelos transferidos obtidos por meio de estudos realizados sobre a aplicação desta técnica de transferência por: Shepherd e Walsh (2002), que aplicaram esta técnica para determinar propriedades do solo, e Nouri et al. (2017), que aplicaram para mapear o conteúdo de argila obtidos por meio de dados hiperespectrais, ofereceram melhores desempenhos e confirmam a eficiência da transferência de dados espectrais resultantes de diferentes de condições de medição.

4 MATERIAL E MÉTODOS

A Figura 7 apresenta um fluxograma com as etapas que serão realizadas no trabalho. Estas etapas estão detalhadas a seguir.

Figura 7 – Fluxograma metodológico.



Legenda: Inicialmente, realiza-se o preparo das amostras. Em seguida, é feita a coleta espectral das amostras de madeira na umidade inicial (UI%) utilizando ambos os equipamentos. Após essa primeira coleta, as amostras são imersas em água para saturação. Completada a saturação (MTU), coletam-se a massa e os espectros das amostras novamente com os dois equipamentos, após o que as amostras são dispostas em bandejas para secagem ao ar. Durante o processo de secagem, monitora-se a perda de água das amostras, coletando a massa e os espectros a cada 10% de água perdida. Após as coletas, a resposta instrumental obtida nos equipamentos primário e secundário é processada utilizando o *software* Chemoface para calibração, validação e transferência dos modelos PLS-DA.

Fonte: Autora (2023).

4.1 Amostras de madeira

A amostras foram obtidas por meio do reaproveitamento de material proveniente da região amazônica, próxima ao município de Parauapebas-PA. Foram utilizadas onze espécies florestais nativas da Floresta Amazônica (Figura 8), de importância e representatividade no comércio madeireiro. As espécies utilizadas para preparo das amostras estão listadas na Tabela 2.

Tabela 2 – Espécies amazônicas utilizadas.

ID	Cód.	Nome popular	Família	Nome científico
1	A	Angico	Fabaceae	<i>Anadenanthera</i> sp.
2	AC	Angelim	Fabaceae	<i>Hymenolobium</i> sp.
3	AM	Amarelão	Fabaceae	<i>Apuleia leiocarpa</i> (Vogel) J. F. Macbr
4	C	Cumarú	Fabaceae	<i>Dipteryx odorata</i> (Aubl.) Willd.
5	CP	Castanheira	Lecythydaceae	<i>Bertholletia excelsa</i>
6	G	Goiabão	Sapotaceae	<i>Pouteria pachycarpa</i> Pires
7	I	Itaúba	Lauraceae	<i>Mezilaurus itauba</i>
8	J	Jatobá	Fabaceae	<i>Hymenaea</i> sp.
9	M	Marupá	Simaroubaceae	<i>Simarouba amara</i> Aubl.
10	MU	Muiracatiara	Anacardiaceae	<i>Astronium lecointei</i>
11	S	Sucupira	Fabaceae	<i>Bowdichia nitida</i>

Legenda: ID- identificação numérica da espécie; Cód.-letra referente ao nome popular da espécie.

Figura 8 – Espécies amazônicas.

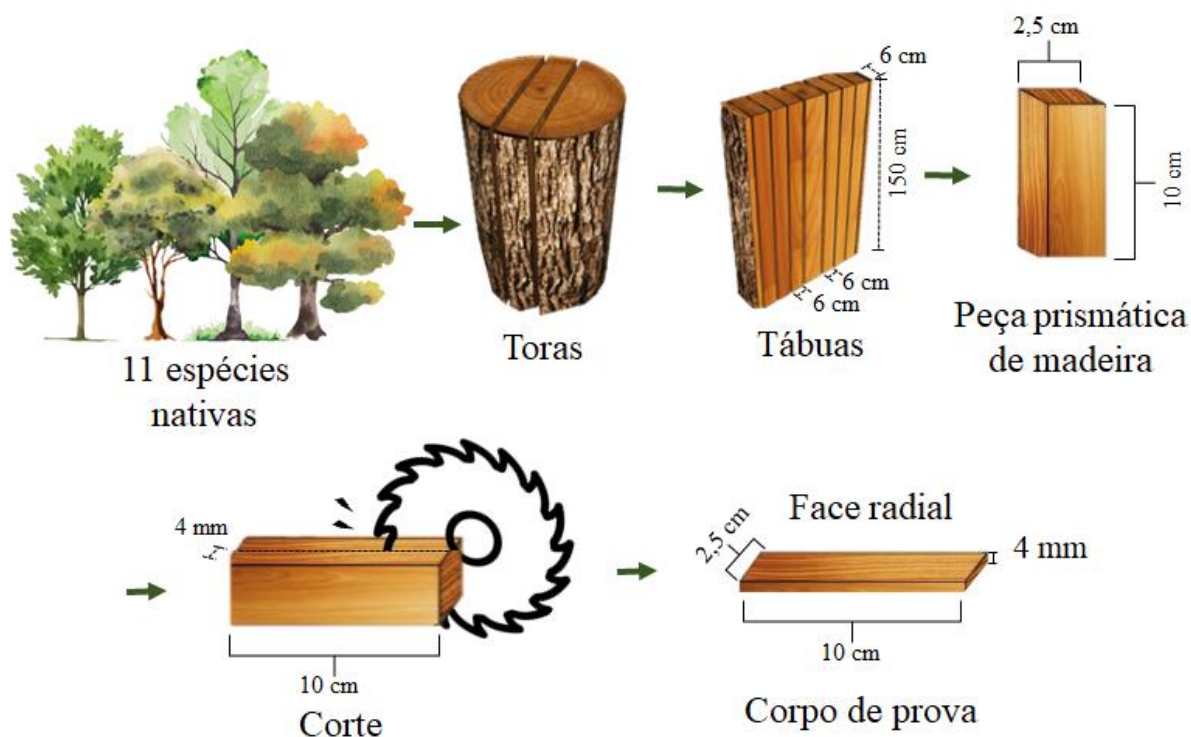


Fonte: Autora (2023).

4.1.2 Preparação dos corpos de prova

Das onze espécies de origem amazônica, foram seccionadas toras para a obtenção de pranchas bem orientadas com 6 cm de espessura, 1,50 m de comprimento e largura variável conforme o diâmetro da árvore, incluindo a medula. A partir dessas pranchas, foram produzidas peças prismáticas de madeira com dimensões de 10 cm de comprimento, 2,5 cm de largura e espessura (C x L x E). A partir dos corpos de prova prismáticos das espécies amazônicas, citadas anteriormente, foram produzidas tiras radiais com dimensões de 10 cm de comprimento, 2,5 cm de largura e 4 mm de espessura, perpendiculares aos anéis de crescimento utilizando serra circular, representado no esquema da Figura 9, totalizando 110 amostras de madeiras oriundas das 11 espécies amazônicas. As amostras foram mantidas em sala climatizada à 26 °C, antes das análises.

Figura 9 – Esquema do preparo das amostras.



Legenda: Processo de preparo das amostras. Foram selecionadas 11 espécies, das quais de cada árvore obteve-se toras de 150 cm de altura, que foram desdobradas em tábuas de 6 cm de espessura. Em seguida, as tábuas foram reduzidas a peças prismáticas de 10 cm x 2,5 cm x 2,5 cm (C x L x E). Utilizando uma serra circular, essas peças foram transformadas em filetes de madeira 10 cm x 2,5 cm x 4 mm (C x L x E).

Fonte: Autora (2023).

4.2 Caracterização do material

4.2.1 Densidade básica

Os valores utilizados para determinar a densidade básica da madeira das espécies estudadas, relação entre a massa seca e volume saturado, foram obtidos conforme a norma da Sociedade Americana para Testes de Materiais (ASTM, do inglês *American Society for Testing and Materials*) D2395 (ASTM, 2005). Com a utilização de uma balança analítica obteve-se a massa dos corpos de prova de cada espécie e para obtenção do volume utilizou-se o método hidrostático, método baseado no princípio de Arquimedes (Figura 10). As amostras foram imersas em água até atingir o ponto de saturação completa, após atingirem a umidade de equilíbrio foram levadas à estufa a 103 ± 2 °C até atingirem massas secas constantes.

4.2.2 Umidade da madeira

A umidade na base úmida ($U_{bu}\%$) dos 110 espécimes de madeira foi determinada com base nas massas medidas em cada etapa do processo de secagem. Para determinar a umidade da madeira em cada etapa de observação foi utilizada a seguinte equação:

$$U_{bu}\% = \left(\frac{Mu - Ms}{Mu} \right) \times 100 \quad (1)$$

Onde:

U_{bu} : Umidade da madeira na base úmida, em porcentagem (%);

Mu : Massa da madeira na condição inicial de observação (saturada)(g);

Ms : Massa da madeira na condição final de observação (g).

Para estimar a quantidade de massa de água perdida durante o processo de secagem, a cada 10% de umidade perdida e determinar as etapas de secagem, foi utilizada a seguinte equação:

Onde:

MAR : Massa de água removida a cada 10% de umidade perdida

$$MAR = \frac{\text{Massa saturada de madeira} \times 10}{\text{Umidade inicial}} \quad (2)$$

4.3 Aquisição espectral

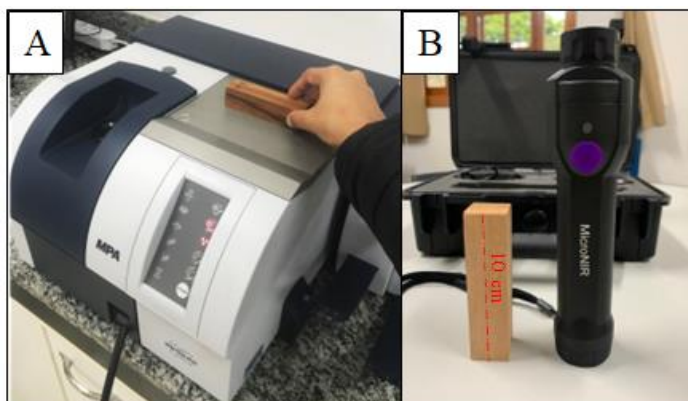
As coletas espectrais foram feitas na face radial da madeira. A primeira foi realizada após o pré-processamento das amostras de madeira com serra circular, na umidade de equilíbrio. A segunda coleta foi realizada após a saturação do material (MTU). Posteriormente, as amostras foram submetidas à secagem ao ar em ambiente controlado, à 26°C, e monitoradas por meio de uma balança analítica de precisão. A partir da condição saturada, a massa de cada corpo de prova foi monitorada. A aquisição espectral e a medição de massa foram realizadas a cada 10% de perda da massa de água do corpo de prova, até que a condição de equilíbrio fosse alcançada (Figura 7).

Dois espectrômetros foram selecionados para aquisição dos espectros de absorvância (Figura 11). A Tabela 3 apresenta algumas das características técnicas dos equipamentos utilizados.

Tabela 3 - Características básicas dos espectrômetros testados.

Especificações	Bruker MPA	MicroNIR OnSite-W Viavi
Tecnologia do sensor	FT (Fourier Transform)	Filtro variável linear
Faixa (cm ⁻¹)	12.493-3.999	11.013-5.967
Resolução (cm ⁻¹)	4	1666666,67
Peso (g)	15.000	250
Portátil	não	sim
Disponível no mercado	sim	sim
Tempo de medição para um único espectro em (s)	30	0,25-0,5

Figura 11 – Espectrômetros: Bruker (A) e MicroNIR (B).



Fonte: Autora (2023).

O primeiro foi um espectrômetro de bancada modelo MPA FT-NIR Bruker, equipado com uma esfera integradora onde as amostras foram posicionadas para obtenção de dois espectros de diferentes pontos da madeira (Figura11-A). O segundo equipamento foi um espectrômetro NIR Portátil - MicroNIR OnSite, que foi posicionado sobre as amostras para realizar as leituras, também foram obtidos dois espectros de cada amostra (Figura11-B). A absorvância de cada amostra foi calculada como a média da replicação de 32 varreduras para cada espectro. A resolução espectral no equipamento portátil foi de 6,2 nm e no Bruker teve um valor constante de 4 cm⁻¹ (equivalente à 0,0000004 nm).

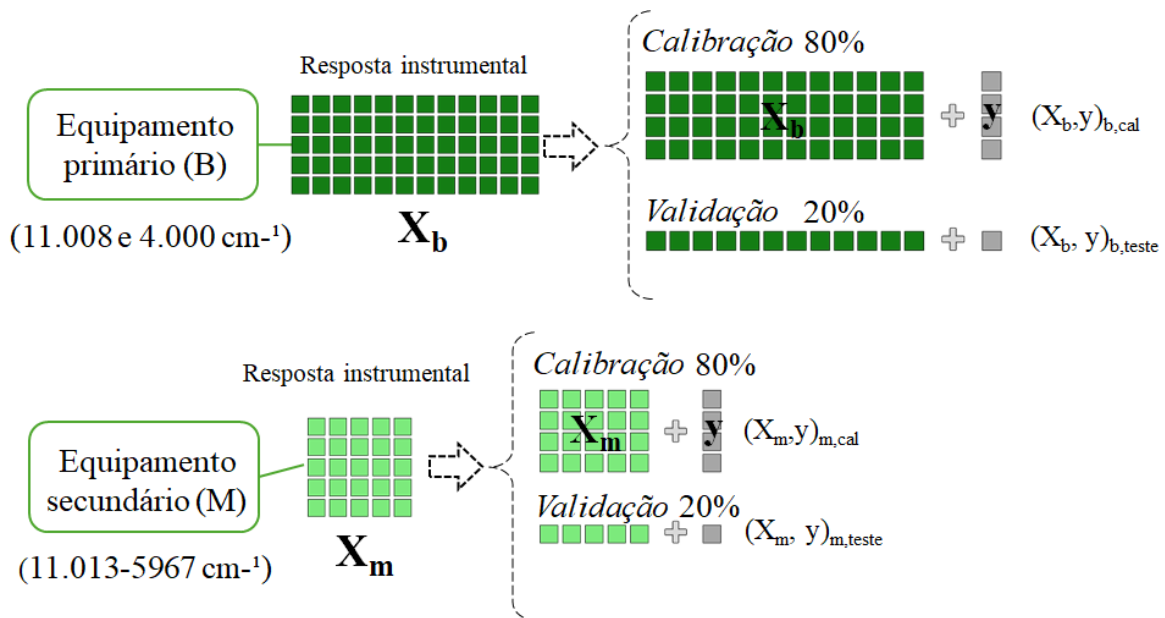
4.4 Preparação de dados, calibração e teste

O primeiro banco de dados $(X_b, y)_b$ contém $N_b = 550$ observações obtidas em diferentes umidades pelo espectrômetro de bancada MPA FT-NIR Bruker, utilizando a esfera integradora. Apenas a faixa entre 11.008 e 4.000 cm⁻¹ foi considerada devido ao ruído e falta de informações relevantes na faixa removida (qual?). Os dados foram rankeados em ordem crescente em relação aos valores de densidade básica.

