

**USO DA ESPECTROSCOPIA NO
INFRAVERMELHO PRÓXIMO PARA
PREDIÇÃO DE PROPRIEDADES
TECNOLÓGICAS DA MADEIRA
DE *Eucalyptus***

LÍVIA CÁSSIA VIANA

2008

LÍVIA CÁSSIA VIANA

**USO DA ESPECTROSCOPIA NO
INFRAVERMELHO PRÓXIMO PARA
PREDIÇÃO DE PROPRIEDADES
TECNOLÓGICAS DA MADEIRA
DE *Eucalyptus***

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Lavras como parte das exigências do Curso de Mestrado em Engenharia Florestal, área de concentração em Ciência e Tecnologia da Madeira, para a obtenção do título de “Mestre”.

Orientador:
Prof. Dr. Paulo Fernando Trugilho

Co-orientadores:
Prof. Dr. José Tarcísio Lima
Prof. Dr. Natalino Calegario

LAVRAS
MINAS GERAIS – BRASIL
2008

**Ficha Catalográfica Preparada pela Divisão de Processos Técnicos da
Biblioteca Central da UFLA**

Viana, Livia Cássia.

Uso da espectroscopia no infravermelho próximo para predição de propriedades tecnológicas da madeira de *eucalyptus* / Livia Cássia Viana.
– Lavras : UFLA, 2008.

111 p. : il.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Lavras, 2008.

Orientador: Paulo Fernando Trugilho.

Bibliografia.

1. Clones. 2. Madeira. 3. Eucalyptus. 4. Propriedades. 5. NIR. I.
Universidade Federal de Lavras. II. Título.

CDD – 634.97342

LÍVIA CÁSSIA VIANA

**USO DA ESPECTROSCOPIA NO
INFRAVERMELHO PRÓXIMO PARA
PREDIÇÃO DE PROPRIEDADES
TECNOLÓGICAS DA MADEIRA
DE *Eucalyptus***

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Lavras como parte das exigências do Curso de Mestrado em Engenharia Florestal, área de concentração em Ciência e Tecnologia da Madeira, para a obtenção do título de “Mestre”.

APROVADA em 04 de novembro de 2008

Dr. Antônio Marcos Rosado
Prof. Dr. Natalino Calegario
Prof. Dr. Alfredo Napoli

CENIBRA
UFLA
CIRAD

Prof. Dr. Paulo Fernando Trugilho
(Orientador)

LAVRAS
MINAS GERAIS - BRASIL

AGRADECIMENTOS

A Deus. *“Porque mui grande é a sua misericórdia para conosco, e a fidelidade do Senhor subsiste para sempre”*.

Aos meus pais e minha irmã.

Ao professor Paulo Fernando Trugilho, pela orientação, atenção, aprendizado e oportunidades.

Ao colega e amigo Paulo Hein pela contribuição fundamental para realização deste trabalho.

Aos amigos do laboratório de Ciência Tecnologia da Madeira que torceram por mim.

À Universidade Federal de Lavras.

A CAPES e a FAPEMIG pelo apoio financeiro.

SUMÁRIO

RESUMO.....	i
ABSTRACT	ii
1 INTRODUÇÃO	1
2 OBJETIVOS.....	3
3 REVISÃO DE LITERATURA.....	4
3.1 O GÊNERO <i>Eucalyptus</i>	4
3.2 PROPRIEDADES DA MADEIRA	5
3.3 DENSIDADE BÁSICA.....	6
3.4 PROPRIEDADES QUÍMICAS	8
3.4.1 Celulose	9
3.4.2 Hemiceluloses.....	9
3.4.3 Lignina.....	10
3.4.4 Relação siringil e guaiacil (S/G).....	11
3.4.5 Extrativos.....	12
3.5 PROPRIEDADES ANATÔMICAS	13
3.6 ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO PRÓXIMO	14
3.6.1 Histórico	15
3.6.2 Conceitos básicos.....	16
3.6.3 Radiação infravermelha	18
3.6.4 Princípio da técnica NIRS.....	19
3.6.5 Espectrômetro NIR	21
3.6.6 Quimiometria	22
3.6.7 Análise dos componentes principais (PCA)	23
3.6.8 Regressão por mínimos quadrados parciais (PLS)	24
3.6.9 Calibração	24
3.6.10 Validação	25
3.6.11 Pré-tratamento espectral	26
3.6.12 Seleção de variáveis.....	28
3.6.13 Detecção de <i>outliers</i>	29
3.6.14 Número de fatores PLS.....	30
3.6.15 NIRS no setor florestal	30
4 MATERIAL E MÉTODOS	32
4.1 MATERIAL BIOLÓGICO.....	32
4.2 MÉTODOS DESTRUTIVOS.....	33
4.2.1 Densidade básica da madeira.....	33
4.2.2 Dimensões das fibras e vasos.....	34

4.2.3 Composição química da madeira	34
4.3 ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO PRÓXIMO	35
4.3.1 Preparo dos corpos-de-prova	35
4.3.2 Parâmetros de aquisição espectral	36
4.3.3 Aquisição espectral	38
4.3.4 Calibração e validação dos modelos	38
4.3.5 Seleção dos modelos	39
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO	41
5.1 PROPRIEDADES DA MADEIRA	41
5.1.1 Densidade básica	41
5.1.2 Propriedades químicas	43
5.1.3 Características anatômicas	45
5.2 CALIBRAÇÕES NIRS	47
5.2.1 Calibração para densidade básica no DAP (DBDAP)	47
5.2.2 Calibração para densidade básica média (DBM)	49
5.2.3 Calibração para teor de glicanas	51
5.2.4 Calibração para teor de xilanas	52
5.2.5 Calibração para teor de celulose	54
5.2.6 Calibração para teor de hemiceluloses	56
5.2.7 Calibração para teor de lignina total	57
5.2.8 Calibração para teor de extrativos	59
5.2.9 Calibração para relação siringil guaiacil (S/G)	61
5.2.10 Calibração para comprimento da fibra (CF)	62
5.2.11 Calibração para largura da fibra (LF)	64
5.2.12 Calibração para diâmetro do lume (DL)	66
5.2.13 Calibração para espessura da parede (EP)	67
6 CONCLUSÃO	70
7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	71
ANEXOS	85

RESUMO

VIANA, Livia Cássia. **Uso da espectroscopia no infravermelho próximo para predição de propriedades tecnológicas da madeira de *Eucalyptus***. 2008.

111p. Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia da Madeira) Universidade Federal de Lavras, Lavras, MG.*

O conhecimento das propriedades da madeira é de fundamental importância para a indicação dos potenciais de utilização final deste material. Na busca por novas alternativas para caracterização rápida, simples e confiável, destacam-se as avaliações não-destrutivas da madeira. A espectroscopia no infravermelho próximo (NIRS) vem sendo utilizada como um método não destrutivo para caracterização da madeira. Essa técnica permite obter informações qualitativas e quantitativas dos constituintes da biomassa por meio da interação das ondas eletromagnéticas do infravermelho próximo com a amostra. Este trabalho foi realizado com o objetivo de aplicar a técnica da espectroscopia no infravermelho próximo para predição da densidade básica e de propriedades químicas e anatômicas da madeira de clones de *Eucalyptus*. Foram utilizados seis clones de *Eucalyptus* com idade de três anos, provenientes de plantios localizados nas regionais de Cocais, Guanhães, Rio Doce-Ipaba e Santa Bárbara, pertencentes à empresa CENIBRA, no estado de Minas Gerais. A densidade básica e as características morfológicas e químicas da madeira foram determinadas por método convencional no Laboratório de Ciência e Tecnologia da Madeira da Universidade Federal de Lavras, em Lavras, MG. Os espectros no infravermelho próximo foram obtidos no espectrômetro Bruker na empresa V & M, localizada no município de Paraopeba, MG e no espectrômetro Femto do Laboratório de Ciência e Tecnologia da Madeira, na Universidade Federal de Lavras. Os valores das propriedades da madeira foram correlacionados com os espectros por meio da regressão dos mínimos quadrados parciais (*PLS regression*). As calibrações para estimar a densidade básica da madeira apresentaram coeficientes de correlação na validação cruzada (Rcv) variando entre 0,33 a 0,95 e relação de desempenho do desvio (RPD) entre 1,2 a 4,3. As propriedades químicas das madeiras foram preditas por modelos com Rcv variando de 0,42 a 0,96 e RPD de 0,8 a 3,6. A calibração para predição das características anatômicas apresentou Rcv entre 0,36 e 0,97 e RPD entre 1,0 e 3,8. A espectroscopia no infravermelho próximo, de maneira geral, mostrou-se eficiente para prever as propriedades da madeira de *Eucalyptus*.