Em seguida, de forma sistemática, uma amostra entre cinco foi colocada no conjunto de teste (20%) e as outras quatro no conjunto de calibração (80%) (Figura 12). Este procedimento levou a um conjunto de calibração $(X_b, y)_{b,cal}$ e um conjunto de teste $(X_b, y)_{b,teste}$ correspondendo a 4/5 e 1/5 dos dados da matriz N_b , respectivamente. Este método garantiu que ambos os conjuntos de calibração e teste tivessem uma distribuição semelhante de densidade. Além disso, as etapas de secagem da madeira foram igualmente apresentadas nos conjuntos de calibração e validação para os modelos globais, sendo elas: E1: umidade inicial; E2: umidade após a saturação; E3: umidade próxima ao ponto de saturação das fibras; E4: umidade abaixo do ponto de saturação das fibras; E5: umidade de equilíbrio.

Um segundo banco de dados $(X_m, y)_m$ foi construído a partir de $N_m = 550$ observações obtidas em diferentes umidades pelo espectrômetro portátil MicroNIR Viavi nas mesmas amostras, considerando a faixa total de abrangência do equipamento (11.013-5.967 cm^{-1}). O procedimento utilizado para seleção dos conjuntos de calibração e validação foi o mesmo adotado para o primeiro banco de dados.

Figura 12 – Esquema representativo da preparação dos lotes de calibração e validação.



Legenda: Esquema representativo da separação dos lotes de validação e calibração para os modelos discriminantes PLS-DA gerados a partir dos espectros obtidos no equipamento primário- Bruker MPA e o secundário- MicroNIR.

Fonte: Autora (2023).

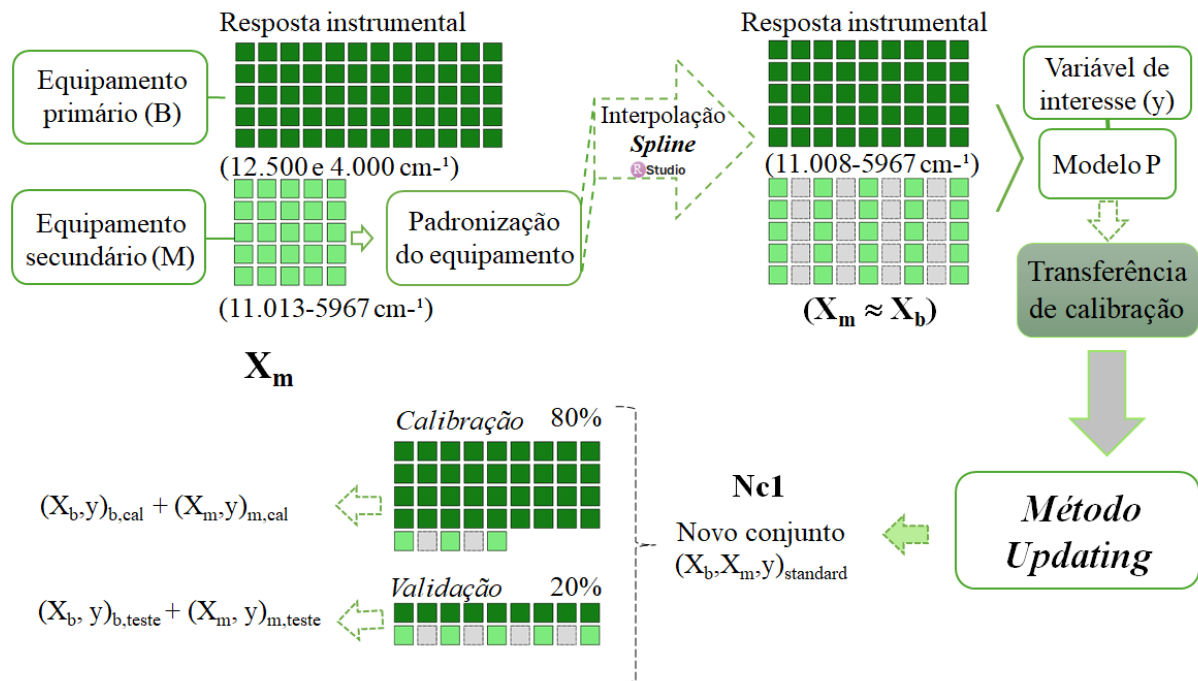
4.4.1 Transferência de calibração

O método *updating* foi utilizado para desenvolver novos modelos PLS-DA e testar a eficiência da transferência entre os equipamentos. Primeiramente foi necessário realizar a

padronização das matrizes. Para isso utilizou-se a função de interpolação Spline e redução de dimensão dos dados do pacote Rchemo (LESNOFF, 2021) no *software* R, para ajustar às bandas compatíveis do MPA FT-NIR com o intervalo de aquisição do espectrômetro portátil. Dessa forma, o número total de bandas espectrais do conjunto de dados obtidos no espectrômetro portátil foi extrapolado de 125 para 1.308. O total de faixas foi reduzido à faixa compatível do portátil (11.008-5.967 cm^{-1}) e, posteriormente, foi utilizada a média de cada 5 bandas espectrais, devido à alta correlação entre elas, para reduzir a proporção dos dados.

A partir do conjunto padronizado, foi selecionado um subconjunto de amostras padrão (Nc1), extraído dos bancos de dados obtidos pelo MicroNIR, correspondendo a 5% dos espectros do lote de calibração. Essas amostras foram utilizadas como padrões para formar o novo $(X_b, X_m, y)_{\text{standard}}$, conforme demonstrado no esquema abaixo (Figura 13).

Figura 13 – Esquema de padronização e transferência de calibração.



Legenda: As respostas instrumentais originais foram utilizadas para realizar a padronização dos espectros utilizando a interpolação Spline. Os dados padronizados foram selecionados para montar um novo conjunto de dados atualizado e gerar novos modelos PLS-DA.

Fonte: Autora (2023).

4.4.2 Construção dos modelos PLS-DA

As análises de componentes principais (PCA) e de regressão (PLS-DA) foram realizadas usando o *software* Chemoface (NUNES et al., 2012) para encontrar possíveis correlações entre

os espectros e as variáveis de resposta, para discriminar e agrupar as espécies madeireiras conforme as assinaturas espectrais.

Foram testadas transformações matemáticas espectrais propostas por Savitzky e Golay (1964), utilizando os esquemas: 25.2.1 - 25 pontos de alisamento, polinômio de segunda ordem, primeira derivada; 15.2.2 - 15 pontos de alisamento, polinômio de segunda ordem, segunda derivada; padronização SNV (Standard Normal Variate) e o método do espalhamento multiplicativo (MSC) (RAMALHO et al., 2016; LOUREIRO et al., 2022). Amostras anômalas, com alta variância residual e visivelmente diferentes do restante das amostras, foram detectadas em análises gráficas como outliers e excluídas dos modelos (MILAGRES et al., 2013). O delineamento experimental utilizado para construção e validação dos modelos discriminantes por regressão PLS está representado na tabela 4.

Tabela 4 – Delineamento experimental

Equipamento	Faixa espectral (cm⁻¹)	Conjunto de dados	N	Np	Tratamento
MPA FT-NIR	11008 – 4008	Etapas de umidade 1,2,3,4,5	440	110	Sem tratamento SNV MSC 1d (25.2.1) SNV + 1d
MicroNIR	11.013 – 5975	Etapas de umidade 1,2,3,4,5	440	110	Sem tratamento SNV MSC 2d (15.2.2) SNV + 2d
MPA FT-NIR + MicroNIR	11008 – 5967	Etapas de umidade 1,2,3,4,5	440 +	Lote1 110 Lote2 110	Sem tratamento SNV MSC 1d (25.2.1) SNV + 1d

Sendo: Etapas = 1 – Umidade inicial (UI%), 2 – MTU (máximo teor de água obtido após a saturação), 3 – PSF (ponto de saturação das fibras médio entre as espécies), 4 – valores de umidade abaixo do PSF, 5 – umidade de equilíbrio (UE%); 1d = 1ª derivada de Savitzky e Golay (1964); 2d = 2ª derivada de Savitzky e Golay (1964); SNV – Standard Normal Variate; MSC = Multiplicative Scatter Variate. Lote 1: 110 espectros obtidos no Bruker MPA; Lote 2: 110 espectros obtidos no MicroNir.

Para a validação dos modelos foi adotado a validação independente de forma sistemática, com um máximo de 10 variáveis latentes. Para determinar o número ideal de variáveis latentes para cada modelo foi utilizada a validação cruzada *leave-one-out*, adotando para cada modelo o número de fatores que minimizou a variância residual da calibração e da validação cruzada e maximizou o percentual de acertos na predição (SILVA et al., 2014; NOVAES et al., 2022).

4.4.3 Desempenhos de previsão

Para seleção dos modelos foram adotados os seguintes parâmetros: número de variáveis latentes utilizadas na calibração (LV) e porcentagem de acertos de previsão (TA) (WILLIAMS; SOBERING, 1993). O desempenho dos modelos PLS-DA foram avaliados por meio de quatro indicadores: sensibilidade (SEN), especificidade (SPEC), acurácia (ACCU) e taxa de eficiência (OLIVERI & DOWNEY, 2012; ZHOU et al., 2020). Definidos da seguinte forma:

$$SEN = \frac{VP}{VP+FN} \times 100\% \quad (3)$$

$$SPEC = \frac{VN}{VN+FP} \times 100\% \quad (4)$$

$$ACCU = \frac{VN+VP}{VP+FN+VN+FP} \times 100\% \quad (5)$$

$$TEF = \sqrt{\frac{VP \times VN}{(VP+FN) \times (VN+FP)}} \times 100\% \quad (6)$$

Em que:

VP = verdadeiro positivo;

VN = verdadeiro negativo;

FN = falso negativo;

FP = falso positivo.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 Caracterização das espécies

5.1.1 Densidade da madeira

A densidade básica é uma das propriedades mais importantes da madeira e serve como referência para classificá-la. Na tabela 5 estão apresentados os valores médios de densidade básica para cada espécie e sua classificação.

Tabela 5 – Densidade básica em kg m⁻³ das espécies amazônicas estudadas.

Cód	Espécie	Mín.	Máx.	Méd.	Classe	Descrição
A	Angico	678	759	711	3	Moderadamente pesada

AC	Angelim	552	689	628	3	Moderadamente pesada
AM	Garapeira	693	734	716	3	Moderadamente pesada
C	Cumarú	842	882	863	4	Pesada
CP	Castanheira	497	626	574	3	Moderadamente pesada
G	Goiabão	724	808	755	3	Moderadamente pesada
I	Itaúba	640	746	694	3	Moderadamente pesada
J	Jatobá	796	869	830	4	Pesada
M	Marupá	315	346	330	1	Muito Leve
MU	Muiracatiara	732	836	779	4	Pesada
S	Sucupira	718	829	755	3	Moderadamente pesada

Sendo: Cód.: código da amostra referente à espécie; Mín.: valor mínimo de densidade básica das amostras da referida espécie; Máx.: valor máximo de densidade básica das amostras da referida espécie; Classe: classe de densidade atribuída a espécie conforme a classificação do INDEA (2011); Descrição.: classificação conforme a classe atribuída à espécie. Fonte: Autora (2023).

A determinação das classes de densidade das espécies foi realizada conforme a publicação do Instituto de Defesa Agropecuária do Estado do Mato Grosso – INDEA (2011); que caracteriza cinco classes: muito pesada – valor maior ou igual a 960 kg.m⁻³; pesada – valores entre 760 e 960 kg.m⁻³; moderadamente pesada - valores entre 560 e 760 kg.m⁻³; leve - valores entre 410 e 560 kg.m⁻³ e muito leve - valor menor que 410 kg.m⁻³. Dentre as onze espécies, sete foram classificadas como moderadamente pesadas, três como pesadas e apenas uma como muito leve (Tabela 5). Essa classificação evidencia a variação de densidade entre as espécies, refletindo suas diferentes composições químicas e características estruturais, como variações na estrutura celular e percentuais de celulose, hemicelulose e lignina. Essas diferenças na composição influenciam diretamente nas propriedades físicas e mecânicas da madeira (BRAGA et al., 2011).

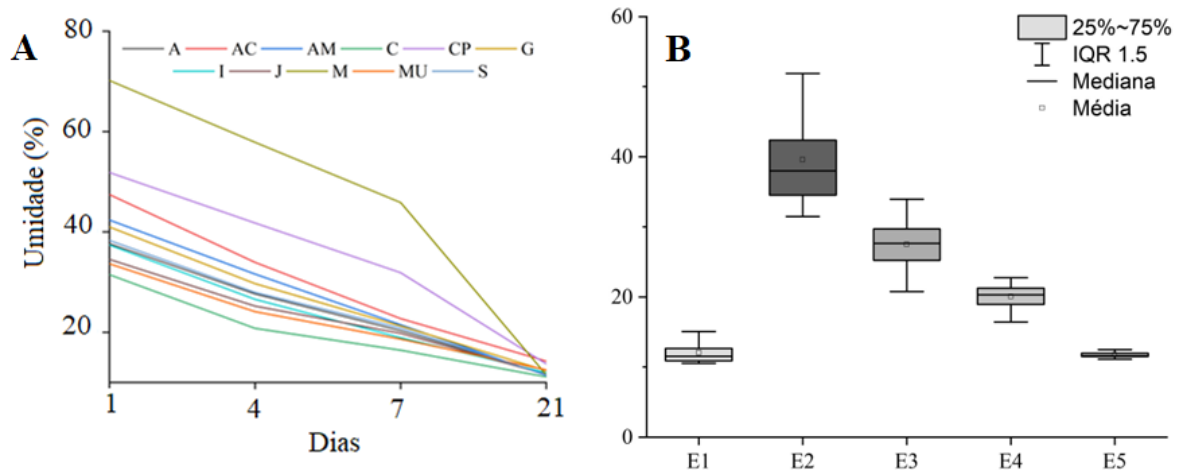
Como observado por Schimleck e Evans (2004), a utilização da espectroscopia NIR (Near-Infrared) pode aprimorar a identificação das espécies ao detectar variações químicas sutis que não são evidenciadas apenas pela densidade da madeira. Sendo útil para diferenciar espécies em situações em que as densidades podem ser semelhantes, refinando o processo de classificação e permitindo uma identificação mais adequada das madeiras, otimizando o uso dos recursos florestais (BAILLERES; DAVRIEUX; HAM-PICHAVANT, 2002; SANDAK; SANDAK; NEGRI, 2016; LIMA et al., 2022).

5.1.2 Umidade da madeira

As amostras foram imersas em água durante 30 dias, após esse período foram expostas ao ar em um ambiente com temperatura média de 26 °C até estabilizarem a perda de massa de

água adquirida na saturação e atingirem a umidade de equilíbrio. Na figura 14 estão apresentados os valores médios umidade por etapa e espécie, obtidos na base úmida.

Figura 14 – Valores médios de perda de umidade durante a secagem.

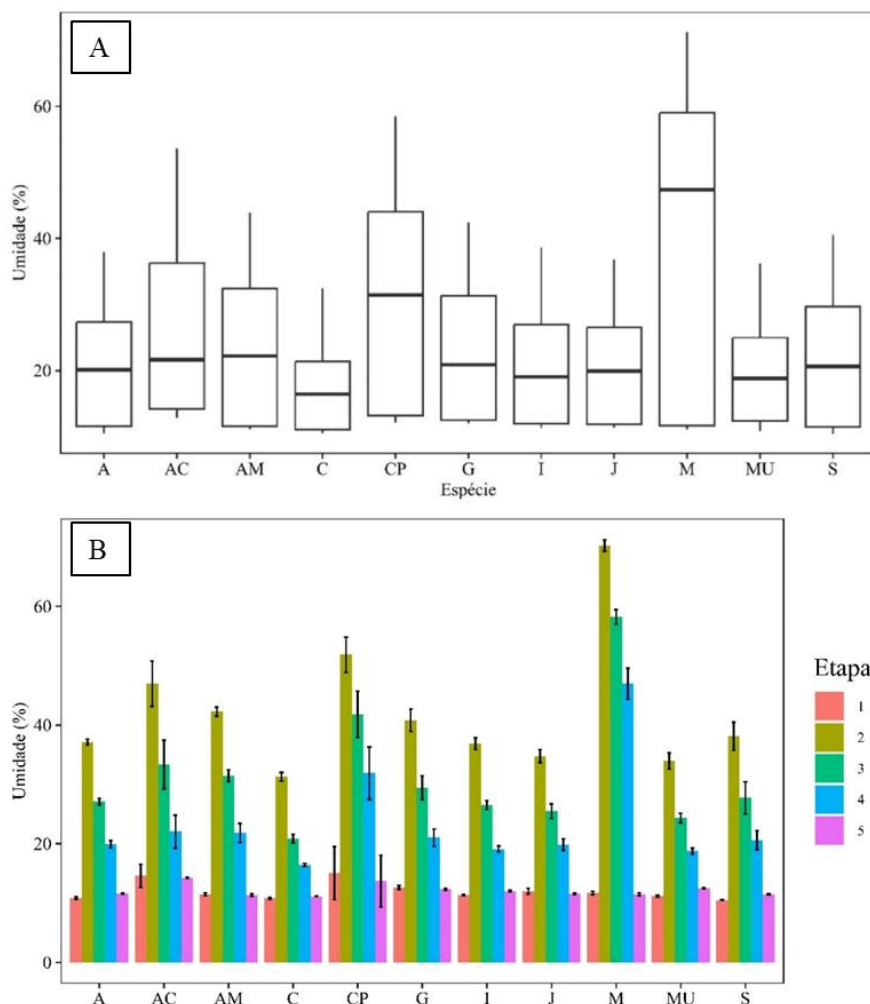


Legenda: **A**: Umidade das onze espécies estudadas durante a secagem ao ar livre; **B**: Boxplot das etapas de umidade, Sendo: E1: umidade inicial; E2: umidade após a saturação; E3: umidade próxima ao ponto de saturação das fibras; E4: umidade abaixo do ponto de saturação das fibras; E5: umidade de equilíbrio.

Fonte: Autora (2023)

As espécies atingiram a umidade de equilíbrio (UE%) 21 dias após o início das coletas. A espécie mais leve, Marupá (*Simarouba amara* Aubl), apresenta maior percentual de massa de água após a saturação, atingindo valor percentual de 70% de umidade. Já as demais espécies, não absorveram grandes porcentagens de massa de água durante a saturação, chegando apenas a valores percentuais próximos de 40% de umidade, pouco acima do ponto de saturação das fibras (PSF). Os gráficos apresentados nas Figura 15, demonstram o comportamento das espécies em relação à umidade, antes e durante as etapas de secagem.

Figura 15 – Variação da umidade por espécies durante a dessecagem.



Legenda: **A** – Espécies: A- Angico, AC- Angelim, AM- Garapeira, C- Cumaru, CP- Castanheira, G- Goiabão, I- Itaúba, J- Jatobá, M- Marupá, MU- Muiracatiara, S- Sucupira. **B**- Umidade das espécies estudadas durante as etapas de secagem. Sendo: Etapas de umidade durante a secagem: 1: umidade inicial, 2: umidade após a saturação, 3: umidade próxima ao ponto de saturação das fibras, 4: umidade abaixo do ponto de saturação das fibras, 5: umidade de equilíbrio.

Fonte: Autora (2023).

Na Figura 15-A, as etapas de umidade foram desconsideradas para observação do comportamento de cada espécie, durante o processo de dessecamento. Confirmando o observado no gráfico de perda de massa (Figura 15-B), a espécie Marupá (*Simarouba amara* Aubl.), por ser uma espécie de baixa densidade, conseqüentemente mais porosa, possui um comportamento distinto das demais espécies, que apresentam densidade superior.

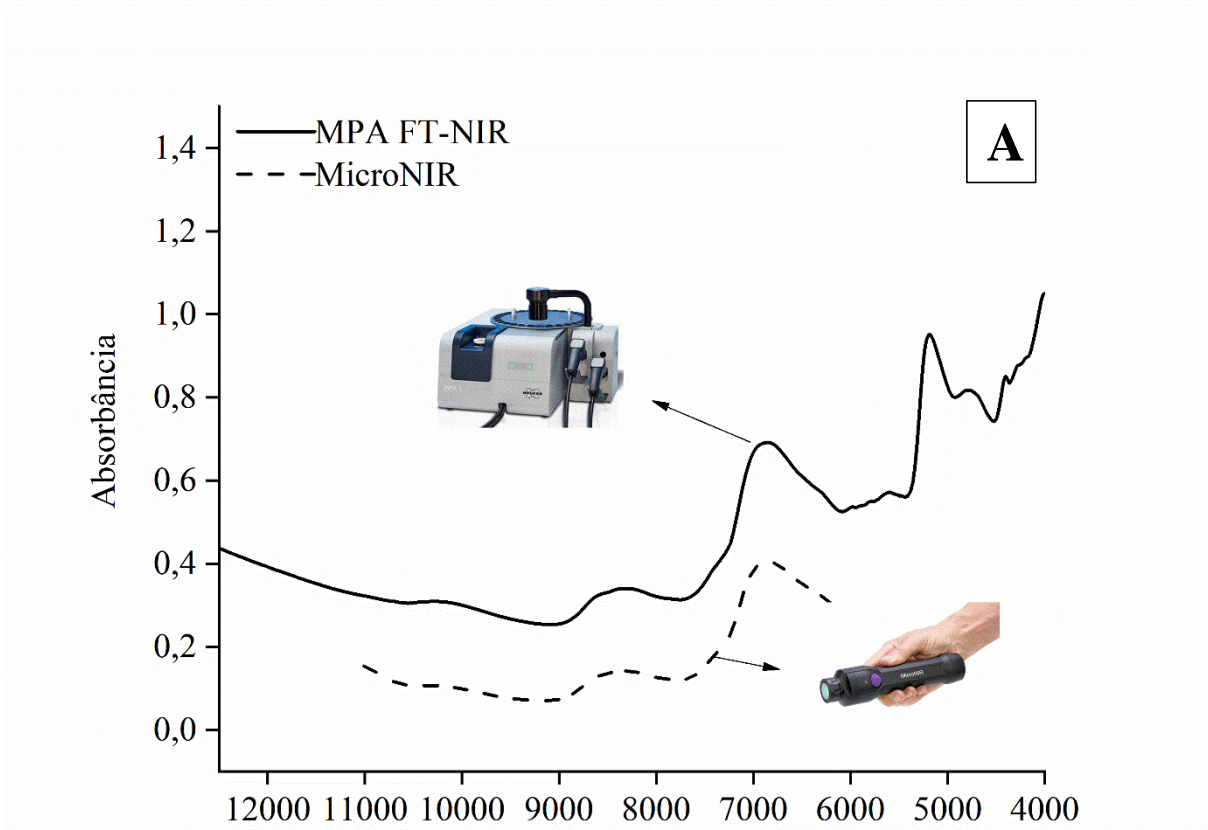
5.2 Assinaturas espectrais

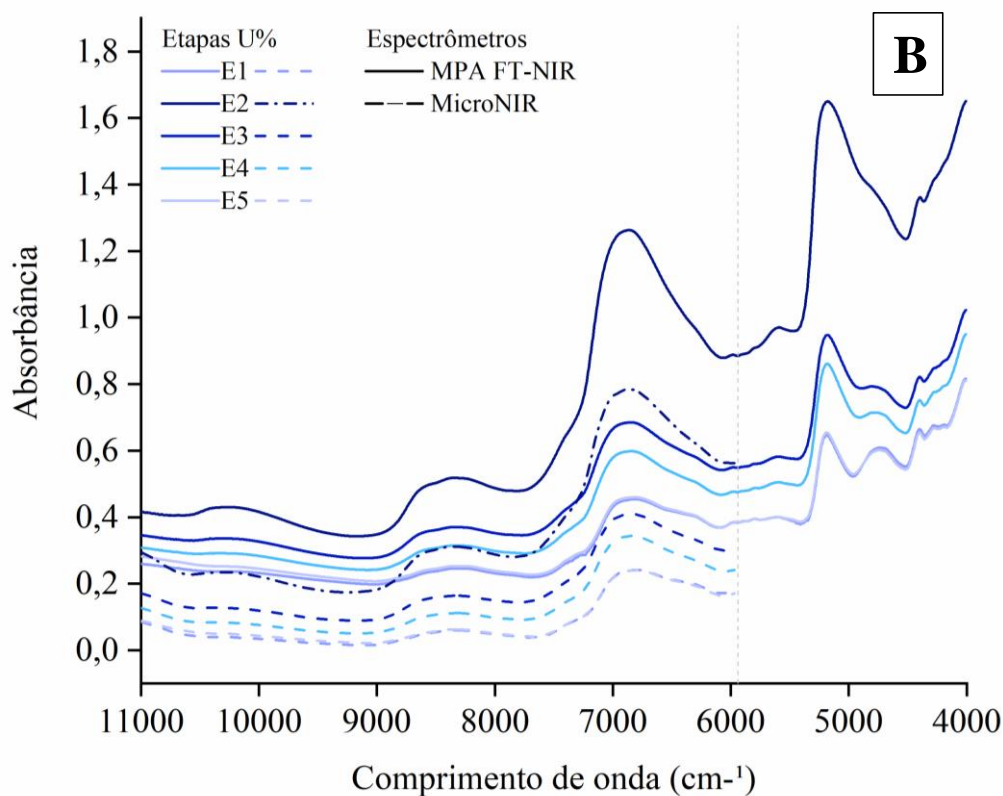
A espectroscopia NIR interage com o material e capta a informação da camada superficial da madeira. A face radial da madeira observa-se as fibras, os elementos de vasos e o parênquima axial, o comprimento longitudinal das células e os raios, como faixas paralelas, apresentando sua altura e comprimento. Na superfície radial, a radiação incide transversalmente

às fibras, parênquima e elementos de vasos, interagindo com a superfície longitudinal desses elementos. Mas não atinge totalmente os raios parenquimáticos, pois a radiação não tem grande penetração, atinge apenas cerca de 3 mm do material (PASQUINI, 2003; COSTA et al., 2018a).

A Figura 15 representa os espectros de absorvância obtidos nos equipamentos MPA FT-NIR e MicroNIR, compreendendo as faixas originais cada espectrômetro dentro da faixa de 12500 a 4.000 cm^{-1} (A), os espectros e os espectros médios de absorvância em diferentes estágios de umidade percentual dentro da faixa espectral de 11000 a 4.000 cm^{-1} (B).

Figura 15 – Espectros de absorvância obtidos nos espectrômetros MPA FT-NIR e MicroNIR.





Legenda: Valores de absorbância médios, por espectrômetro, das espécies estudadas em diferentes estágios de umidade. Da umidade inicial (E1) à umidade de equilíbrio após a saturação (E5).

Fonte: Autora (2023).

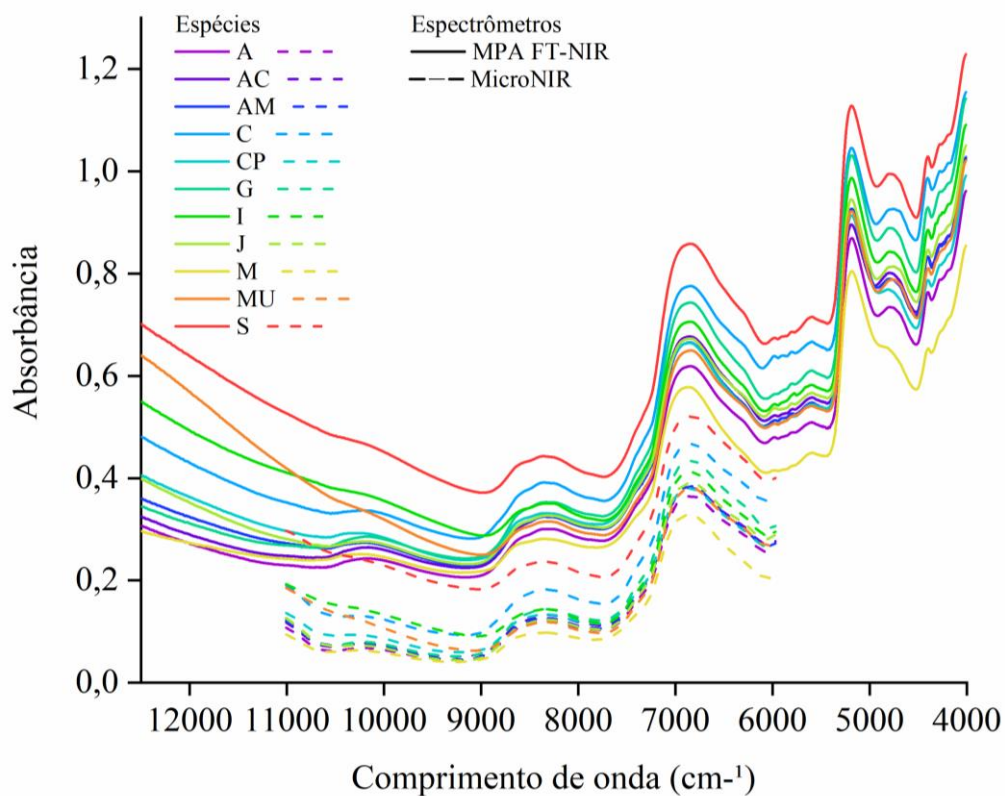
A figura 15-A evidencia o comportamento espectral visualmente distinto, entre as duas vias de obtenção espectral. A resposta obtida no espectrômetro portátil possui faixa reduzida de informações espectrais e picos de absorbâncias menores. Ainda assim, outros trabalhos obtiveram bons resultados ao utilizar uma faixa reduzida, como Nisgoski et al. (2016) que utilizando a faixa entre 4.000 e 6200 cm^{-1} , encontraram resultados adequados para discriminação da espécie Sugi (*Cryptomeria japonica*) proveniente de diversas localidades da região sul do Brasil. Pastore et al. (2011) utilizando a mesma faixa conseguiu distinguir espécies similares de mogno.