Palavras-chave: clones, madeira, *Eucalyptus*, propriedades, NIR *

* Comitê de orientação: Paulo Fernando Trugilho – UFLA (Orientador)
Co-orientadores: José Tarcísio Lima – UFLA e Natalino Calegario – UFLA

ABSTRACT

VIANA, Livia Cássia. **Use of near infrared spectroscopy for predicting of properties technological in *Eucalyptus* wood.** 2008. 111p. Dissertation (Master in Wood Science and Technology)-Universidade Federal de Lavras, Lavras, MG.¹

The knowledge of the wood properties has fundamental importance to indicate the potential and final use of this material. Non-destructive techniques are an alternative to characterize the wood in a fast, simple and reliable way. The near infrared spectroscopy (NIRS) has been used as a nondestructive method for the characterization of wood. This technique allows to acquire qualitative and quantitative information using the interaction of near-infrared electromagnetic waves with the constituents of the samples. This research aimed to apply the Near Infrared Spectroscopy Technique for fast prediction of the basic density, anatomical and chemical properties of the wood of *Eucalyptus* clones. Six 3-years old *Eucalyptus* clones from plantations located in Cocais, Guanhões, Rio Doce and Santa Barbara sites, from CENIBRA Company, in the Minas Gerais state were used in this research. The basic density, fiber dimensions and chemical characteristics of the wood were determined by the standard method in the Wood Science and Technology Laboratory, in the Universidade Federal de Lavras, Lavras - Minas Gerais. The spectra were acquired using two equipments: the near infrared spectrometers Bruker at the V & M Company, located in Paraopeba - Minas Gerais and the Femto spectrometer at the Wood Science and Technology Laboratory the Universidade Federal de Lavras. The values of the wood properties were correlated with the spectral information by the partial least square regression (PLS regression). The calibrations to estimate the wood density showed correlation coefficients in cross validation (Rcv) ranging from 0.33 to 0.95 and the ratio of performance to deviation (RPD) ranging from 1.2 to 4.3. The wood chemical properties were predicted by models of Rcv ranging from 0.42 to 0.96 and RPD from 0.8 to 3.6. The calibration for prediction of fiber dimensions showed Rcv ranging 0.36 and 0.97 and RPD from 1.0 and 3.8. The near infrared spectroscopy has proved efficiency to predict the wood properties of *Eucalyptus* clones.

Keywords: clones, wood, *Eucalyptus*, properties, NIR

¹ Advising Committee: Paulo Fernando Trugilho – UFLA (Adviser); Co-advisers: José Tarcísio Lima – UFLA e Natalino Calegario – UFLA

1 INTRODUÇÃO

A madeira de *Eucalyptus*, cada vez mais, desponta como uma alternativa viável para atender aos setores moveleiro, madeireiro, energético e de celulose e papel.

Devido à grande variabilidade da qualidade da madeira existente em clones de *Eucalyptus* (Tomazello Filho, 1985; Alzate et al., 2005), os processos para a seleção de materiais genéticos com características de interesse tecnológico são alvos a serem atingidos. Para que isso ocorra, a seleção para o melhoramento de plantas requer a avaliação de um grande número de indivíduos, o que torna o processo demorado e dispendioso.

Na busca por novas alternativas para a caracterização rápida, simples e confiável, destacam-se as avaliações não-destrutivas da madeira. Por meio desses ensaios, informações sobre o material são obtidas por medidas indiretas, o que reduz o custo e o tempo despendido nas análises de rotina nos laboratórios.

Assim, a espectroscopia no infravermelho próximo (NIRS) surge como um método que pode ser considerado como não-destrutivo, capaz de prever propriedades químicas (Meder et al., 1999), mecânicas (Kelley et al., 2004), físicas (Schimleck et al., 1999) e anatômicas de madeiras (Schimleck & Evans, 2004).

A técnica é baseada na espectroscopia vibracional, que emprega energia nos comprimentos de onda no intervalo de 750 a 2.500 nm (Workman & Weywer, 2007). Por meio desta ferramenta são obtidas informações qualitativas e quantitativas dos constituintes químicos da biomassa decorrente da interação da onda eletromagnética do infravermelho próximo com a amostra (Pasquini, 2003).

O método possui vantagens em relação aos tradicionais já que é rápido (um minuto ou menos na leitura por amostra), não-invasivo, adequado para uso em linha de produção, exige preparo mínimo da amostra e pode ser aplicado em qualquer material que contenha em suas moléculas, principalmente, ligações C-H, O-H, N-H, S-H ou C=O (Pasquini, 2003).

No setor florestal, Birkett & Gambino (1988) publicaram o primeiro trabalho alertando sobre o potencial da espectroscopia no infravermelho próximo para acessar propriedades de interesse da indústria de polpa celulósica. Atualmente, a técnica tem sido amplamente utilizada na caracterização de produtos de diversas empresas do setor.

2 OBJETIVOS

O objetivo principal deste trabalho foi aplicar a técnica da espectroscopia no infravermelho próximo para predição da densidade básica e de propriedades químicas e anatômicas da madeira de clones de *Eucalyptus*.

Os objetivos específicos foram:

- comparar os resultados obtidos nas calibrações, utilizando-se os espectrômetros Bruker e Femto;
- verificar, por meio dos ajustes, qual o melhor tipo de amostra para as leituras: amostra de madeira sólida ou moída.

3 REVISÃO DE LITERATURA

3.1 O gênero *Eucalyptus*

O eucalipto foi introduzido em escala econômica no Brasil pelo engenheiro agrônomo Edmundo Navarro de Andrade, a partir de 1904, a serviço da Companhia Paulista de Estradas de Ferro de São Paulo (Martini, 2008). Contudo, Andrade (1961) relatou que os primeiros plantios agrupados no país aconteceram no Rio Grande do Sul, em 1868.

As espécies do gênero *Eucalyptus* pertencem à família Myrtaceae e têm sua origem na Austrália, onde cobrem cerca de 90% da área deste país. Destacam-se pela grande variabilidade genética, incluindo mais de 700 denominações entre espécies, variedades e híbridos (Assis, 1996).

Suas características, como rápido crescimento e boa adaptação às condições climáticas e edáficas existentes em diferentes áreas do país, explicam a sua importância no setor florestal (Sturion & Bellote, 2000). Além disso, o grande número de espécies permite a variação das propriedades tecnológicas desta madeira, possibilitando a utilização da mesma para os mais diversos usos (Assis, 1999).

Os plantios em grande escala estão concentrados em poucas espécies. De acordo com Eldridge et al. (1993), as espécies do gênero *Eucalyptus* mais plantadas mundialmente são *E. grandis*, *E. camaldulensis*, *E. tereticornis*, *E. globulus*, *E. urophylla*, *E. viminalis*, *E. saligna*, *E. deglupta*, *E. enxerta* e *E. citriodora*.

Soares et al. (2003) afirmam que a madeira de eucalipto pode ser usada para diferentes fins industriais, dentre eles produção de celulose e papel, painéis de fibras e aglomerado, combustível industrial e doméstico e produtos de serrarias.

Na indústria de celulose e papel, no Brasil, destacam-se, como mais utilizadas, as espécies *E. grandis* e *E. urophylla*, assim como o híbrido entre eles (Bertolucci et al., 1995).

Segundo Brigatti et al. (1980), o híbrido de *Eucalyptus grandis* x *Eucalyptus urophylla* tem grande importância para a produção de celulose em função da alta produtividade e qualidade de suas fibras, além do rápido crescimento, com ciclos de corte entre 6 e 7 anos de idade. Por esses motivos, esse híbrido tem se constituído a base da silvicultura brasileira.

Carvalho (2000) explica que o objetivo do cruzamento destas duas espécies é obter plantas com um bom crescimento, característica do *Eucalyptus grandis*, e um leve aumento da densidade da madeira e melhorias no rendimento e propriedades físicas da celulose, características do *Eucalyptus urophylla*.

Gouvea et al. (1997) citam a rusticidade, as propriedades da madeira e a resistência ao déficit hídrico do *Eucalyptus urophylla* como fatores que contribuem para o sucesso desta espécie nos programas de hibridação com o *Eucalyptus grandis* que, por sua vez, possui um bom desenvolvimento silvicultural, sendo possível a obtenção de matéria-prima mais homogênea e de melhor qualidade.

3.2 Propriedades da madeira

As potencialidades da madeira, como matéria-prima de qualidade para diversos usos no setor florestal, já são conhecidas. Sabe-se também que a mesma é um material heterogêneo, apresentando importantes variações nas suas propriedades, dentro de uma mesma espécie (Shimoyama, 1990) e de um mesmo clone (Tomazello Filho, 1985; Evans et al., 2000).

Busnardo et al. (1987) explicam que a variabilidade das propriedades da madeira dentro de uma mesma espécie de *Eucalyptus* pode estar relacionada ao

material genético utilizado, às condições edafoclimáticas, aos sistemas de implantação e de condução das florestas, ao ritmo de crescimento e à idade da floresta.

O conhecimento de tais propriedades é de fundamental importância para a indicação dos potenciais de utilização final deste material. Por exemplo, uma madeira com grã espiralada não influenciará nas características da pasta celulósica, mas trará sérios problemas durante a secagem para a produção de madeira serrada (Harris & Cown, 1991). Já as dimensões das fibras, como o comprimento e a espessura da parede, são de importância significativa no processo de obtenção de celulose (Cown & Kibblewhit, 1980).

A utilização racional e efetiva da madeira como matéria-prima para fins industriais ou construtivos só pode ocorrer a partir do conhecimento aprofundado de suas propriedades (Klock, 2000).

3.3 Densidade básica

Densidade básica corresponde à relação entre o peso seco e o volume saturado e é expressa em g/cm^3 ou kg/m^3 (Vital, 1985). De acordo com Kollmann (1959), a densidade básica é o tipo de densidade que melhor permite estabelecer claramente os critérios de comparação, por determinar a massa de madeira anidra ou seca em estufa contida em unidade de volume verde ou saturada. Estas duas condições são muito estáveis na madeira.

Quando se pretende avaliar a qualidade da madeira, a densidade é uma das principais características a serem consideradas, já que se correlaciona fortemente com as demais propriedades tecnológicas da madeira (Chimelo, 1980). Entretanto, é uma característica bastante complexa resultante da combinação de caracteres anatômicos, físicos e químicos (Busnardo et al., 1987).

Além de ser um indicativo da qualidade da madeira, Lopes & Garcia (2002) destacaram, como fator importante desta propriedade, o fato de ser passível de melhoramento genético e considerada altamente herdável.

Alguns autores relataram a variação da densidade em função de diversos fatores, como idade, espécie/procedência, local de origem, sítio, material genético, características ambientais e práticas silviculturais (Tomazello Filho, 1985; Souza et al., 1986; Vale et al., 1995; Vigneron et al., 1995; Bouvet et al., 1999).

A variação também ocorre entre gêneros, entre espécies pertencentes ao mesmo gênero, bem como entre árvores e até dentro do mesmo indivíduo (Ferreira & Kageyama, 1978; Tomazello Filho, 1985; Souza et al., 1986).

Uma árvore mais homogênea em relação à densidade no interior do tronco será matéria-prima desejável nos processos de processamento, já que apresenta melhor comportamento e estabilidade, influenciando, assim, a qualidade do produto final.

De acordo com Silva et al. (1993), a densidade da madeira é uma das características que mais influenciam no processo de obtenção de celulose. Madeiras de elevada densidade não são desejáveis, pois possuem maiores teores de extrativos e lignina, prejudicando o rendimento de polpa celulósica (Clarke, 1990).

Barrichelo & Foelkel (1983) destacaram, além da densidade básica, a importância das demais propriedades, como as características morfológicas das fibras e os teores de celulose, lignina, pentosanas e extrativos, na determinação da qualidade da madeira.

3.4 Propriedades químicas

Quimicamente, a madeira constitui-se, basicamente, de três polímeros com elevados grau de polimerização e pesos moleculares: celulose, hemicelulose e lignina, os chamados componentes fundamentais. O conjunto da celulose e das hemiceluloses compõe o conteúdo total de polissacarídeos contidos na madeira e é denominado holocelulose (Zobel & Buijtenen, 1989).

Os demais componentes da madeira, designados complementares ou acidentais, estão presentes em menor quantidade, sendo compostos de baixo peso molecular, chamados extrativos, encontrados notadamente na casca e incluindo terpenos, óleos, graxas e corantes (Oliveira, 1997; Silva, 2002).

O conhecimento na natureza química da madeira, como teores de celulose, lignina, pentosanas e extrativo, é de grande importância, pois está relacionado com as exigências da mesma, principalmente nos processos de polpação e branqueamento da polpa celulósica (Foelkel, 1977).

A quantidade de cada componente lignina, celulose e hemiceluloses varia fortemente entre as madeiras de folhosas e coníferas, entre espécies e, provavelmente, de árvore para árvore (Philipp & Almeida, 1988).

A madeira de eucalipto apresenta de 40% a 55% de celulose, de 20% a 40% de hemiceluloses e teor de lignina na faixa de 15% a 25% do peso total da madeira (Barrichelo & Brito, 1976). Hillis & Brown (1978) encontraram, em madeiras do gênero *Eucalyptus*, componentes químicos variando entre 40% a 62% para celulose, de 12% a 22% para hemiceluloses e de 15% a 25% para lignina.

Trugilho et al. (2003) afirmam que, para as espécies *Eucalyptus grandis* e *E. saligna*, os valores médios de extrativos totais, de lignina e de holocelulose correspondem a 6,71%, 31,77% e 61,52%, respectivamente.

3.4.1 Celulose

A celulose é o polissacarídeo mais abundante na natureza (Rowell et al., 2005). Apresenta-se na forma de um polímero linear de alto peso molecular, constituído exclusivamente de unidades de β -D-anidroglicopiranosose ligadas por meio de ligações glicosídicas entre carbonos 1 e 4 e possui uma estrutura organizada e parcialmente cristalina.

Em termos de massa, é o componente mais importante da parede celular, já que ocupa mais de 40% a 45% da substância madeira (Foelkel, 1977).

Wright & Wallis (1998) mostraram que o rendimento da polpa Kraft para espécies de *Eucalyptus* correlaciona-se positivamente com o teor de celulose da madeira e menos com o teor de hemiceluloses.

As moléculas de celulose alinhadas dão origem às microfibrilas que, por sua vez, levam à formação das macrofibrilas, as quais se ordenam para formar a parede celular (Esau, 1974).

3.4.2 Hemiceluloses

Associada à celulose estão as hemiceluloses, que também são polissacarídeos, diferindo da celulose por apresentarem várias unidades de açúcares diferentes, contendo de cinco a seis átomos de carbono, além de serem ramificadas e estarem presentes na madeira em menor grau de polimerização (peso molecular entre 25.000 e 35.000 g/mol). Apresentam-se na ordem de 20% a 30% da substância madeira (Foelkel, 1977).

A fração de hemiceluloses é composta, principalmente, por duas classes de substâncias: as xilanas, que são moléculas formadas por polimerização de formas anidro de pentoses (típicas de madeiras de folhosas) e as glucomananas, as quais são formadas pela polimerização de formas anidro de hexoses (típicas de madeira de coníferas), principalmente glicose e manose (Sjöström, 1993).

As folhosas, de maneira geral, contêm maior teor de hemiceluloses que as coníferas e a composição é diferenciada. As hemiceluloses mais abundantes em madeiras de folhosas, as xilanas, merecem destaque devido à grande influência que exercem no processo de produção de celulose e papel.

Wagberg & Annergren (1997) afirmam que mesmo a celulose sendo o componente da polpa que confere resistência às fibras, polpas com altos teores de celulose e baixos teores de hemiceluloses desenvolvem menores resistências quando são refinadas.

3.4.3 Lignina

Lignina é uma macromolécula amorfa, tridimensional, de natureza aromática e complexa, presente na parede celular e na lamela média dos vegetais (Saliba et al., 2001).

É o componente com propriedade cimentante da parede celular, característico de tecidos de plantas lenhosas, apresentando alto peso molecular e constituído pelas unidades básicas dos álcoois p-cumarílico, coniferílico e sinapílico (Lewin & Goldstein, 1991).

A lignina é incorporada como último componente da parede celular durante o processo de formação celular, interpenetrando as fibrilas e fortalecendo a parede, ocorrendo, assim, a lignificação (Fengel & Wegener, 1984). A lignificação proporciona à parede celular maior resistência e rigidez, além de proteção aos tecidos das plantas contra o ataque de patógenos.

Há maior teor de lignina em coníferas do que em folhosas e existem algumas diferenças estruturais entre a lignina encontrada nas coníferas e nas folhosas. O teor de lignina na madeira pode variar de 15% a 30%; para madeiras de coníferas, são encontrados teores de 25% a 30% e, para as madeiras de folhosas, podem ser de 15% a 25% (Sansígolo, 1994).