Ao observar os espectros obtidos nos diferentes estágios de umidade da madeira, durante o processo de dessecção, representados na figura 15-B, percebe-se que quanto maior o percentual de água presente na madeira, maior é o pico de absorbância espectral. Isso ocorre devido a interação da energia eletromagnética com as moléculas de água presentes na água livre e na água adsorvida da madeira (Soares et al., 2018).

As faixas espectrais correspondentes ao intervalo de 7.000 – 6.000 cm^{-1} apresentam ligações O-H e N-H, que geram vibrações do tipo estiramento, associadas as ligações de hidrogênio que interagem com celulose, hemiceluloses e água (HEIN et al., 2017; SOARES et

al., 2017). Segundo Tsuchikawa e Kobori (2015), a faixa NIR é útil para materiais com altos valores de umidade, justificando sua utilização em madeiras que apresentem valores de umidade acima da umidade de equilíbrio. Os espectros presentes no intervalo de $7.000 - 5.300 \text{ cm}^{-1}$ possuem alta correlação com os principais constituintes químicos da madeira, o que pode auxiliar a distinguir as madeiras (TSUCHIKAWA; KOROBI, 2015). A figura 17 apresenta os espectros de absorvância do espectrômetro portátil.

Figura 17 – Espectros de absorvância por espécie obtidos nos equipamentos MPA FT-NIR e MicroNIR.



Legenda: Valores de absorvância médios das espécies estudadas da umidade inicial (E1) à umidade de equilíbrio após a saturação (E5).

Fonte: Autora (2023).

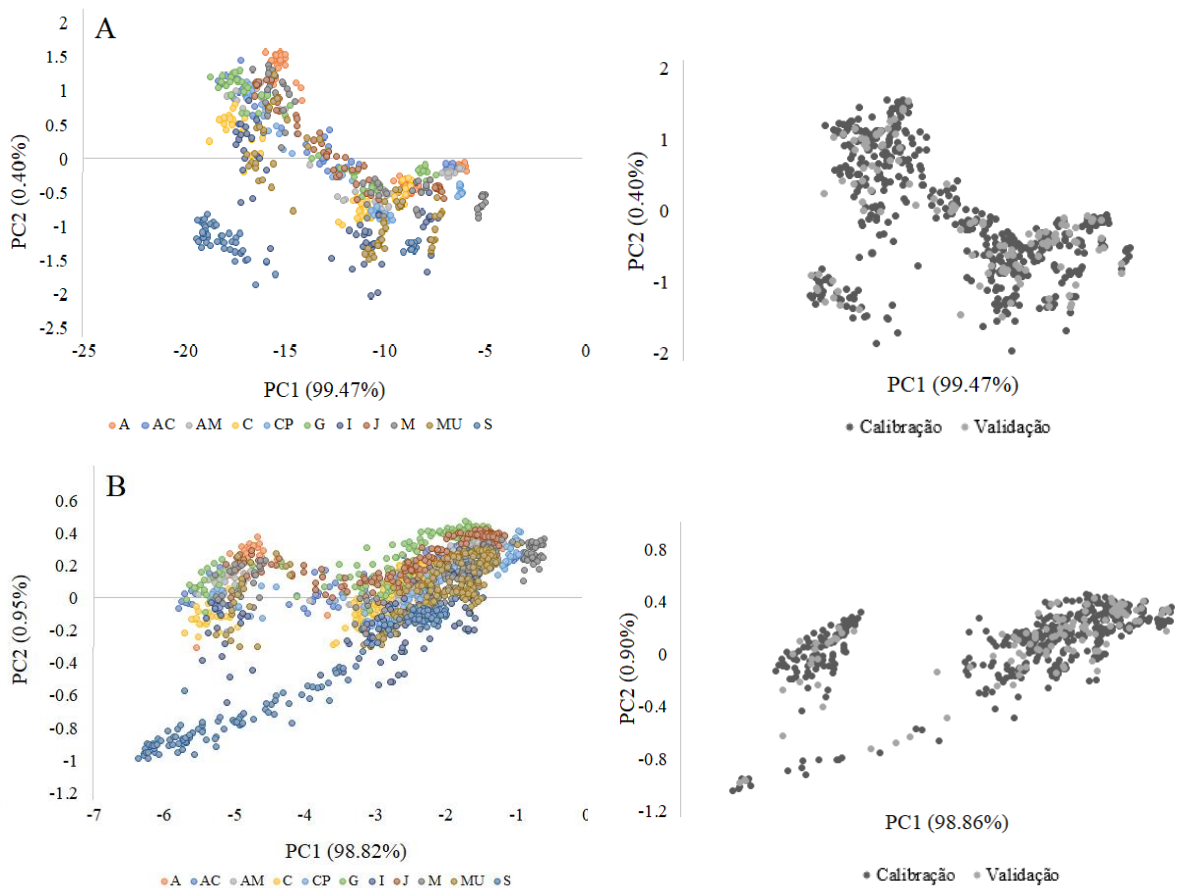
Conforme Mehrotra et al. (2010) o pico de absorvância próximo ao comprimento de onda 8.333 cm^{-1} refere-se ao segundo sobretom de vibração de estiramento C-H em celulose ou lignina. E o pico de absorção presente em torno de 6.848 cm^{-1} está relacionado ao primeiro sobretom do trecho OH na celulose, hemiceluloses e água. Os comprimentos de onda 8.749 e 8.547 cm^{-1} estão relacionadas aos grupos aromáticos da lignina. Os comprimentos de onda 7000 cm^{-1} e 6287 cm^{-1} correlacionam-se com as regiões amorfa e cristalina da celulose,

respectivamente. Os picos entre 6.800 e 4.401 cm^{-1} são atribuídas às hemiceluloses; regiões próximas a 6.110-5.697 cm^{-1} e 4.335-4.146 cm^{-1} estão relacionadas a todos os componentes da parede celular, e o comprimento de onda 5.995 cm^{-1} está relacionado aos extrativos (PASQUINI, 2003; ADEDIPE et al., 2008; ZHOU et al., 2020; LIMA et al., 2022).

5.3 Análises de componentes principais (PCA)

A análise exploratória pela PCA foi realizada nos espectros para investigar a variância nos dados espectrais e discriminar os agrupamentos por espécie. As espécies ficaram distribuídas no gráfico PC1 x PC2 em função do gradiente de densidade das amostras de madeira. A primeira componente principal dos dados espectrais obtidos no espectrômetro MPA FT-NIR captou 99,41% da variação espectral, enquanto a PC1 dos dados espectrais obtidos no espectrômetro MicroNIR captou 98,82% da variabilidade entre as amostras (Figura 18). Valores próximos aos encontrados por Novaes et al. (2022).

Figura 18 – PCA dos dados obtidos nos espectrômetros MPA FT-NIR (A) e MicroNIR (B).



Legenda: Análise de componentes principais das espécies, sem tratamento matemático.

Fonte: Autora (2023).

A análise de componentes principais (PCA) dos lotes de calibração e validação dos espectros obtidos nos dois equipamentos, com o objetivo de desenvolver modelos discriminantes globais, demonstra que a sistematização para separação dos lotes foi efetiva. Os dados estão bem distribuídos, o que contribui para as etapas de treinamento dos modelos e posteriores análises. Contudo, a separação entre as espécies não se mostrou muito evidente na PCA. Essa falta de clareza pode indicar que as características espectrais não foram suficientes para discriminar as espécies de forma clara, ressaltando a complexidade da composição das madeiras e a necessidade de métodos complementares para uma identificação mais precisa.

Como observado por Candolfi et al. (2020), ao aplicar a PCA para classificar madeira de diferentes espécies, a separação entre as classes não foi clara. Hein et al. (2021) também enfrentaram dificuldades, pois não conseguiram uma separação satisfatória entre as espécies analisadas, devido à sobreposição nas características espectrais. No estudo desenvolvido por Nagaoka et al. (2023), a PCA não se mostrou eficaz na separação correta de algumas espécies, devido à variabilidade na composição química e propriedades das madeiras analisadas.

5.4 Análise discriminante por mínimos quadrados parciais (PLS-DA)

A Tabela 7 apresenta as taxas de acertos na predição das onze espécies em cinco diferentes etapas de umidade. Nela, são mostrados os desempenhos dos espectrômetros na discriminação das espécies, destacando as variações de eficiência conforme as condições de umidade. As etapas consideradas incluem a umidade inicial, máximo teor de umidade após a saturação, ponto de saturação das fibras e umidade de equilíbrio.

Tabela 7 - Modelos PLS-DA por Equipamento em Diferentes Etapas de Umidade da Madeira das Onze Espécies Amazônicas.

Equip.	Etapa (U%)	(U%)	Faixa espectral (cm ⁻¹)	Trat.	Nc	Np	LV	Acertos %	
								Cc	Cp ¹
MPA FT-NIR	E1	12	11008 -4008	1D 25.2.1	88	22	9	100	100
	E2	42		MSC	88	22	9	99	91
	E3	32		MSC	88	22	9	92	95
	E4	23		1D 25.2.1	88	22	9	95	86
	E5	12		MSC	88	22	9	99	100
MicroNIR	E1	12	11008-5975	-	88	22	9	94	91
	E2	42		2D 15.2.2	88	22	9	97	91
	E3	32		2D 15.2.2	88	22	9	97	95
	E4	23		SNV + 2D	88	22	9	97	95
	E5	12		-	88	22	9	97	100

Sendo: B = MPA FT-NIR; M= MicroNIR; Etapa U% = Etapa de leitura espectral em diferentes umidades (1- umidade inicial, 2 - máximo teor de umidade, 3 – ponto de saturação das fibras, 4 – umidade abaixo do ponto de saturação das fibras, 5 – umidade de equilíbrio); 1D = 1ª derivada de Savitzky e Golay; 2D = 2ª derivada de

Savitzky e Golay ; SNV = Standard Normal Variate; U% = Umidade da madeira; LV = variáveis latentes; Trat. = tratamentos matemáticos; Nc = número de espectros utilizados na calibração; Np = número de espectros utilizados na predição; Cc = porcentagem de acertos na calibração; Cp¹= porcentagem de acertos na validação independente;

Os modelos PLS-DA desenvolvidos para cada etapa de umidade (U%), resultaram em valores superiores a 90% de acertos na calibração (Tabela 7). Na validação os valores percentuais de acertos foram superiores a 85%, chegando a 100% de acerto nos modelos desenvolvidos a partir dos espectros obtidos no espectrômetro MPA FT-NIR, após aplicação de tratamento matemático, para as etapas 1 e 5, onde as espécies estavam próximas a umidade de equilíbrio. Esses resultados indicam que o tratamento matemático pode melhorar a qualidade do sinal dos espectros NIR, permitindo boa identificação de espécies por meio dos modelos PLS-DA. O espectrômetro MicroNIR apresentou valores de predição satisfatórios, com percentuais acima de 90% de acerto na predição dentre as cinco etapas de umidade, mesmo possuindo uma faixa de alcance espectral menor que o MPA. Lima et al. (2022) ao desenvolver modelos para espécies amazônicas, utilizando espectros na umidade de equilíbrio, também encontraram taxas de acertos superiores a 90%. Soares et al. (2017) ao utilizar um equipamento espectral portátil para desenvolver modelos PLS-DA na umidade de equilíbrio, para seis espécies nativas da Amazônia, também obtiveram taxas de eficiência satisfatórias, entre 93 e 99% de acertos.

No presente trabalho, os percentuais obtidos demonstram que ambos os equipamentos foram eficientes para o desenvolvimento dos modelos em diferentes estágios de umidade da madeira, visando à discriminação das espécies amazônicas. A performance dos modelos PLS-DA variou conforme a etapa de umidade, com o espectrômetro MPA FT-NIR apresentando melhores resultados nas etapas de umidade de equilíbrio da madeira (E1 e E5). Nas etapas intermediárias (E2 e E3), os desempenhos foram semelhantes, evidenciando a influência da umidade nas classificações e a importância das condições experimentais na obtenção de resultados confiáveis.

A Tabela 8 apresenta os valores percentuais de predição dos modelos globais de cada espectrômetro para discriminação das espécies amazônicas.

Tabela 8 – Modelos PLS-DA Globais por equipamento.

Mod.	Equip.	Faixa espectral (cm ⁻¹)	N	Np	Etapa U%	Trat.	LV	Acertos %	
								Cc	Cp
1						ST	9	75	78
2	MPA FT- NIR	11008 - 4008	440	110	Etapas 1 a 5	SNV	9	83	85
MSC						9	83	85	
1D (25.2.1)						9	70	69	

5						SNV + 1D	9	78	81
6						ST	9	74	71
7						SNV	9	67	63
8	MicroNIR	11008-5975	440	110	Etapas 1 a 5	MSC	9	70	73
9						2D (15.2.2)	9	70	69
10						SNV + 2D	9	72	75

Legenda: B = MPA FT-NIR; M= MicroNIR; Etapa (U%) = Etapa de leitura espectral em diferentes umidades (1-umidade inicial, 2 - máximo teor de umidade, 3 – ponto de saturação das fibras, 4 – umidade abaixo do ponto de saturação das fibras, 5 – umidade de equilíbrio); 1D = 1ª derivada de Savitzky e Golay; 2D = 2ª derivada de Savitzky e Golay; SNV = Standard Normal Variate; LV = variáveis latentes; Cc = porcentagem de acertos na calibração; Cp = porcentagem de acertos na validação independente.

Os modelos foram desenvolvidos utilizando as cinco etapas de umidade anteriormente citadas. Para o espectrômetro MPA FT-NIR (B) a aplicação do tratamento matemático SNV (Standard Normal Variate) proporcionou um modelo com maior porcentagem de acertos na predição (85%). Nos modelos globais desenvolvidos a partir dos espectros obtidos no espectrômetro portátil, o tratamento matemático da 1ª derivada de Savitzky-Golay melhorou a predição das espécies, obtendo percentual de 75% de acerto na predição.

Os modelos desenvolvidos a partir do espectrômetro de bancada apresentou valores de predição entre 69 e 85% de acertos na predição. Os modelos desenvolvidos a partir do espectrômetro portátil apresentaram valores entre 63 e 75% de acertos na discriminação das espécies. Entretanto, os modelos PLS-DA elaborados com os espectros do espectrômetro MPA FT-NIR demonstraram um desempenho superior em comparação aos modelos do MicroNIR. Essa diferença de desempenho entre os espectrômetros pode ser atribuída à qualidade dos dados espectrais gerados, à eficácia dos tratamentos matemáticos aplicados e à capacidade de cada equipamento em capturar as variações espectrais que diferenciam as espécies de madeira. Hein et al. (2021) destacaram como a resolução e a qualidade dos espectros são cruciais para a discriminação de espécies. Candolfi et al. (2020) também observaram que diferentes equipamentos podem ter desempenho variado dependendo das condições experimentais.

Ramalho et al. (2018), ao utilizar modelos PLS-DA para classificar amostras de madeira das espécies nativas *Jacaranda* sp., *Aspidosperma* sp. e *Apuleia* sp., a partir de espectros NIR não tratados, obtiveram modelos eficientes com altos índices de classificação correta, com valores entre 86% a 100% de acertos, valores próximos aos encontrados neste trabalho. Entretanto, é perceptível que ao incluir diferentes condições de umidade no modelo, os percentuais de acerto, tanto na calibração quanto na predição, dos modelos PLS-DA é menor que nos modelos desenvolvidos para estágios de umidade específicos. Evidenciando a influência da umidade na diferenciação de espécies nativas.

Em análises qualitativas, as regiões restritas do espectro são direcionadas para classificar ou identificar a amostra desconhecida, combinando a localização e a força dos picos de absorvância com os das substâncias conhecidas (Tsuchikawa, S. et al., 2003). Os picos de maiores absorvâncias encontrados no estágio de máximo teor de água presente na madeira, onde às ligações com as hidroxilas (-OH) causam interferência na intensidade de absorção da energia eletromagnética (IGNE et al., 2014; ZHOU et al., 2020) e variação no espectro. Essas variações espectrais perturbam o sinal e diminuem a precisão dos modelos. Cooper et al. (2011) afirmam que a ampla aplicabilidade e resposta da técnica a vários fatores distintos pode ser um ponto negativo, pois, fatores como a superfície e diferenças de densidade, bem como diferentes estágios de umidade da madeira, podem afetar as variáveis de resposta. A Tabela 9 apresenta as matrizes de confusão referente aos modelos PLS-DA globais de melhor desempenho na predição das espécies, desenvolvidos com os espectros obtidos no espectrômetro MPA FT-NIR.

Tabela 9 – Matriz de confusão: Calibração e Validação do Modelos globais PLS-DA MPA FT-NIR global (SNV)

Cal.	A	AC	AM	C	CP	G	I	J	M	MU	S	n	n Acertos	% Acertos
A	33					1	3	2			1	40	33	83
AC	12	19				9						40	19	48
AM			24		4	3			8		1	40	24	60
C				40								40	40	100
CP		4			11			8	17			40	11	28
G						40						40	40	100
I						2	38					40	38	95
J								40				40	40	100
M									40			40	40	100
MU										40		40	40	100
S											40	40	40	100
Total												440	365	83
Val.	A	AC	AM	C	CP	G	I	J	M	MU	S	n	n Acertos	% Acertos
A	10											10	10	100
AC	3	4				3						10	4	40
AM			9		1							10	9	90
C				10								10	10	100
CP					4			2	4			10	4	40
G						10						10	10	100
I				1		1	8					10	8	80
J								10				10	10	100
M									10			10	10	100
MU										10		10	10	100
S							1				9	10	9	90
Total												110	94	85

Legenda: Cal.= Matriz de confusão do lote de calibração do modelo; Val.= Matriz de confusão do lote de validação do modelo; A – Angico; AC – Angelim; AM – Amarelão; C – Cumaru; CP – Castanheira; G – Goiabão; I – Itaúba;

J – Jatobá; M – Marupá; MU – Muiracatiara; S – Sucupira; n = número de espectros utilizados; n acertos = número de amostras preditas corretamente; % Acertos = percentual de amostras preditas corretamente.

A interferência na intensidade do sinal e o deslocamento da linha de base do espectro, relacionada a presença de água na madeira, podem distorcer as informações contidas nos espectros e confundir o modelo (Thygesen e Lundavist, 2000). Na matriz de confusão (Tabela 9), observa-se que no modelo desenvolvido com os espectros obtidos no equipamento primário (MPA FT-NIR), a espécie *Bertholletia excelsa* (Castanheira), espécie de densidade moderadamente pesada, apresentou a menor taxa de eficiência, com apenas 28% de acertos na calibração. Sendo que, dezessete dos 40 espécimes pertencentes a esta espécie foi confundido e classificado como *Simarouba amara* Aubl., oito como *Hymenaea* sp. e quatro como *Hymenolobium* sp. (AC). Erros bem acentuados, visto que são espécies de classes de densidade diferentes da espécie alvo.

Apenas as espécies *Dipteryx odorata* (C), *Pouteria pachycarpa* (G), *Hymenaea* sp. (J), *Simarouba amara* (M), *Astronium lecointei* (MU) e *Bowdichia nitida* (S) foram classificadas corretamente, obtendo 100% de acertos na calibração do modelo. Na validação do modelo, 60% dos espectros das espécies *Hymenolobium* sp. (AC) e *Bertholletia excelsa* (CP) foram classificadas erroneamente, como amostras de madeira das espécies *Anadenanthera columbrina* (A) e *Pouteria pachycarpa* (G), *Hymenaea* sp. (J) e *Simarouba amara* (M), respectivamente. A Tabela 10 apresenta as matrizes de confusão referente aos modelos PLS-DA globais de melhor desempenho na predição das espécies, desenvolvidos com os espectros obtidos no espectrômetro MicroNIR.

Tabela 10 – Matriz de confusão: Calibração e Validação do Modelos globais PLS-DA MicroNIR global (SNV+ 2D 15.2.2)

Cal.	A	AC	AM	C	CP	G	I	J	M	MU	S	n	n Acertos	% Acertos
A	30	6				1		2			1	40	30	75
AC	7	19			1	10		1	2			40	19	48
AM	1	3	6	13	4	3			8		2	40	6	15
C				40								40	40	100
CP		5			13	11			9	2		40	13	33
G						40						40	40	100
I						1	38				1	40	38	95
J	1			19				14	6			40	14	35
M						2			38			40	38	95
MU									1	39		40	39	98
S							1			1	38	40	38	95
Total												440	315	72
Val.	A	AC	AM	C	CP	G	I	J	M	MU	S	n	n Acertos	% Acertos
A	7	2				1						10	7	70

AC	3	4			3				10	4	40
AM			4	4			1	1	10	4	40
C				10					10	10	100
CP		1			4	2	1	1	1	10	40
G						10			10	10	100
I							10		10	10	100
J			2				3	4	1	10	30
M								10		10	100
MU									10	10	100
S										10	100
Total									110	82	75

Legenda: Cal.= Matriz de confusão do lote de calibração do modelo; Val.= Matriz de confusão do lote de validação do modelo; A – Angico; AC – Angelim; AM – Amarelão; C – Cumaru; CP – Castanheira; G – Goiabão; I – Itaúba; J – Jatobá; M – Marupá; MU – Muiracatiara; S – Sucupira; n = número de espectros utilizados; n acertos = número de amostras preditas corretamente; % Acertos = percentual de amostras preditas corretamente.

Nas matrizes de confusão referentes ao modelo desenvolvidos para os espectros coletados por meio do espectrômetro portátil (Tabela 10), apenas duas espécies, *Dipteryx odorata* (C) e *Pouteria pachycarpa* (G), apresentaram 100% de classificação correta na calibração. A espécie *Bertholletia excelsa* (CP) foi o destaque negativo, apresentando apenas 33% de acertos. Na validação do modelo, o destaque negativo foi da espécie *Hymenaea* sp. (J), que confundiu e classificou erroneamente como *Simarouba amara* (M), *Astronium lecointei* (MU) e *Dipteryx odorata* (C), sendo que as espécies M e MU pertencem a mesma classe de densidade da espécie Jatobá, o que pode ter confundido o modelo, devido terem valores de densidade próximos.

A eficiência dos modelos discriminantes também pode ser avaliada a partir das taxas de eficiência do modelo, que está relacionada a sensibilidade, especificidade e acurácia do modelo na predição das espécies. A tabela 11 apresenta os valores percentuais das taxas de eficiência dos modelos desenvolvidos para os dois espectrômetros.

Tabela 11 – Indicadores de desempenho dos modelos globais (%)

Modelo	TA	TEF	SEN	SPEC	ACCU
MPA FT-NIR global (s/trat.)	78	86	78	98	96
MPA FT-NIR global (SNV)	85	91	85	99	97
MicroNIR global (s/trat.)	71	81	71	97	95
MicroNIR global (SNV + 2D)	75	84	75	97	95

Legenda: s/trat. = sem tratamento matemático; SNV = Standard Normal Variate; 2D = 2ª derivada de Savitzky e Golay; TA= taxa de acertos; TEF= taxa de eficiência; SEN= sensibilidade; SPEC= especificidade; ACCU = acurácia.

A eficiência do modelo na discriminação está relacionada aos erros de previsão, que ela ligada a dispersão amostral, à distância do valor real ao esperado, a presença de sobreajuste e

menor número de outliers. Ambos os equipamentos apresentaram modelos discriminantes satisfatórios, com taxas de eficiência acima de 80% (Tabelas 9 e 10), o que demonstra a confiabilidade dos sensores utilizados. Soares et al. (2017) também obtiveram taxas de eficiência próximas a 90% para as espécies amazônicas com espectros obtidos a partir de espectrômetro portátil combinado a PLS-DA para discriminar espécies de madeira. Zhou et al. (2020) utilizaram a PLS-DA para classificar de forma rápida espécies de cicuta ocidental e amabilis, atingiu o desempenho de 83,13% de precisão. Valores próximos ao que foi encontrado neste trabalho.

5.5 Transferência de calibração

Para se obter calibrações robustas a partir da transferência de calibração é preciso levar em consideração as diferentes fontes de variações, como a umidade, para inferir quanto a viabilidade e praticabilidade da transferência de calibração de um instrumento de bancada para instrumentos espectrais NIR portáteis (Yang et al., 2023). Identificar corretamente todas as fontes de variação significativas para o modelo, é uma das limitações encontradas.

A padronização dos espectros permite que os dados obtidos no equipamento secundário possuam características espectrais similares aos dados obtidos no equipamento primário, compatibilizando as respostas espectrais dos espectrômetros e possibilitando a junção dos dados para desenvolver um modelo atualizado. Considerando a inclusão de tantas variáveis, como diversidade de espécies, condições de umidade distintas, sensores espectrais diferentes, modelos globais tendem a ser menos precisos que modelos locais.

A Tabela 12 apresenta os valores percentuais para os modelos globais desenvolvidos a partir da transferência de calibração utilizando o método *updating*.

Tabela 12 – Modelos PLS-DA Updating Padrão Nc1

Mod	Etapa (U%)	Faixa espectral (cm ⁻¹)	N	Np ¹	Np ²	Trat.	LV	Acertos %		
								Cc	Cp ¹	Cp ²
1						-	9	71	65	48
2						SNV	9	63	64	48
3	(1,2,3,4,5)	11008 -5967	462	110	110	MSC	9	64	65	43
4						1 D (25.2.1)	9	77	85	31
5						SNV+1 D	9	69	68	39

Sendo: B = Bruker; M= MicroNIR; Etapa (U%) = Etapa de leitura espectral em diferentes umidades (1- umidade inicial, 2 - máximo teor de umidade, 3 – ponto de saturação das fibras, 4 – umidade abaixo do ponto de saturação das fibras, 5 – umidade de equilíbrio); 1D = 1ª derivada de Savitzky e Golay (15.2.1); 2D = 2ª derivada de Savitzky e Golay (15.3.2); LV = variáveis latentes; Cc = porcentagem de acertos na calibração; Ccv = porcentagem de acertos na validação cruzada; Cp¹ = porcentagem de acertos na validação independente lote 1; Cp² = porcentagem de acertos na validação independente lote 2.

Os modelos apresentaram valores percentuais de acertos entre 64 e 85% para o lote de validação originários do equipamento primário, espectros obtidos no espectrômetro MPA FT-NIR (lote 1) e valores entre 31 e 48% de acerto nas predições utilizando o lote de espectros obtidos no espectrômetro MicroNIR (lote 2), na validação independente (Tabela 12). Apesar do método utilizado viabilizar a transferência de calibração, o desempenho da validação utilizando o lote de espectros obtidos a partir do espectrômetro portátil foi inferior a 50% de acertos. A tabela 13 apresenta os índices de eficiência dos modelos de transferência desenvolvidos.

Tabela 13 – Indicadores de desempenho dos modelos de transferência na validação (%)

Modelo Updating	TA	TEF	SEN	SPEC	ACCU
Validação Lote 1 (s/trat.)	65	72	65	97	94
Validação Lote 1 (1D)	85	91	85	98	97
Validação Lote 2 (s/trat.)	48	59	48	95	91
Validação Lote 2 (1D)	31	42	31	93	87

Legenda: s/trat. = sem tratamento matemático; SNV = Standard Normal Variate; 1D = 1ª derivada de Savitzky e Golay (25.2.1); TA= taxa de acertos; TEF= taxa de eficiência; SEN= sensibilidade; SPEC= especificidade; ACCU = acurácia.

O modelo updating validado pelo lote 1, após a aplicação do tratamento matemático, a apresentou o melhor percentual de taxa de eficiência e acerto na predição, com valores respectivos a 91% e 85%. Os demais índices também resultaram em valores satisfatórios. Ao avaliar o desempenho da validação a partir do lote de espectros obtidos pelo espectrômetro portátil, percebe-se que taxa de eficiência do modelo é menor que 60% e taxa de acerto equivalente a 31%, bem abaixo do encontrado no lote 1. A Tabela 14 apresenta as matrizes de confusão referente ao modelo de transferência desenvolvido com tratamento matemático da 1ª derivada (25.2.1).

Tabela 14 - Matriz de confusão: Calibração e Validação do Modelos de transferência PLS-DA.

Cal	A	AC	AM	C	CP	G	I	J	M	MU	S	n	n Acertos	% Acertos
A	13				4	1		17	6			41	13	32
AC		23		1		12			4			40	23	58
AM			11	15	7	2			5	1		41	11	27
C				40						1		41	40	98
CP		1			19				20	3		43	19	44
G						41		1		1		43	41	95
I							43				2	45	43	96
J								42		1		43	42	98
M									1	41		42	41	98
MU									1		40	41	40	98

S													42	42	42	100
Total														462	355	77
Validação Lote 1																
Val	A	AC	AM	C	CP	G	I	J	M	MU	S	n	n Acertos	% Acertos		
A	6							4				10	6	60		
AC		6						4				10	6	60		
AM			6	1	3							10	6	60		
C				10								10	10	100		
CP					5				5			10	5	50		
G						10						10	10	100		
I							10					10	10	100		
J								10				10	10	100		
M									10			10	10	100		
MU										10		10	10	100		
S											10	10	10	100		
Total												110	93	85		
Validação Lote 2																
Val	A	AC	AM	C	CP	G	I	J	M	MU	S	n	n Acertos	% Acertos		
A								3	2	4	1	10	0	0		
AC		2						4		2	2	10	2	20		
AM								2		8		10	0	0		
C								5		5		10	0	0		
CP								2	2	6		10	0	0		
G						4		2		4		10	4	40		
I							3	1		4	2	10	3	30		
J								3		7		10	3	30		
M								2	8			10	8	80		
MU								3	1	6		10	6	60		
S								1	1		8	10	8	80		
Total												110	34	31		

Legenda: Cal.= Matriz de confusão do lote de calibração do modelo; Val. Lote 1= Matriz de confusão do lote de validação do modelo com espectros MPA FT-NIR; Val. Lote 2= Matriz de confusão do lote de validação do modelo com espectros MicroNIR; A – Angico; AC – Angelim; AM – Amarelão; C – Cumaru; CP – Castanheira; G – Goiabão; I – Itáuba; J – Jatobá; M – Marupá; MU – Muiracatiara; S – Sucupira; n = número de espectros utilizados; n acertos=número de amostras preditas corretamente; % Acertos= percentual de amostras preditas corretamente.