No processo de polpação, madeiras com maiores teores de lignina podem exigir um maior consumo de álcali, gerando, conseqüentemente, maiores teores de sólidos para queima na caldeira (Santos et al., 2001).

3.4.4 Relação siringil e guaiacil (S/G)

Os precursores da lignina são biossintetizados a partir do álcool p-coumarílico, álcool coniferílico e álcool sinapílico (Figura 1). Esses alcoóis possuem diferenças nos grupos substituintes do anel aromático e são os respectivos precursores primários das unidades conhecidas como *p*-hidroxifenil (H), guaiacil (G) e siringil (S) (Lewin & Goldstein, 1991).

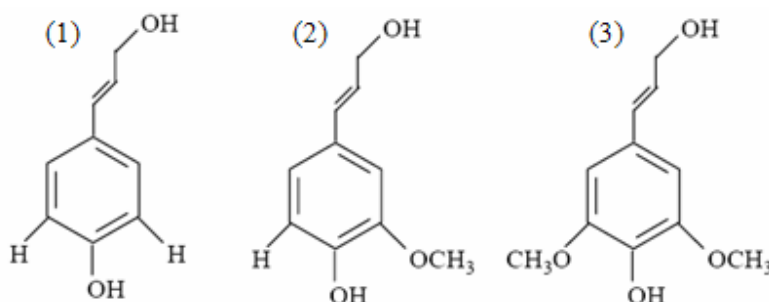


FIGURA 1 Estrutura química dos precursores das unidades de lignina. (1) álcool p-coumarílico, (2) álcool coniferílico, (3) álcool sinapílico. Fonte: Lewin & Goldstein (1991).

Apesar de a lignina ser formada pela combinação dos três tipos de alcoóis, o álcool coniferílico é o principal precursor da lignina das madeiras de coníferas, 85% a 90% de unidades aromáticas guaiacil, e os alcoóis coniferílicos e sinapílicos são ambos precursores da lignina das madeiras de folhosas, razão que varia de 1:4 a 2:1 de unidades guaiacil e siringil, aproximadamente (Sjöström, 1993).

O conhecimento da relação siringil/guaiacil (S/G) na estrutura da lignina tem implicações diretas para a indústria sobre o processo de deslignificação da madeira (polpação) e o branqueamento. As estruturas de lignina siringil, por não possuírem o carbono reativo C5 disponível para reação na etapa de polimerização da biossíntese da lignina, apresentam estrutura química menos condensada e, conseqüentemente, são mais favoráveis à deslignificação pelo licor de cozimento Kraft (Gomide et al., 2005).

3.4.5 Extrativos

Os extrativos, considerados constituintes secundários, são compostos químicos de baixa massa molecular, solúveis em água e solventes orgânicos, que não fazem parte da estrutura da parede celular.

De acordo com Shimoyama (1990), altos teores de extrativos em madeiras podem colaborar para o aumento da densidade das mesmas.

Assim como os demais componentes químicos da madeira, a concentração dos extrativos também pode variar entre espécies, podendo representar de 4% a 10% da massa total da madeira seca. Apesar do baixo teor de extrativos em relação aos demais componentes, sua presença pode influenciar na escolha da madeira para determinados fins, podendo ser desejáveis ou não.

No processo de obtenção de celulose, os extrativos influenciam negativamente, pois reduzem o rendimento e qualidade da polpa. Entretanto, para o setor energético, certos extrativos contribuem para aumentar o poder calorífico da madeira (Philipp & Almeida, 1988). A presença de extrativos também pode ser positiva, proporcionando valor estético ou protegendo contra o ataque da madeira por fungos e insetos, aumentando a durabilidade da mesma.

3.5 Propriedades anatômicas

As características anatômicas, juntamente com as propriedades químicas e físicas, constituem-se num índice de qualidade, compondo os fatores que, relacionados, alteram as propriedades da madeira (Haygreen & Bowyer, 1982).

De acordo com Oliveira (1997), a importância em estudar as características anatômicas da madeira de eucaliptos está na identificação de espécies e na indicação para prováveis usos tecnológicos.

Comprimento, largura, espessura da parede e diâmetro do lume das fibras da madeira dos eucaliptos representam os parâmetros anatômicos geralmente mais estudados e de maior importância, já que se relacionam diretamente com as propriedades do papel. Tais características são controladas por processos fisiológicos distintos e variam na madeira, representando os diferentes estágios de seu desenvolvimento (Shimoyama, 1990).

Hillis & Brown (1978) verificaram que, para espécies de eucaliptos, comprimento, diâmetro e espessura da parede das fibras aumentam com a idade.

As fibras de eucalipto são consideradas fibras curtas, quando comparadas aos traqueídeos das coníferas, com dimensões variando de 0,80 a 1,30 mm de comprimento (Tomazello Filho, 1983). A espessura da parede das fibras apresentada pelas espécies de eucalipto encontra-se na faixa de 2,5 a 6,0 μm ; para largura, geralmente, observam-se valores entre 12 a 20 μm (Barrichelo & Brito, 1976).

De acordo com Kollmann et al. (1975), as diferenças anatômicas entre as fibras das folhosas que são mais curtas e, geralmente, possuem paredes mais espessas que os traqueídeos das coníferas, são responsáveis por diferenças nas propriedades físico-mecânicas do papel e suas resistências.

Segundo Barrichelo & Brito (1976), a resistência à tração do papel é função direta da largura da fibra, do diâmetro do lume e do índice de

enfeltramento e a resistência ao arrebentamento pode ser correlacionada com o comprimento, a espessura da parede e a largura da fibra.

A espessura da parede está relacionada com a rigidez da fibra. Fibras com paredes mais espessas, durante o processo de refinação tendem a sofrer maior desfibrilamento, aumentando o potencial de ligações interfibrilares e a área de ligação entre elas. A consequência é o aumento da resistência à tração do papel (Carvalho et al., 1998).

O comprimento da fibra, a espessura da parede, o diâmetro do lume, a proporção dos vários tipos de células e tecidos, como vasos e parênquimas, têm relação com a densidade básica da madeira (Alencar, 2002).

3.6 Espectroscopia no infravermelho próximo

Tradicionalmente, os ensaios realizados com o objetivo de avaliar as características tecnológicas da madeira são precisos, mas, na sua maioria, trabalhosos, demorados, caros e o número de amostras é limitado, dificultando, dessa forma, a caracterização desta matéria-prima e, conseqüentemente, a seleção de melhores árvores.

Neste contexto, é importante investigar o uso de técnicas não destrutivas para uma adequada caracterização das propriedades da madeira. Tais técnicas devem ser de fácil e rápida determinação, permitindo a análise de um grande número de amostras e resultados representativos.

A espectroscopia no infravermelho próximo (*near infrared spectroscopy* ou NIRS) vem sendo utilizada como um método não destrutivo para a caracterização da madeira. A técnica NIRS consiste na exposição de uma amostra ao espectro na região de comprimento de onda que varia entre 750 a 2.500 nm e a conseqüente correlação dos mesmos com resultados de análises laboratoriais, para a geração de um modelo estatístico de forma a explicar e

correlacionar a maioria das informações contidas nos espectros (Williams & Norris, 2001).

A técnica tem se mostrado uma ferramenta analítica precisa para aplicação em diversas áreas de produção e controle de qualidade, como no setor agrícola, na indústria de alimentos, na indústria de polímeros e têxtil, e na produção de combustível fóssil, biocombustível, cosméticos, tintas e farmacêutica (Church et al., 1998; Kays et al., 2000; Isaksson et al., 2001; Kramer & Ebel, 2000; Williams & Norris, 2001; Vieira et al., 2002). No setor florestal, os estudos ainda estão em fase inicial.

3.6.1 Histórico

Frederick William Herschel foi o astrônomo e músico inglês responsável pela descoberta da região do infravermelho próximo. Em 1800, Herschel executou um experimento utilizando papelão e termômetros com bulbos pretos, com a finalidade de medir as temperaturas relacionadas às diferentes cores do prisma. O astrônomo observou um aumento da temperatura à medida que movia o termômetro do violeta para o vermelho, no espectro criado pela luz do sol atravessando o prisma. Percebeu que, além da luz vermelha visível, ocorria temperatura mais elevada, sendo esta região, mais tarde, chamada de infravermelho próximo (Cienfuegos, 2003).

Apesar de a radiação no infravermelho próximo ter sido descoberta antes da radiação no infravermelho médio, a espectroscopia NIR, inicialmente, foi negligenciada por estudiosos da área.