Na calibração do modelo, entre os exemplares utilizados, a espécie *Apuleia leiocarpa* (AM) apresentou 73% de classificações incorretas, confundindo quinze espectros referentes a esta espécie com a espécie *Dipteryx odorata* (C), sete com a espécie *Bertholletia excelsa* (CP), duas com *Pouteria pachycarpa* (G), cinco da *Simarouba amara* (M) e um com a espécie *Astronium lecointei* (MU). Apenas a espécie *Bowdichia nitida* (S) foi predita corretamente com 100% de acertos.

Na validação independente utilizando o lote 1, com espectros obtidos no espectrômetro primário (MPA), a espécie *Bertholletia excelsa* (CP) apresentou o menor valor de predição (50%), confundindo os outros cinco espectros com a espécie *Simarouba amara* (M). Isso pode

ser justificado pela sobreposição dos espectros nos picos de umidade, o que confunde o modelo e possibilita uma classificação errônea. Na validação independente utilizando o lote 2, com espectros obtidos a partir do equipamento secundário (MicroNIR), quatro espécies não obtiveram nenhum acerto na predição. Sendo elas: *Anadenanthera columbrina* (A) – classificando três como *Hymenaea* sp (J), dois como *Simarouba amara* (M), quatro como *Astronium lecointei* (MU), um como S; *Apuleia leiocarpa* (AM) - dois como *Hymenaea* sp (J), oito como *Astronium lecointei* (MU); *Dipteryx odorata* (C) – cinco como *Hymenaea* sp (J), cinco como *Astronium lecointei* (MU); *Bertholletia excelsa* (CP) – dois como *Hymenaea* sp (J), dois como *Simarouba amara* (M), seis como *Astronium lecointei* (MU). Pode-se observar que o erro obtido na validação do lote 2 é uma ordem de grandeza maior que o erro no lote de validação obtido no equipamento mestre. O que evidencia que há variações de intensidade de sinal, nos espectros obtidos no portátil, que não estão relacionadas com a propriedade de interesse.

A análise dos resultados obtidos por meio da espectroscopia NIR destaca a importância de considerar as variações na intensidade do sinal, ao utilizar equipamentos portáteis em comparação com espectrômetros de bancada. A discrepância nos erros de validação entre os lotes sugere que, embora a técnica de espectroscopia NIR seja promissora para a classificação de espécies de madeira, os desafios associados ao pré-processamento de dados e à calibração dos modelos ainda precisam ser abordados.

Os estudos anteriormente mencionados corroboram a ideia de que a precisão da predição é frequentemente influenciada pela qualidade do espectro e pelas características do equipamento utilizado. Portanto, é fundamental a integrar abordagens que incluam tratamentos matemáticos avançados, técnicas de calibração mais robustas e métodos de transferência de calibração, visando aprimorar e otimizar a identificação de espécies em estudos futuros. Essa integração promoverá a utilização eficiente dos recursos florestais, além de ampliar as perspectivas para a aplicação da espectroscopia NIR como ferramenta essencial nas ciências florestais.

6 CONCLUSÕES

Os espectrômetros Viavi MicroNIR e MPA FT-NIR utilizados para coleta das informações espectrais da madeira mostraram-se eficientes para coleta ágil e precisa dos dados, em tempo real. Ambos os equipamentos apresentaram modelos discriminantes satisfatórios, com taxas de eficiência acima de 80%, o que demonstra a confiabilidade dos sensores utilizados. Portanto, conclui-se que é possível desenvolver modelos discriminantes PLS-DA

robustos para discriminar espécies amazônicas, independente da condição inicial de umidade da madeira.

O espectrômetro Viavi MicroNIR portátil mostrou-se viável e eficiente para obtenção de dados espectrais de forma rápida e precisa, possibilitando o desenvolvimento de modelos multivariados para análises qualitativas. Ao desenvolver modelos para estágios de umidade específicos, também apresentou bom desempenho, na discriminação de espécies. Por isso, pode ser uma estratégia promissora para identificar espécies arbóreas nativas, mesmo diante de uma vasta diversidade de espécies nas florestas alvo e frente a condições climáticas distintas.

O método *updating* viabilizou a transferência de calibração entre os equipamentos MPA FT-NIR e MicroNIR. Entretanto, a validação com o lote de espectros obtidos no equipamento secundário não apresentou valores percentuais de eficiência do modelo satisfatórios.

Como sugestão para trabalhos futuros, a utilização de uma abordagem alternativa, outros métodos de transferência, podem resultar em predições melhores e mais eficientes ao implementar espectros de faixa espectral reduzida e resolução diferente em conjuntos espectrais que compreendem toda a faixa espectral do infravermelho próximo.

REFERÊNCIAS

- ABASOLO, Myralyn et al. Deviant near-infrared spectra identifies *Corymbia* hybrids. *Forest ecology and management*, v. 304, p. 121-131, 2013.
- ABNT, NBR. Projeto de estruturas de madeira. ABNT NBR, v. 7190, p. 1997, 1997.
- ACQUAH, G. E. et al. Identifying plant part composition of forest logging residue using infrared spectral data and linear discriminant analysis. *Sensors*, v. 16, n. 9, p. 1375, 2016.
- ADEDIPE, O. E. et al. Classification of red oak (*Quercus rubra*) and white oak (*Quercus alba*) wood using a near infrared spectrometer and soft independent modelling of class analogies. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, v.16, n.1, p. 49-57, 2008.
- ALTMAN, D. G.; BLAND, J. M. (1994). Statistics notes: Diagnostic tests 1: sensitivity and specificity. *BMJ*, 308(6943), 1552.
- ANDRADE C. R. et al. Estimation of the mechanical properties of wood from *Eucalyptus urophylla* using near infrared spectroscopy. *Revista Ceres*, v. 16, n. 3, p. 291-298, 2010.
- ANDREW, A.; FEARN, T. Transfer by orthogonal projection: making near-infrared calibrations robust to between-instrument variation. *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, v. 72, n. 1, p. 51-56, 2004.
- ARAÚJO, H. J. B. de. Caracterização do material madeira. In: SEABRA, G. (org.). Educação ambiental: o desenvolvimento sustentável na economia globalizada. Ituiutaba, MG: Barlavento, p. 31-44, 2020.
- ARRIEL, T. G. et al. Developing near infrared spectroscopic models for predicting density of *Eucalyptus* wood based on indirect measurement. *Cerne*, v. 25, p. 294-300, 2019.
- ASNER, G. P. et al. Extração seletiva de madeira e sua relação com desmatamento. *Amazonia and Global Change*, v. 186, p. 1-20, 2009.
- AYANLEYE, S. et al. 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.
- BACHA, C. J. C. et al. Informativo CEPEA: Setor Florestal. Centro de Estudos Avançados em Economia Aplicada – Cepea, Esalq/USP, n. 223, 2020.
- BAILLÈRES, H.; DAVRIEUX, F.; HAM-PICHAVANT, F. Near infrared analysis as a tool for rapid screening of some major wood characterists in a *Eucalyptus* breeding program. *Annals of Forest Science*, v. 59, p. 479-490, 2002.
- BARROS, C. Medida do Ibama permitiu a madeireiras exportar 100 mil toneladas de madeira da Amazônia. Agência Pública. 2021. Disponível em:< https://apublica.org/2021/11/4-anos-em-15-meses/?utm_source=twitter&utm_medium=post&utm_campaign=akuanduba>. Acesso jun/2023.

BARNES, R. J.; DHANOA, M. S.; LISTER, S. J. Standard normal variate transformation and de-trending of near-infrared diffuse reflectance spectra. *Applied spectroscopy*, v. 43, n. 5, p. 772-777, 1989.

BEĆ, K.B.; GRABSKA, J.; HUCK, C.W. Near-Infrared Spectroscopy in Bio-Applications. *Molecules*, v. 25, n. 12, 2020. <https://doi.org/10.3390/molecules25122948>.

BERGMAN, E. L. et al. Transfer of NIR calibrations for pharmaceutical formulations between different instruments. *J. Pharm. Biomed. Anal.*, v. 41, n. 1, p. 89–98, 2006.

BERGO, M. C. J. et al. NIRS identification of *Swietenia macrophylla* is robust across specimens from 27 countries. *Iawa Journal*, v. 37, n. 3, p. 420-430, 2016.

BERTRAND, D.; DUFOUR, E. La spectroscopie infrarouge et ses applications analytiques. Tec & Doc, Coll. STAA, 223 p., 2000.

BÖSCH, M. Institutional quality, economic development and illegal logging: a quantitative cross-national analysis. *European Journal of Forest Research*, n. 3, p. 1-16, 2021.

BOTELHO, B. G. et al. Development and analytical validation of a screening method for simultaneous detection of five adulterants in raw milk using mid-infrared spectroscopy and PLS-DA. *Food chemistry*, v. 181, p. 31-37, 2015.

BOUVERESSE, E.; MASSART, D. L. Improvement of the piecewise direct standardization procedure for the transfer of NIR spectra for multivariate calibration. *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, v. 32, n. 2, p. 201–213, 1996.

BRAGA, J. W. B. et al. The use of near infrared spectroscopy to identify solid wood specimens of *swietenia macrophylla* (Cites Appendix II). *IAWA Journal*, v. 32, n. 2, p. 285-296, 2011.

BRAGA, J. W. B.; PASTORE, T. C. M.; POPPI, R. J.; SILVA, C. S.; BONA, E. Application of near-infrared spectroscopy for tropical wood species identification. *Applied Spectroscopy*, v. 65, n. 6, p. 674-681, 2011.

BRAGA, J. W. B.; PASTORE, T. C. M.; CORADIN, V. T. R.; MAGALHÃES, W. L. E.; OKINO, E. Y. A.; VALENTE, I. M. Identification of different wood species by near infrared spectroscopy and principal component analysis. *Bioresource Technology*, v.102, n.16, p. 2018-2025, 2011.

BRASIL. Instituto Brasileiro do Meio Ambiente e dos Recursos Naturais Renováveis (IBAMA). Instrução Normativa nº 8, de 25 de março de 2022. Dispõe sobre os procedimentos para exportação de produtos e subprodutos madeireiros de espécies nativas oriundos de florestas naturais ou plantadas. Brasília. 2022a. Acesso jun/2023.

BRASIL. Lei nº 12.651, de 25 maio 2012. Dispõe sobre a proteção da vegetação nativa; altera as leis nos 6.938, de 31 de agosto de 1981, 9.393, de 19 de dezembro de 1996, e 11.428, de 22 de dezembro de 2006; e dá outras providências. *Diário Oficial*, Brasília, 28 maio 2012. Seção 1.

BRASIL. Ministério da Economia. Secretaria Especial de Comércio Exterior e Assuntos Internacionais. Balança comercial brasileira, 2023a. Acesso jun/2023.

BRASIL. Serviço Florestal Brasileiro - SFB. Concessões florestais: um panorama das flonas concedidas ao longo dos anos. Boletim SNIF 2022, ed. 3, 2023b.

BRASIL. Sistema Nacional de Informações Florestais. Exportação - Produtos Florestais Madeireiros. 2022b. Acesso jun/2023.

BRITO, J. O.; BARRICHELO, L. E. G. Correlações entre características físicas e químicas da madeira e a produção de carvão vegetal: I. densidade e teor de lignina da madeira de eucalipto. Ipef, Piracicaba, v. 14, n. 14, p. 9-20, 1977.

BROWN, H. P.; PANSHIN, A. J.; FORSAITH, C. C. Textbook of wood technology: structure, identification, defects, and uses of the commercial wood of the United States. New York: McGraw-Hill, v. 1., 652 p., 1949.

BROWNING, B. L. The chemistry of wood. Interscience Publishers, London, 1963.

BRUNNER, M. et al. FT-NIR spectroscopy and wood identification. *Holzforschung*, v. 50, n. 2, p. 130-134, 1996.

BÜNING-PFAUE, H. Analysis of water in food by near-infrared spectroscopy. *Food Chem.* v. 82, p. 107–115, 2003.

CAMARGOS, J.A. et al. Catálogo de Árvores do Brasil, 2ª ed. Ed. IBAMA, 2001.

CANDOLFI, A.; REIS, M. L.; DELGADO, P. E.; KERSTEN, M.; CARVALHO, A. M. F.; LEITE, A. P. A. Use of NIR spectroscopy for the classification of timber species: a study with Brazilian wood species. *Forest Products Journal*, v. 70, n. 1, p. 1-8, 2020. DOI: 10.13073/FPJ-D-19-00016.

COOPER, P. A. et al. Potential of near-infrared spectroscopy to characterize wood products. *Can J For Research*, v. 41, p. 2150–2157, 2011.

CORADIN, V. T. R. A estrutura anatômica da madeira e princípios para a sua identificação. Brasília: LPF, 28 p. 2002.

CORADIN, V. T. R., MUÑIZ, G. I. B. Normas de procedimentos em estudos de anatomia de madeira: 1- Angiosperma. Brasília: IBAMA/DIRPED/LPF, Série Técnica, 15p. 1991.

CORADIN, V. T. R., CAMARGOS, J. A. A., & MELLO, J. P. Madeiras comerciais: anatomia de dicotiledôneas. Colombo: Embrapa Florestas, 2010.

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 density. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, v. 26, n. 2, p. 106–116, 2018a.