Sabia-se que os espectros no infravermelho armazenavam uma gama de informações sobre a amostra e, portanto, apresentavam elevado potencial para serem empregados nos mais diversos tipos de análises químicas e físicas. Entretanto, existia grande dificuldade em extrair informações relevantes, uma

vez que as bandas de absorção na região NIR são produto de sobretons e da combinação de bandas fundamentais de vibrações (Pasquini, 2003).

Na década de 1980, contudo, houve um salto nas áreas científicas e tecnológicas, contribuindo para o avanço nos estudos utilizando a espectroscopia no infravermelho próximo como nova ferramenta.

O tratamento dos dados obtidos passou a exigir modelos mais complexos que estavam além da tradicional calibração univariada. O problema da modelagem desses dados foi solucionado com a aplicação de técnicas quimiométricas (Massart et al., 1986).

Os trabalhos pioneiros nesta área aconteceram a partir de 1938. Pesquisadores utilizaram as técnicas espectroscópicas para quantificar a concentração de água na gelatina e a concentração de óleos (combustíveis). Karl Norris merece destaque pela importância de seus trabalhos, iniciando suas pesquisas aplicando a técnica como novo método de determinação da umidade em produtos agrícolas. No Brasil, os primeiros trabalhos foram as publicações de Nishiyama em 1991 (Pasquini, 2003).

3.6.2 Conceitos básicos

A espectroscopia estuda a interação das radiações eletromagnéticas com moléculas ou partículas. A radiação eletromagnética consiste na transmissão de energia na forma de ondas, contendo um componente elétrico e outro magnético (Figura 2), por ser produzida pela aceleração de uma carga elétrica em um campo magnético (Pasquini, 2003).

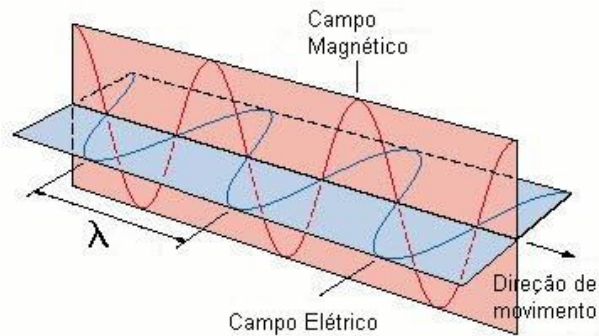


FIGURA 2 Propagação da onda nos campos elétrico e magnético

A luz desloca-se no espaço por meio de ondas eletromagnéticas que não necessitam de um meio físico para serem transportadas e, portanto diferem dos outros exemplos de ondas encontrados na natureza, como ondas na água, ondas sonoras, sísmicas, etc.

O número de ondas que passam por um ponto é o que se chama de frequência de onda. Geralmente, a frequência de uma onda é medida em número de ondas por segundo, ou Hertz (Hz), representado pela letra grega ν . Outra forma de caracterizar uma onda é pelo seu comprimento, geralmente representado pela letra grega λ (Coleman, 1993). Na Figura 3 está representada a propagação da onda de amplitude H , velocidade v e comprimento λ , ao longo de uma dada direção.

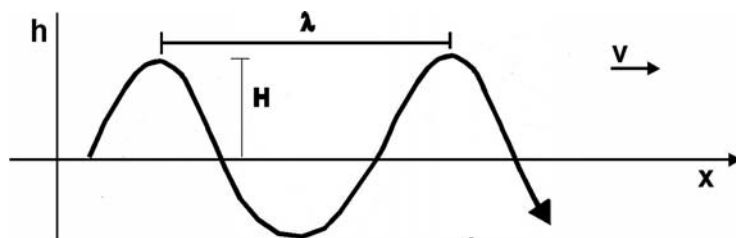


FIGURA 3 Propriedades da onda

A energia transportada por uma onda depende unicamente de sua frequência ou comprimento de onda, já que ambos estão relacionados pela velocidade da luz, que é uma constante universal. Esta energia transportada pelas ondas eletromagnéticas é dada pela relação $E = h\nu$, em que h é uma constante universal chamada constante de Planck, cujo valor é $h = 6,63 \times 10^{-34}$ J.s (Joule x segundo) e ν corresponde à frequência da radiação.

3.6.3 Radiação infravermelha

O espectro da radiação eletromagnética abrange as ondas de rádio, as microondas, o infravermelho, a luz visível, os raios ultravioleta, os raios X e os raios gama (Figura 4).

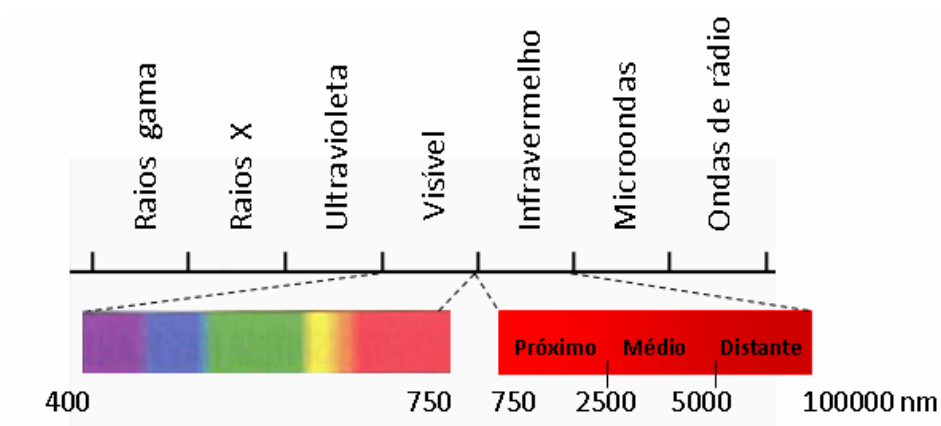


FIGURA 4 Espectro eletromagnético

A porção do espectro eletromagnético percebida pelo olho humano (região visível) está compreendida entre os comprimentos de onda de 400 nm a 750 nm. Acima desse limite, até a região das microondas, situa-se a região do infravermelho.

A região do infravermelho pode ser dividida em três regiões: infravermelho distante, infravermelho médio e infravermelho próximo (Tabela 1). No infravermelho distante e médio estudam-se, respectivamente, os espectros de rotação das moléculas e os espectros de vibração molecular, enquanto no infravermelho próximo estudam-se os harmônicos das vibrações moleculares. No infravermelho próximo, o NIR, as vibrações moleculares que resultam em transições harmônicas (overtones) são responsáveis pela absorção nesta região (Burns & Ciurczak, 2008).

TABELA 1 Limites das regiões espectrais do infravermelho

Região	Região (cm ⁻¹)	Região (nm)	Região de frequência (Hz)
Próximo (NIR)	12800 a 4000	780 a 2500	3,8x 10 ¹⁴ a 1,2 x 10 ¹⁴
Médio (MID)	4000 a 200	2500 a 5000	1,2 x 10 ¹⁴ a 6,0 x 10 ¹²
Distante (FAR)	200 a 10	5000 a 100000	6,0 x 10 ¹² a 3,0 x 10 ¹¹

Fonte: Skoog et al. (2001).

3.6.4 Princípio da técnica NIRS

Segundo Kempem & Jackson (1996), a base física de absorção de luz é relacionada à natureza das ligações moleculares que, por sua vez, são definidas pelos vínculos entre átomos dentro de molécula. Entretanto, essas ligações não são conexões estáticas e, sim, vibram o tempo todo, provocando estiramento e compressão das moléculas, resultando em um movimento de onda dos átomos, com frequência específica dependente dos elementos envolvidos.

Quando uma radiação monocromática interage com uma amostra, ela pode ser absorvida, transmitida ou refletida, conforme Figura 5. A molécula pode absorver radiação quando as vibrações entre as suas ligações moleculares ocorrem na frequência da onda de radiação.

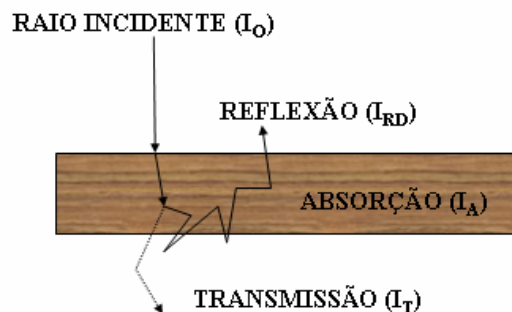


FIGURA 5 Interação da radiação com a amostra

Desse modo, se um feixe de fótons com intensidade I_0 incide sobre uma amostra com moléculas que apresentam energia de vibração incompatível com a energia dos fótons, nenhuma energia será absorvida e todos os fótons passarão pela amostra, isto é, o feixe I , que emerge da amostra, tem a mesma intensidade que o feixe I_0 ($I_0 = I$). Por outro lado, se a energia dos fótons for compatível com a energia vibracional, cada molécula absorverá um fóton, aumentando seu movimento vibracional. Como consequência, a intensidade dos fótons que deixa a amostra será menor do que a intensidade incidente ($I_0 > I$), pois, parte dos fótons foi absorvida. Depreende-se que, quanto maior for o número de moléculas presente na amostra, menor será a intensidade final, pois maior será a chance dos fótons serem absorvidos (Skoog et al., 2001).

Além das frequências associadas às vibrações normais, frequências adicionais podem aparecer no espectro, os sobretons e as bandas de combinação (Bokobza, 1998). Os sobretons são bandas com valores de frequência correspondentes a múltiplos inteiros daqueles das vibrações normais. As bandas de combinação são combinações lineares das frequências normais ou múltiplos inteiros destas (Pasquini, 2003).

3.6.5 Espectrômetro NIR

O espectrômetro NIR é um equipamento de alta precisão que efetua análises em qualquer molécula que apresente, principalmente, ligações C-H, O-H, N-H, S-H e C=O (Pasquini, 2003).

Os componentes básicos de um espectrômetro infravermelho são: fonte, seletor de comprimento de onda, recipiente de amostra, detector, transdutor e processador (Valderrama, 2005).

Os espectrômetros com transformada de Fourier foram introduzidos na década de 1970, substituindo os equipamentos dispersivos. Aqueles equipamentos utilizam um interferômetro em vez de redes de difração. De acordo com Borin (2003), os espectrômetros com transformada de Fourier superam limitações dos sistemas de infravermelho dispersivos em relação ao menor tempo requerido para adquirir um espectro, aumento da sensibilidade e resolução.

O esquema de um espectrômetro dispersivo está ilustrado na Figura 6.

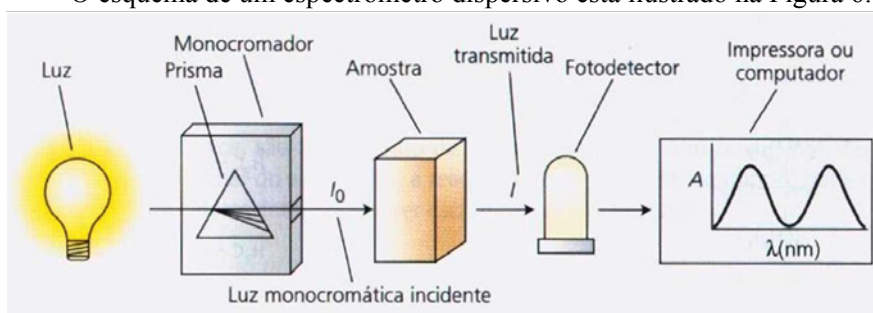


FIGURA 6 Diagrama esquemático de um espectrômetro dispersivo. Fonte: Taiz & Zeiger (2004).

Segundo Sefara et al. (2000), o método consiste na emissão de uma radiação na faixa do infravermelho próximo sobre a amostra. Após interação com o material, fotocaptadores registram a intensidade da luz e produzem um

espectro de absorvância, reflectância ou transmitância, dependendo do modo de funcionamento do equipamento. A reflectância difusa, mais comumente usada na espectroscopia NIR, é utilizada em amostras em que a variação do comprimento de onda varia entre 1.100 até 2.500 nm, enquanto a transmitância é medida de 800 a 1.100 nm.

Por meio de análise multivariada, a informação contida no espectro é relacionada aos valores obtidos por métodos analíticos convencionais e uma calibração é ajustada. O espectrômetro NIR baseia-se na aplicação da matemática à química analítica (quimiometria).

3.6.6 Quimiometria

A quimiometria pode ser definida como a ciência que utiliza, em conjunto, os métodos matemáticos, estatísticos e informáticos, com a finalidade de obter informações quimicamente relevantes a partir dos dados químicos medidos e representar e apresentar essa informação (Wold & Sjöström, 1998).

Massart et al. (1986) explicam que o desenvolvimento das técnicas quimiométricas pode ser considerado um dos fortes motivos que contribuíram para o sucesso da espectroscopia como uma ferramenta de análise em aplicações qualitativas e quantitativas na química analítica.

Dentro da quimiometria, a calibração multivariada ganhou ênfase para tratamento de dados espectrais. As principais técnicas de análise multivariada utilizadas para a elaboração de modelos, de acordo com Burns & Ciurczak (2008), são: regressão linear múltipla (MLR), regressão por componentes principais (PCR), análise por componentes principais (PCA) e mínimos quadrados parciais (PLS). Dentre essas, a regressão dos mínimos quadrados parciais (do inglês *partial least squares*), ou PLS, possibilitou um avanço significativo na aplicação da quimiometria. Com a utilização desse método,

muitos problemas de cálculo puderam ser superados e variadas aplicações analíticas começaram a surgir (Stewart et al., 1995).

3.6.7 Análise dos componentes principais (PCA)

A análise dos componentes principais (*principal component analysis* ou PCA) é uma das ferramentas da quimiometria que têm como objetivo projetar dados originais de grande dimensão espacial para menores dimensões, permitindo, dessa forma, que informações importantes possam ser extraídas (Borin, 2003).

Consiste num método de análise de fatores em que a matriz de espectros original X , formada por m linhas (amostras) n colunas (variáveis), é decomposta em duas matrizes de variações: a matriz de *loadings* (pesos) e a de *scores* (escores). A matriz de *scores* é constituída de m linhas e d colunas, em que d corresponde ao número de componentes principais. A matriz de *loadings* é constituída de d linhas e n colunas. Os espectros originais podem ser considerados como combinações lineares das variações dos espectros (pesos), em que os escores representam a contribuição de cada espectro original (Burns & Ciurczak, 2008).

Os componentes principais consistem num conjunto de vetores, ortogonais entre si. Esses novos componentes são combinações lineares das variáveis originais, construídos em ordem decrescente de variância e, portanto, de quantidade de informação, resultantes do agrupamento das variáveis altamente correlacionadas (Geladi & Kowalski, 1986).

Sendo assim, as análises por componentes principais reduzem a dimensionalidade do conjunto de dados original, de forma que as informações mais relevantes ficam concentradas nas primeiras componentes e as de menor importância nos últimos. Dessa forma, as primeiras componentes principais são

suficientes para descrever o sistema, possibilitando que seja facilmente interpretado (Beebe et al., 1998).

3.6.8 Regressão por mínimos quadrados parciais (PLS)

A regressão PLS é usada para análises quantitativas. Na PLS, tanto a matriz das variáveis independentes X como a das variáveis dependentes Y são combinações lineares obtidas via componentes principais (Geladi & Kowalski, 1986).

No processo de obtenção do modelo PLS ocorrem pequenas distorções nas direções dos *loadings*, de modo que, rigorosamente, eles perdem a ortogonalidade, levando a pequenas redundâncias de informação. Essas pequenas redundâncias otimizam a relação linear entre os *scores* e as distorções da ortogonalidade entre as componentes principais no PLS fazem com que os mesmos não sejam mais componentes principais (que são ortogonais) e, sim, variáveis latentes (Beebe et al., 1998; Otto, 1999; Burns & Ciurczak, 2008).

3.6.9 Calibração

A calibração pode ser definida como uma série de operações que estabelecem uma relação entre medidas instrumentais e valores para uma propriedade de interesse correspondente (Martens & Naes, 1996).

O objetivo da calibração é produzir e encontrar um modelo que melhor represente ou relacione os dados espectrais com os dados obtidos pelo método de referência (Pantoja, 2006).

A técnica NIRS pode prever, qualitativa ou quantitativamente, determinadas substâncias, baseando-se no princípio de comparação dos resultados obtidos em laboratório com os espectros obtidos pelo aparelho. Dessa

forma, exige calibração por meio de amostras de composição conhecida, determinadas nos laboratórios pelos métodos tradicionais.

É importante que a amostra em estudo represente todo o conjunto de variabilidade existente na população e que as medições de referência sejam realizadas com exatidão (Pasquini, 2003).

Um modelo de calibração é uma função estatística que relaciona um grupo de variáveis dependentes (Y) a outro grupo de variáveis independentes (X) (Baunsgaard et al., 2000).

No processo de seleção de modelos multivariados existem parâmetros que devem ser analisados para auxiliarem na escolha dos melhores ajustes. Esses parâmetros são: coeficientes de correlação (R^2) ou determinação (R), número de fatores PLS, valores de erro padrão na calibração (SECV) e relação de desempenho do desvio (RPD).