- COSTA, L. R.; TRUGILHO, P. F.; HEIN, P. R. G. Evaluation and classification of eucalypt charcoal quality by near infrared spectroscopy. *Biomass and Bioenergy*, v. 112, p. 85-92, 2018b.
- COSTA, M. C. A. et al. Analysis of bee pollen constituents from different Brazilian regions: Quantification by NIR spectroscopy and PLS regression. *Lwt*, v. 80, p. 76-83, 2017.
- COZZOLINO, D.; CHREE, A.; SCAIFE, J. R.; MURRAY, I. Use of visible and near-infrared spectroscopy to classify wood species: A preliminary study. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, v.13, n.1, p. 253-260, 2005.
- DAVIES, T.; FEARN, T. Back to basics: the principles of principal component analysis. *Spectroscopy Europe*, v. 16, n. 6, p. 20, 2004.
- DAVRIEUX, F. et al. Discrimination of native wood charcoal by infrared spectroscopy. *Química Nova*, v. 33, p. 1093-1097, 2010.
- DIAS JÚNIOR et al. Usinagem da Madeira de Cinco Espécies Nativas Brasileiras. *REGET*, v. 18, n. 3, p.1200-1206, 2014.
- DORMONTT, E. E. et al. Forensic timber identification: It's time to integrate disciplines to combat illegal logging. *Biological Conservation*, v. 191, p. 790-798, 2015.
- DOS SANTOS, L. M. et al. Estimating wood moisture by near infrared spectroscopy: Testing acquisition methods and wood surfaces qualities. *Wood Material Science & Engineering*, v. 16, n. 5, p. 336-343, 2021.
- DOWNES, G. M. et al. Sampling plantation eucalypts for wood and fibre properties. CSIRO publishing, 1997.
- DUARTE, P. J. et al. Anatomical identification of tropical woods traded in lavras, Brazil. *Journal of Tropical Forest Science*, v. 33, n. 1, p. 95–103, 2021.
- ESPINOZA, J. A.; HODGE, G. R.; DVORAK, W. S. The potential use of near infrared spectroscopy to discriminate between different pine species and their hybrids. *J Near Infrared Spectrosc*, v. 20, p. 437–447, 2012.
- ESTOPA, R. A. et al. Caracterização química da madeira de *Eucalyptus benthamii* por meio de espectroscopia nir. *O papel*, v. 78, n. 2, p. 75-81, 2017.
- FAO. Food and Agriculture Organization of the United Nations. Global Forest Resources Assessment (FRA) 2020 Brazil. Roma, 2020. Acesso em: jun/2023.
- FAWCETT, T. (2006). An introduction to ROC analysis. *Pattern Recognition Letters*, 27(8), 861-874.
- FEARN, T. Standardisation and calibration transfer for near infrared instruments: a review. *J. Near Infrared Spectrosc.*, v. 9, n. 4, p. 229–244, 2001.

FERREIRA, M. et al. Chemometrics I: multivariate calibration, a tutorial. *Química Nova*, v. 22, p. 724-731, 1999.

FERREIRA, M. M. C. *Quimiometria – Conceitos, Métodos e Aplicações*, 1ª ed., Editora Unicamp: Campinas, 2015.

FERREIRA, R. de A. Comparação de métodos de seleção de variáveis em regressão aplicados a dados genômicos e de espectroscopia NIR. 2018.

FEUDALE, R.N. et al. Transfer of multivariate calibration models: a review. *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, v. 64, n. 2, p. 181–192, 2002.

FIGUEIREDO, P. Fiscais do Ibama só poderão multar compra de madeira ilegal se houver 'indício' de que infrator sabia da origem indevida, 2019.

FOREST PRODUCTS LABORATORY. *Wood handbook – Wood as an engineering material*. Gen. Tech. Rep. FPL-GTR-190. U. S. Department of Agriculture, Forest Service, Forest Products Laboratory: Madison, 2010.

GALVÃO, A. P. M.; JANKOWSKY, I. P. *Secagem racional da madeira*. Nobel: São Paulo, 1985.

GIORDANENGO, T. et al. Correction of moisture effects on near infrared calibration for the analysis of phenol content in eucalyptus wood extracts. *Ann. For. Sci.*, v. 65, n. 803, 2008.

GLASS, S. V.; ZELINKA, S. L. *Wood Handbook, Chapter 04. Moisture Relations and Physical Properties of Wood*. General Technical Report FPL-GTR-190. Madison, WI: US Department of Agriculture, Forest Service, Forest Products Laboratory, Madison, WI, USA, 2010.

GLASS, S. V.; BOARDMAN, C. R.; ZELINKA, S. L. Short hold times in dynamic vapor sorption measurements mischaracterize the equilibrium moisture content of wood. *Wood Science and Technology*, v. 51, p. 243-260, 2017.

GOGÉ, F.; GOMEZ, C.; JOLIVET, C.; JOFFRE, R. Which strategy is best to predict soil properties of a local site from a national Vis–NIR database? *Geoderma*, v. 213, p. 1–9, 2014.

GUAN, Z. et al. The impact of international efforts to reduce illegal logging on the global trade in wood products. *International Wood Products Journal*, v. 9, n. 1, p. 28-38, 2018.

GUERRERO, C.; ZORNOZA, R.; GÓMEZ, I.; MATAIX-BENEYTO, J. Spiking of NIR regional models using samples from target sites: effect of model size on prediction accuracy. *Geoderma*, v. 158, n. 1, p. 66–77, 2010.

GUJRAL, P.; AMRHEIN, M.; BONVIN, D. Drift correction in multivariate calibration models using on-line reference measurements. *Anal. Chim. Acta*, v. 642, n. 1, p. 27–36, 2009.

HADLICH, H. L. et al. Recognizing Amazonian Tree Species in the Field Using Bark Tissues Spectra. *Forest. Ecol. Manag.* v. 427, p. 296–304, 2018.

HANS, G. et al. Monitoring of moisture content and basic specific gravity in black spruce logs using a hand-held MEMS-based near-infrared spectrometer. *The Forestry Chronicle*, v. 89, n. 5, p. 607-620, 2013.

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

HEIN, P. R. G.; PAKKANEN, H.; SANTOS, A. A. D. Challenges in the use of Near Infrared Spectroscopy for improving wood quality: A review. *Forest Systems*, v. 26, n. 3, 2017.

HEIN, P. R. G. et al. Near infrared spectroscopy for estimating wood basic density in Eucalyptus urophylla and Eucalyptus grandis. *Cerne*, v. 15, n. 2, p. 133-141, 2009.

HEIN, P.R.G. et al. Predicting microfibril angle in Eucalyptus wood from different wood faces and surface qualities using near infrared spectra. *J. Near Infrared Spectrosc*, v.18, p. 455–464, 2010.

HEIN, P. R.; MARTINS, F. R.; FERRAZ, R. R. J.; GALVÃO, R. K. H.; RODRIGUES, J. D. P.; DE MOURA, M. F. R. Applicability of NIR spectroscopy and multivariate analysis to differentiate wood species. *Journal of Wood Science*, v. 67, p. 1-9, 2021. DOI: 10.1007/s10086-021-01922-2.

HÖLTKEN, M. et al. Development of DNA-Based Methods to Identify CITES-Protected Timber Species: A Case Study in the Meliaceae Family. *Holzforschung*, v. 66, n. 1, 2012.

HORIKAWA, Y.; MIZUNO-TAZURU, S.; SUGIYAMA, J. Near-infrared spectroscopy as a potential method for identification of anatomically similar Japanese diploxylons. *Journal of Wood Science*, v. 61, p. 251-261, 2015.

IAWA COMMITTEE. Iawa List of microscopic features for hardwood identification. The Netherlands: Iawa Bulletin n.s., v.10, n. 3, p. 221-332, 1989.

IGNE, B. et al. Improving the transfer of near infrared prediction models by orthogonal methods. *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, v. 99, n. 1, p. 57–65, 2009.

IGNE, B. et al. Robustness considerations and effects of moisture variations on near infrared method performance for solid dosage form assay. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, v. 22, n. 3, p. 179-188, 2014.

INDEA. Instituto de Defesa Agropecuária do Estado do Mato Grosso. Noções Básicas de anatomia e identificação macroscópica de madeiras. Cuiabá, INDEA, 2011. 12 p.

INPE. Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais. Prodes Amazônia – monitoramento do desmatamento da Floresta Amazônica brasileira por satélite. São José dos Campos: Inpe, 2021. Disponível em: <<https://bit.ly/30Ga9yf>>. Acesso em: jun/2023.

JANKOWSKY, I. P. Fundamentos de secagem de madeiras. *Documentos Florestais*. Piracicaba, v. 10, p. 1 –13, 1990.

KLEINDIENST, Q. et al. Predicting the beech wood decay and strength loss in-ground. *International Biodeterioration & Biodegradation*, v. 123, p. 96-105, 2017.

KOLLMANN, F. F. P.; COTÊ, W. A. *Principles of wood science and technology*. New York: Springer-Verlag, v.1, 1968.

KOBORI, H. et al. Applicability of Vis-NIR hyperspectral imaging for monitoring wood moisture content (MC). *Holzforschung*, v. 67, n. 3, p. 307-314, 2013.

KUNZ, M. R.; KALIVAS, J. H.; ANDRIES, E. Model updating for spectral calibration maintenance and transfer using 1-norm variants of Tikhonov regularization. *Analytical chemistry*, v. 82, n. 9, p. 3642-3649, 2010.

LAZARESCU, C. et al. Wood species identification by near-infrared spectroscopy. *International Wood Products Journal*, v. 8, n. 1, p. 32-35, 2017.

LAZARESCU, C. et al. Wood species identification by near-infrared spectroscopy, *International Wood Products Journal*, 2016.

LAZZAROTTO, M. et al. Espectroscopia no infravermelho próximo para estimativa da densidade básica de madeiras de Pinus. *Revista Ciência da Madeira (Brazilian Journal of Wood Science)*, v. 7, n. 3, 2016.

LEÃO, R. M. *A floresta e o homem*. Editora da Universidade de São Paulo: Instituto de Pesquisas e Estudos Florestais, São Paulo, 2000.

LEBLON, B. et al. A review of near-infrared spectroscopy for monitoring moisture content and density of solid wood. *The forestry Chronicle*, v. 89, n. 5, 2013.

LEM, H. G.; DALLWITZ, M. J. *Commercial timbers: descriptions, illustrations, identification, and information retrieval*. Version: 25th October 2000. Disponível em: <http://delta-intkey.com>. Acesso em: 22 set. 2024.

LEMMENS, R. H. M. J.; SOERIANEGARA, I.; WONG, W. C. (Eds.). *Plant Resources of South-East Asia No. 5(2): Timber Trees: Minor Commercial Timbers*. Bogor: PROSEA Foundation, 1995.

LESNOFF, M. R. *Package Rchemo: Dimension reduction, Regression and Discrimination for Chemometrics*. CIRAD, UMR SELMET, Montpellier, France, 2021.

LI, Y. et al. Visible-near infrared spectroscopy and chemometric methods for wood density prediction and origin/species identification. *Forests*, v. 10, n. 12, p. 1078, 2019.

LIMA, J. T.; DELLA LUCIA, R.M.; VITAL, B.R. Influência do teor de umidade nas propriedades mecânicas da madeira de *Eucalyptus saligna* Smith. *Revista Árvore*, Viçosa, v.10, n.1, p.27-43. 1986.

LIMA, M. D. R. et al. Efficiency of near-infrared spectroscopy in classifying Amazonian wood wastes for bioenergy generation. *Biomass and Bioenergy*, v. 166, p. 106617, 2022.

- LOGSDON, J. M. The recent origins of spliceosomal introns revisited, *Current Opinion in Genetics & Development*, v. 8, n. 6, 1998.
- LOGSDON, N. B.; CALIL JUNIOR, C. Influência da umidade nas propriedades de resistência e rigidez da madeira. *Caderno de engenharia de estruturas*, São Carlos - SP, p.77-107, 2002.
- MACQUEEN, D. et. al. Exportando sem crises: a indústria de madeira tropical brasileira e os mercados internacionais. Londres: Earthprint Limited, Capítulo 2. p. 15 – 35, 2004.
- MALEGORI et al. Comparing the analytical performances of Micro-NIR and FT-NIR spectrometers in the evaluation of acerola fruit quality, using PLS and SVM regression algorithms, 2017.
- MALLO, M. F. L.; ESPINOZA, O. Awareness, perceptions and willingness to adopt cross-laminated timber by the architecture community in the United States. *Journal of Cleaner Production*, v. 94, p. 198-210, 2015.
- MARTINS, J. P. A.; FERREIRA, M. QSAR modeling: um novo pacote computacional open source para gerar e validar modelos QSAR. *Química Nova*, v. 36, p. 554-560, 2013.
- MARTINS, M. M. V.; NONNENBERG, M. J. B. O comércio de madeiras e as restrições impostas pelos mercados europeus e norte-americanos: qual a sua efetividade? Instituto de Pesquisa Econômica Aplicada – IPEA, Brasília, 2022.
- MARTINS, V. A. Secagem de madeira serrada. IBDF/DPq/LPF: Brasília, 1988.
- MCVEY, C. et al. A rapid food chain approach for authenticity screening: The development, validation and transferability of a chemometric model using two handheld near infrared spectroscopy (NIRS) devices. *Talanta*, v. 222, p. 121533, 2021.
- MEHROTRA, R.; SINGH, P.; KANDPAL, H. Near infrared spectroscopic investigation of the thermal degradation of wood. *Thermochimica Acta*, v. 507, p. 60-65, 2010.
- MILAGRES, F. R. et al. Influência da idade na geração de modelos de espectroscopia NIR, para predição de propriedades da madeira de *Eucalyptus spp.* *Revista Árvore*, Viçosa-MG, v.37, n.6, p.1165-1173, 2013.
- MORESCHI, J. C. Propriedades da madeira. Setor de Ciências Agrárias. Departamento de Engenharia e Tecnologia Florestal. Universidade Federal do Paraná, v. 4, 2005.
- MORESCHI, J. C. Propriedades da madeira. Departamento de Engenharia e Tecnologia Florestal da UFPR, 4 ed. Curitiba-PR, 2012.
- MORESCHI, J. C. Propriedades tecnológicas da madeira – Manual Didático. Departamento de Engenharia e Tecnologia Florestal da UFPR, 2005, 168p. NAES, T. et al. User-friendly guide to multivariate calibration and classification. *Journal of Chemometrics*, Chichester, v. 17, n. 10, p. 571-572, 2002.

MORESCHI, J. C. Relação água-madeira e sua secagem. 2ª edição. Curitiba, Departamento de engenharia e tecnologia florestal da UFPR, 2014.

MUÑIZ, G. I. B. de et al. Wood and charcoal identification of five species from the miscellaneous group known in Brazil as “angelim” by near-ir and wood anatomy. *Maderas. Ciencia y tecnología*, v. 18, n. 3, p. 505-522, 2016.

NAES, T.; ISAKSSON, T.; FEARN, T.; DAVIES, T. A user-friendly guide to multivariate calibration and classification. NIR Publications, Chichester, 2004. 344 p.

NAHUZ, M. A. R. et al. Catálogo de madeiras brasileiras para a construção civil. São Paulo: IPT - Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo, 2013.

NAGAOKA, R.; KUSUMOTO, T.; KIMURA, T.; HOSAKA, Y.; KISHIMOTO, M.; ITO, Y. Classification of wood species using NIR spectroscopy and chemometric analysis. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, v. 258, 2023. DOI: 10.1016/j.saa.2023.122276.

NASCIMENTO, R. J. A. do et al. Real time and in situ near-infrared spectroscopy (NIRS) for quantitative monitoring of biomass, glucose, ethanol and glycerine concentrations in an alcoholic fermentation. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 34, p. 459-468, 2017.

NISGOSKI, S. et al. Uso do NIR na discriminação de árvores em diferentes adubações com base nos espectros da madeira e da casca. *Revista Ciência da Madeira (Brazilian Journal of Wood Science)*, v. 7, n. 2, 2016.

NISGOSKI, S.; DE OLIVEIRA, A. A. de; DE MUÑIZ, G. I. B. de. Artificial neural network and SIMCA classification in some wood discrimination based on near-infrared spectra. *Wood Science and Technology*, v. 51, p. 929-942, 2017.

NOORD, O. E. de. Multivariate calibration standardization, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 25, n. 2, p. 85-97, 1994. [https://doi.org/10.1016/0169-7439\(94\)85037-2](https://doi.org/10.1016/0169-7439(94)85037-2).

NOURI, M. et al. Clay content mapping from airborne hyperspectral Vis-NIR data by transferring a laboratory regression model. *Geoderma*, v. 298, p. 54–66, 2017.

NOVAES, T. V. et al. Discrimination of amazonian forest species by NIR spectroscopy: wood surface effects. *European Journal of Wood and Wood Products*, v. 81, n. 1, p. 159-172, 2023.

NUNES, C. A. et al. Chemoface: a novel free user-friendly interface for chemometrics. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, v. 23, n. 11, 2012.

OLIVERI, P.; DOWNEY, G. Multivariate Class Modeling for the Verification of Food Authenticity Claims. *TrAC Trends Anal. Chem.* 2012, 35, 74–86.

PACE, J. H. C. Estimativas de propriedades e identificação da madeira com uso da espectroscopia no infravermelho próximo – NIR. Tese. Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, 2020. 110 f.

PACE, J. H. C. et al. Wood species identification from Atlantic Forest by near infrared spectroscopy. *Forest systems*, v. 28, n. 3, p. 3, 2019.

PANSHIN, A. J.; ZEEUW, C. Textbook of wood technology, 4 ed. New York: Mc Graw-Hill. 1980.

PASQUINI, C. Near infrared spectroscopy: fundamentals, practical aspects and analytical applications. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, v. 14, n. 2, p. 198-219, 2003.

PASTORE, T. C. M. et al. Near infrared spectroscopy (NIRS) as a potential tool for monitoring trade of similar woods: discrimination of true mahogany, cedar, andiroba, and curupixa. *Holzforschung*, v. 65, p. 127, 2011.

PENDRILL, F. et al. Deforestation displaced: trade in forest-risk commodities and the prospects for a global forest transition. *Environmental Research Letters*, v. 14, n. 5, 2019.

PEREZ, P. L.; BACHA, C. J. C. Evolução da produção e dos consumos interno e externo de madeira serrada do brasil. *Agroanalyses*, v. 26, n. 8, p. 21-23, 2006.

PETTERSEN, R. C. J. The Chemical Composition of Wood. American Chemical Society, p. 54-126, 1984.

PIERNA, J. A. F. et al. Calibration transfer from dispersive instruments to handheld spectrometers. *Applied spectroscopy*, v. 64, n. 6, p. 644-648, 2010.

POWERS, D. M. W. (2011). Evaluation: From precision, recall and F-measure to ROC, informedness, markedness and correlation. *Journal of Machine Learning Technologies*, 2(1), 37-63.

RAMALHO, F. M. G. et al. Potential of near-infrared spectroscopy for distinguishing charcoal produced from planted and native wood for energy purpose. *Energy & Fuels*, v. 31, n. 2, p. 1593-1599, 2017.

RAMALHO, F. M. G.; ANDRADE, J. M.; HEIN, P. R.G. Rapid discrimination of wood species from native forest and plantations using near infrared spectroscopy. *Forest Systems*, v. 27, n. 2, 2018.

RAVEN, P. H; EVERT, R. F.; EICHHORN, S. E. *Biologia vegetal*. Guanabara Koogan, 5 ed., 1992.

REZENDE, M. A. de; ESCOBEDO, J. F. Retratibilidade volumétrica e desensidade aparente da madeira em função da umidade. *IPEF*, n.39, p.33-40, 1988.

RICHARDSON, B. A. *Wood Preservation*. E & FN SPON, 2 ed., London, 1993.

ROCHA M.F.V. et al. Do the growing conditions of trees influence the wood properties? *Floresta e Ambiente*, v. 26, n. 3, 2019.

ROGER, J. M.; CHAUCHARD, F.; WILLIAMS, P. Removing the block effects in calibration by means of dynamic orthogonal projection. Application to the year effect correction for wheat protein prediction. *J. Near Infrared Spectrosc*, v. 16, n. 3, p. 311–315, 2008.

ROSS R.J.; PELLERIN R.F. Nondestructive testing for assessing wood members in structures: a review. Madison: U.S. Department of Agriculture, Forest Service, Forest Product Laboratory, 1994. 40 p.

ROSSO, S. et al. Estimate of the density of *Eucalyptus grandis* W. Hill ex Maiden using near infrared spectroscopy. *Cerne*, v. 19, p. 647-652, 2013.

RUSS, A.; FISEROVA, M. Estimation of hardwood species in mixture by near infrared spectroscopy. *Wood Res*, v. 56, p. 93–103, 2011.

SANDAK, A.; SANDAK, J.; NEGRI, M. Relationship between near-infrared (NIR) spectra and the geographical provenance of timber. *Wood science and technology*, v. 45, p. 35-48, 2011.

SANDAK, J.; SANDAK, A.; NEGRI, M. Relationship between near infrared (NIR) spectra and the physical-chemical properties of wood. *BioResources*, v. 11, n. 4, p. 10635-10654, 2016.

SANDAK, A.; SANDAK, J.; RIGGIO, M. Assessment of wood structural members degradation by means of infrared spectroscopy: an overview. *Structural Control and Health Monitoring*, v. 23, n. 3, p. 396-408, 2016.

SANTOS, J. X. et al. Near infrared spectroscopy for separation of tauari wood in Brazilian amazon native forest. *Journal of Tropical Forest Science*, v. 32, n. 3, p. 227-236, 2020.

SAVITZKY, A.; GOLAY, M. J. E. Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures. *Analytical chemistry*, v. 36, n. 8, p. 1627-1639, 1964.

SCHIMLECK, L. R.; DORAN, J. C.; RIMBAWANTO, A. Near infrared spectroscopy for cost effective screening of foliar oil characteristics in a *Melaleuca cajuputi* breeding population. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, v. 51, n. 9, p. 2433-2437, 2003.

SCHIMLECK, L. R.; EVANS, R. Estimation of wood stiffness of increment cores by near infrared spectroscopy: The development and application of calibrations based on selected cores. *Holzforschung*, v. 58, n. 5, p. 516-523, 2004.

SCHIMLECK, L. R.; KOTHIYAL, V.; JONES, P. D. (2007). Use of near-infrared spectroscopy to identify and analyze wood from different tree species. *Wood Science and Technology*, v.41, n.4, p. 395-403, 2007.

SCHWANNINGER, M.; RODRIGUES, J. C.; FACKLER, K. A review of band assignments in near infrared spectra of wood and wood components. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, v. 19, n. 5, p. 287-308, 2011.

SHARMA, V. et al. On the Rapid and Non-destructive Approach for Wood Identification Using ATR-FTIR Spectroscopy and Chemometric Methods. *Vib. Spectrosc.*, v. 110, 2020.

SHENK, J. S.; WESTERHAUS, M. O. New standardization and calibration procedures for NIRS analytical systems. *Crop Science*, v. 31, n. 6, p. 1694-1696, 1991.

SHEPHERD, K. D.; WALSH, M. G. Development of reflectance spectral libraries for characterization of soil properties. *Soil science society of America journal*, v. 66, n. 3, p. 988-998, 2002.

SIAU, J. F. Wood: Influence of Moisture on Physical Properties. Dep. of Wood Science and Forest Products, Virginia Polytechnic Institute and State University, 1995, 227p.

SIESLER, H. W. et al. Near-infrared spectroscopy: principles, instruments, applications. Wiley-VCH, Weinheim, 2002.

SILVA, D. A. da. et al. Avaliação das propriedades energéticas de resíduos de madeiras tropicais com uso da espectroscopia NIR. *Floresta e Ambiente*, v. 21, p. 561-568, 2014.

SILVA, D. C. et al. Determination of the Country of Origin of True Mahogany (*Swietenia Macrophylla* King) Wood in Five Latin American Countries Using Handheld NIR Devices and Multivariate Data Analysis. *Holzforschung*, v. 72, n. 7, p. 521-530, 2018.

SILVEIRA, L. H. C.; REZENDE, A. V.; VALE, A. T. do. Teor de umidade e densidade básica da madeira de nove espécies comerciais amazônicas. *Acta Amazonica*, v. 43, p. 179-184, 2013.

SJÖBLOM, J. et al. An evaluation of orthogonal signal correction applied to calibration transfer of near infrared spectra. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 44, n. 1-2, p. 229-244, 1998.

SKAAR, C. J. Water in wood. Syracuse: Syracuse University, 1972. 218p.

SNEL, F. A. et al. Potential Field-Deployable NIRS Identification of Seven Dalbergia Species Listed by CITES. *Wood Sci. Technol.*, v. 52, n. 5, p. 1411-1427, 2018.
<https://doi.org/10.1007/s00226-018-1027-9>.

SOARES, L. F. et al. Evaluation of the portable NIR spectrometer and PLS-DA for discrimination of six similar species of Amazonian woods. *Quim Nova*, v. 40, n. 4, p. 418-426, 2017.

SOMERS, B. et al. Modelling moisture-induced soil reflectance changes in cultivated sandy soils: a case study in citrus orchards. *Eur. J. Soil Sci.*, v. 61, n. 6, p. 1365-2389, 2010.

SOUZA, M. H.; MEGLIANO, M. M.; CAMARGOS, J. A. A.; SOUSA, M. R. Madeiras tropicais brasileiras. Instituto Brasileiro do Meio Ambiente e dos Recursos Naturais Renováveis, Laboratório de Produtos Florestais, Brasília, 1 ed., v. 1, 1997.

SWIERENGA, H.; WEIJER, A. P. de; WIJK, R. J. van; BUYDENS, L. M. C. Strategy for constructing robust multivariate calibration models. *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, 1999, v. 49, n. 1, 1999.

THOMPSON, S. T.; MAGRATH, W. B. Preventing illegal logging. *Forest Policy and Economics*, v. 128, 2021.

TOSCANO, G. et al. Performance of a portable NIR spectrometer for the determination of moisture content of industrial wood chips fuel. *Fuel*, v. 320, p. 123948, 2022.

TOSCANO, G. et al. The use of near-infrared (NIR) spectroscopy and principal component analysis (PCA) to discriminate bark and wood of the most common species of the pellet sector. *Energy & Fuels*, v. 31, n. 3, p. 2814-2821, 2017.

TSHABALALA, M. A. et al. Surface characterization. *Handbook of Wood chemistry and Wood composites*, p. 187-209, 2005.

TSUCHIKAWA, S. A Review of Recent Near Infrared Research for Wood and Paper. *S. Applied Spectroscopy Reviews*, v. 42, n. 1, 2007.

TSUCHIKAWA, S. et al. Application of near-infrared spectroscopy to wood discrimination. *The Japan Wood Research Society*, 2003.

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

TSUCHIKAWA, S.; TSUTSUMI, S. Adsorptive and Capillary Condensed Water in Biological Material. *Journal of Materials Science Letters*, v. 17, p. 661–663, 1998.

UNODC, United Nations Office on Drugs and Crime. Appendices I, II and III Valid from 28 August 2020. In *Best Practice Guide for Forensic Timber Identification*, p. 74, 2020.

UNODC, United Nations Office on Drugs and Crime. *Best Practice Guide for Forensic Timber Identification*; Vienna, 2016.

WANG, Y. D.; VELTKAMP, D. J.; KOWALSKI, B. R. Multivariate Instrument Standardization. *Anal. Chem.*, v. 63, p. 2750, 1991.

WANG, Y. et al. Green analytical assay for the quality assessment of tea by using pocket-sized NIR spectrometer. *Food Chemistry*, v. 345, p. 128816, 2021.

WANG, Y. et al. A review of the application of near-infrared spectroscopy (NIRS) in forestry. *Applied Spectroscopy Reviews*, v. 57, n. 4, p. 300-317, 2022.

WESTERHUIS, J. A.; JONG, S. D.; SMILDE, A. K. Direct orthogonal signal correction. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 56, n. 1, p. 13-25, 2001.

WETTERLIND, J.; STENBERG, B. Near-infrared spectroscopy for within-field soil characterization: small local calibrations compared with national libraries spiked with local samples. *Eur. J. Soil Sci.*, v. 61, n. 6, p. 823–843, 2010.

WILLIAMS, P.; NORRIS, K. *Near-infrared technology in the agricultural and food industrial*. 2 ed. St. Paul: American Association of Cereal Chemistry, Inc.; 2001.

WILLIAMS, Ph C.; SOBERING, D. C. Comparison of commercial near infrared transmittance and reflectance instruments for analysis of whole grains and seeds. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, v. 1, n. 1, p. 25-32, 1993.

WOLD, S. Cross-validatory estimation of the number of components in factor and principal components models. *Technometrics*, v. 20, n. 4, p. 397–405, 1978.

WOLD, S. et al. Orthogonal signal correction of near-infrared spectra. *Chemometrics and Intelligent laboratory systems*, v. 44, n. 1-2, p. 175-185, 1998.

WOLD, S.; SJÖSTRÖM, M.; ERIKSSON, L. 2001. PLS-regression: a basic tool of chemometrics. *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, v. 58, n. 2, p. 109–130, 2001.

WORKMAN Jr. J.; WEYER, L. *Practical Guide to Near-Infrared Spectroscopy*. CRC Press, 2007.

YANG, X. et al. Forage calibration transfer from laboratory to portable near infrared spectrometers. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, v. 31, n. 3, p. 126-140, 2023.

YANG, Z.; JIANG, Z. H.; LU, B. Investigation of near infrared spectroscopy of rosewood. *Spectrosc Spectr Anal*, v. 32, p. 2405–2408, 2012.

YU, M. et al. DNA barcoding of vouchered xylarium wood specimens of nine endangered *Dalbergia* species. *Planta*, v. 246, n. 6, p. 1165–1176, 2017.

ZAMORA-ROJAS, E. et al. Handheld NIRS analysis for routine meat quality control: Database transfer from at-line instruments. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 114, p. 30-35, 2012.

ZAQUE, L. A. de M.; MELO, R. R. de; STANGERLIN, D. M.; SERENINE JUNIOR, L. Diagnóstico da comercialização de madeira serrada no Estado de Mato Grosso. *Nativa*, v. 7, n. 5, p. 607–612, 2019.

ZHOU, Z.; RAHIMI, S.; AVRAMIDIS, S. On-line species identification of green hem-fr timber mix based on near infrared spectroscopy and chemometrics. *European Journal of Wood and Wood Products*, v. 78, p. 151–160, 2020.

ZWEIG, M. H., & CAMPBELL, G. (1993). Receiver-operating characteristic (ROC) plots: a fundamental evaluation tool in clinical medicine. *Clinical Chemistry*, 39(4), 561-577.