3.6.10 Validação

Depois de calibrado o modelo para uma determinada propriedade, a acurácia de calibração deve ser testada em um processo denominado validação. A validação do modelo pode ser realizada de duas maneiras, a saber: validação externa e validação cruzada (Martens & Naes, 1996).

Na validação externa, o conjunto de amostras usado é diferente do conjunto da calibração. É o método mais simples, mas possui a desvantagem de exigir outro conjunto de amostras, que implica na medição de espectros e realização de análises convencionais, aumentando o tempo gasto e o custo no procedimento (Sotelo, 2006). De acordo com Kowalski & Seasholtz (1991), existe a dificuldade de obter um número de amostras suficiente para que o *root mean squared error prediction*, ou RMSEP, seja estatisticamente significativo.

Já na validação cruzada, as amostras são as mesmas usadas no teste de calibração. Algumas amostras são separadas, um modelo é construído com as amostras restantes e a previsão é feita em relação às amostras separadas inicialmente.

A separação pode ser realizada em blocos, ou seja, um número determinado de amostras é deixado de fora no processo de construção do modelo e, a seguir, essas amostras são previstas pelo modelo construído ou, ainda, por um caso conhecido como *leave one out* (deixe um fora), em que uma amostra é deixada de fora no processo de construção do modelo e, a seguir, essa amostra é prevista pelo modelo construído. Em ambos os casos, o processo é repetido até que todas as amostras tenham sido previstas e a raiz quadrada da soma do quadrado dos erros da validação cruzada (RMSECV, do inglês *root mean square error of cross validation*) (Brereton, 2000).

3.6.11 Pré-tratamento espectral

Os dados espectrais devem ser corrigidos, pois sofrem inúmeras interferências. A interação complexa entre os componentes da amostra, dispersão de luz em amostras sólidas, reprodutibilidade pobre das medições, variação no espectro devido à temperatura e distorções espectrais causadas pelo *hardware* do equipamento, como ruídos no detector, deslocamentos de linha base e de comprimentos de onda, são exemplos desses efeitos (Sotelo, 2006).

O pré-tratamento espectral consiste na utilização de técnicas que permitem reduzir, eliminar ou padronizar o impacto desses fatores não desejáveis nos espectros, sem alterar a informação espectroscópica contida neles (Siesler et al., 2002).

São exemplos de pré-tratamentos: filtro de média móvel, derivada de Savitsky-Golay (Malinowski, 1991), alisamento e correção do fator multiplicativo do sinal (MSC) (Pantoja, 2006).

Segundo Martens & Naes (1996), a derivada vem sendo muito utilizada para melhorar a definição de bandas que se encontram sobrepostas em uma mesma região espectral e para a correção de linha base. Assim, as informações contidas nos diferentes comprimentos de ondas são, geralmente, acentuadas. A desvantagem da aplicação deste pré-tratamento é que não só sinais espectrais, mas também os ruídos tornam-se acentuados.

Espectros originais e espectros tratados com a primeira derivada são mostrados nas Figuras 7 e 8, respectivamente.

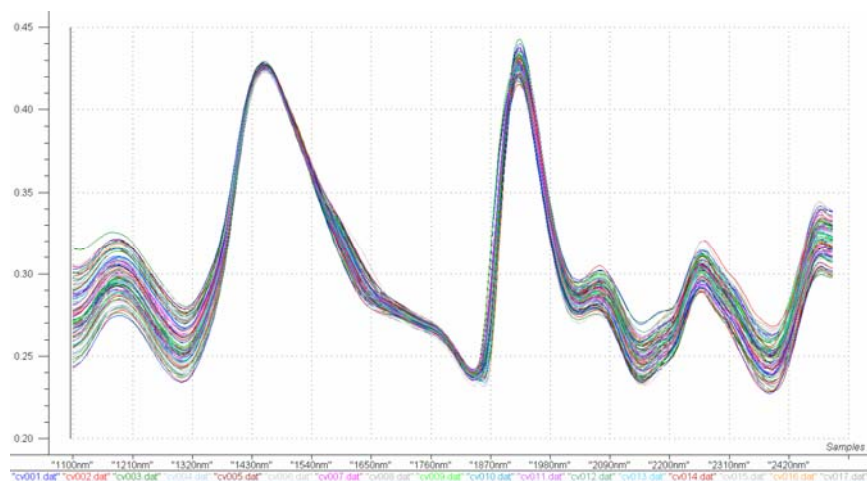


FIGURA 7 Espectros originais

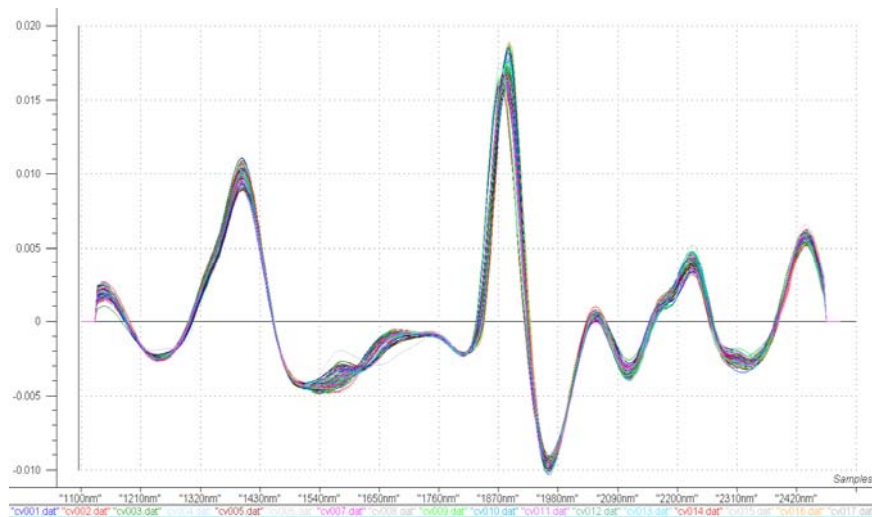


FIGURA 8 Espectros tratados com primeira derivada

3.6.12 Seleção de variáveis

A seleção de variáveis permite eliminar os comprimentos de onda que não são relevantes na modelagem, os que apenas induzem a ruídos e as informações irrelevantes ou não-lineares (Osborne et al., 1997).

Esta operação consiste na escolha de determinadas regiões do espectro que contêm os comprimentos de onda que melhor se correlacionam com o composto químico em questão. A seleção adequada de regiões espectrais permite minimizar os erros do modelo de calibração, melhorando significativamente a sua eficiência. É possível produzir um modelo mais robusto, simples de interpretar e com melhor precisão nas previsões (Oliveira et al., 2004).

3.6.13 Detecção de *outliers*

O resultado de qualquer teste estatístico é afetado pela qualidade dos dados utilizados. É, portanto, importante avaliar a qualidade dos dados de entrada, para garantir que eles estejam livres de erros.

Um dos erros mais comuns encontrados é a presença de amostras anômalas, chamadas de *outliers*, podendo a eliminação dessas amostras melhorar, de forma significativa, os modelos na calibração

Naes & Isaksson (1994) define *outliers* como sendo observações diferentes do resto do conjunto de dados. Podem ser irrelevantes, fortemente errôneos ou anormais em alguma forma, comparados à maioria dos dados.

Há dois tipos de situações em que valores podem ser considerados *outliers*. O primeiro está relacionado com a amostra utilizada para a obtenção dos espectros, que pode ter sofrido algum tipo de contaminação ou dano, por exemplo. O segundo tipo de *outlier* refere-se aos erros nos valores de referência que se encontram fora do intervalo previsto para os dados em questão.

Leverage é uma medida de afastamento da amostra em relação ao centro ou média dos dados e indica a influência que cada amostra exerce na calibração. O grau de *leverage* fornece condições para identificar possíveis *outliers*. Quando uma amostra tem um *leverage* próximo de 1, exerce forte influência no modelo. Se a amostra possui *leverage* próximo de 0, esta pode ser descrita como uma combinação linear de outras amostras (Kowalski & Seasholtz, 1991).

O gráfico de *scores* (PC_1 vs PC_2) também pode ser usado para indicar possíveis *outliers*. Martens & Naes (1996) utilizam outros testes de diagnóstico de *outliers*, baseados também em *leverages* e resíduos.

3.6.14 Número de fatores PLS

O número de variáveis latentes ou fatores PLS interfere nos valores nos resultados da calibração. Quando o número de fatores PLS no modelo é pequeno, os resultados podem não ser satisfatórios, já que a informação disponível nos dados originais não estará sendo totalmente explorada. Um número de fatores PLS maior que o necessário pode causar problemas no modelo por meio da modelagem de ruídos (Barthus, 1999). De acordo com estes autores, o número ideal de fatores PLS é o que resulta na menor variância residual da validação.

3.6.15 NIRS no setor florestal

No setor florestal, os primeiros trabalhos utilizando a espectroscopia no infravermelho próximo e técnicas de análise multivariada foram realizados por Birkett & Gambino (1988) e estavam direcionados para indústria de papel e celulose. Outros pesquisadores, como Garbutt et al. (1992), desenvolveram modelos de calibração para quantificar e caracterizar componentes químicos da madeira, como lignina e celulose e também para prever propriedades da polpa celulósica (Birkett & Gambino, 1988; Easty et al., 1990).

Entretanto, pesquisas comprovam também o sucesso de aplicação deste método na determinação das propriedades anatômicas, físicas e mecânicas da madeira.

Schultz & Burns (1990) utilizaram a espectroscopia no infravermelho próximo para determinar o teor de lignina, celulose e extrativos da madeira. Estudos realizados por Easty et al. (1990) e Garbutt et al. (1992) mostraram que propriedades anatômicas, como o teor de fibras em papéis, podem ser estimadas utilizando-se a espectroscopia no infravermelho próximo. Thygesen (1994), Hoffmeyer & Pedersen (1995) e Schimleck et al. (1999) mostraram que o NIR

pode ser utilizado para a predição da densidade da madeira. Thumm & Meder (2001) e Schimleck et al. (2002), trabalhando com *Pinus radiata*, concluíram que o NIRS pode ser usado na predição das propriedades mecânicas da madeira desta espécie. Recentemente, Hein (2008) estudou *Eucalyptus urophylla* e mostrou que as propriedades químicas da madeira podem ser estimadas pela técnica NIRS a partir dos espectros medidos em madeira sólida (íntegra) e madeira moída (desintegrada). Para a estimativa da densidade básica da madeira, Hein (2008) sugere que os espectros sejam medidos na face radial dos corpos-de-prova.

4 MATERIAL E MÉTODOS

4.1 Material biológico

Neste trabalho foram estudados seis clones de *Eucalyptus* (Tabela 2), provenientes de plantios comerciais com espaçamento de 3,0 x 3,3 m, com três anos de idade, pertencentes à empresa Cenibra (Celulose Nipo-Brasileira S.A.), localizados em quatro diferentes regionais: Cocais, Guanhães, Rio Doce-Ipaba e Santa Bárbara, no estado de Minas Gerais.

TABELA 2 Clones de *Eucalyptus*

Material genético	Espécie
Clone 57	híbrido natural de <i>Eucalyptus grandis</i>
Clone 1046	híbrido de <i>E. grandis</i> X <i>E.urophiella</i>
Clone 1213	híbrido de <i>E. grandis</i> X <i>E.urophiella</i>
Clone 1215	híbrido de <i>E. grandis</i> X <i>E.urophiella</i>
Clone 1274	híbrido de <i>E. grandis</i> X <i>E.urophiella</i>
Clone 7074	<i>Eucalyptus grandis</i>

Foram selecionadas árvores com diâmetro médio±desvio padrão em uma parcela de 10 x 10 plantas. No total, foram coletados 120 indivíduos, sendo 5 árvores-amostra, por clone e local. A caracterização dos locais de plantio é apresentada na Tabela 3.

TABELA 3 Caracterização dos locais

Local	Altitude (m)	Pluviosidade (mm)	Relevo
Cocais	995/1230	1291,5	montanhoso
Guanhães	820/980	1191,2	ondulado
Rio Doce-Ipaba	131/380	1235,3	ondulado
Santa Bárbara	709/1203	1455,6	ondulado

4.2 Métodos destrutivos

4.2.1 Densidade básica da madeira

A densidade básica da madeira foi encontrada por dois diferentes métodos de amostragem: densidade determinada a 1,30 m do solo (DBDAP) e por meio de uma amostra composta representativa da árvore (DBM).

Foi retirado da árvore um disco de 2,5 cm de espessura, a 1,30 m do solo e determinada a densidade média (DBDAP) de duas cunhas opostas, empregando-se o método da medição indireta do volume (balança hidrostática).

Para a determinação da densidade básica média da árvore (DBM), foram retirados toretes de 1 m de comprimento a 0%, 25%, 50%, 75% e 100% da altura comercial do tronco, considerada até um diâmetro mínimo de 7 cm (Figura 9). Estes toretes foram transformados em cavacos, os quais formaram uma mistura de todos os pontos da amostragem longitudinal considerada nos troncos das árvores, sendo essa amostra composta utilizada na determinação da densidade básica média da árvore.

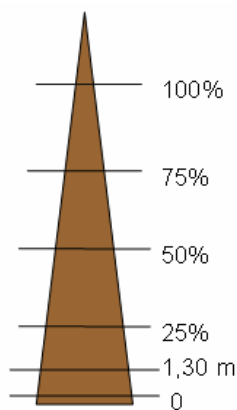


FIGURA 9 Esquema da retirada dos corpos-de-prova na árvore

4.2.2 Dimensões das fibras e vasos

O método utilizado para a preparação do macerado para análise das fibras e determinação das suas dimensões foi o chamado peróxido de hidrogênio (H_2O_2), utilizado por Ramalho (1987), que usa como solução macerante água oxigenada 30% e ácido acético glacial, na proporção 1:1. As lâminas foram coradas com azul de astra. Foram mensuradas 45 fibras por árvore. As mensurações foram realizadas por meio de microscópio óptico “Olympus BX 41” acoplado ao sistema de análise de imagem de concepção canadense “Win Cell”. As imagens foram coletadas com o auxílio de uma câmera de captura digital para o microcomputador, onde foram realizadas as medições.

4.2.3 Composição química da madeira

Para a determinação da composição química da madeira, os cavacos foram transformados em serragem, no moinho Willey. Foi utilizada a fração de serragem que passou pela peneira de malha 40 mesh e ficou retida na peneira de 60 mesh (ASTM). Após a classificação, a serragem foi acondicionada em ambiente climatizado. O teor absolutamente seco foi determinado de acordo com a norma TAPPI 264 om-88 (TAPPI, 1988). As análises químicas realizadas e suas respectivas normas estão apresentadas na Tabela 4.

TABELA 4 Análises químicas e normas utilizadas

Características	Metodologia
Extrativos em acetona	TAPPI 280 pm-99 (TAPPI, 1999)
Lignina insolúvel	Gomide & Demuner (1986)
Lignina solúvel	Godschmid (1971)
Relação siringila/guaiacila (S/G)	Lin & Dence (1992)
Análise de carboidratos	Kaar et al. (1991)

4.3 Espectroscopia no infravermelho próximo

4.3.1 Preparo dos corpos-de-prova

Foram retiradas das árvores, a 1,30 m de altura do solo (DAP), amostras com dimensões de, aproximadamente, 0,8 cm de espessura, 2,5 cm de largura e 6,0 cm de comprimento, para análise no infravermelho próximo, designadas neste trabalho como amostras de madeira sólida (Figura 10). As mesmas foram polidas utilizando-se lixa n° 120.

A madeira moída (Figura 11), utilizada para a aquisição dos espectros no infravermelho próximo, foi obtida a partir da moagem de cavacos em moinho martelo, representando uma amostra composta formada pela mistura de todos os pontos da amostragem longitudinal considerada nos troncos das árvores (0%, 25%, 50%, 75% e 100% da altura comercial do tronco).



FIGURA 10 Corpos-de-prova utilizados nas leituras NIRS



FIGURA 11 Cubeta com madeira moída utilizada na aquisição de espectros

As amostras foram previamente acondicionadas em sala climatizada com temperatura média de 20°C e umidade relativa do ar em torno de 65%, para a padronização das leituras na mesma temperatura e umidade.

4.3.2 Parâmetros de aquisição espectral

As amostras para a aquisição dos espectros no infravermelho próximo foram submetidas à leitura, utilizando-se o espectrômetro Femto e o espectrômetro Bruker, para posterior comparação.

A aquisição espectral foi realizada na gama de 750 a 2.500 nm com resolução espectral de 2 nm em modo de reflexão difusa, por meio de um espectrômetro Bruker (Figura 12), em conjunto com o programa *OPUS* versão 4.2. O aparelho utiliza como referência para calibrar a absorção da luz infravermelha próxima uma base com superfície banhada a ouro. O espectro de cada amostra foi obtido por meio da média de 32 varreduras. Este aparelho emprega a transformada de Fourier e usa como fonte de radiação luminosa uma lâmpada do tipo halogênio.



FIGURA 12 Espectrômetro Bruker

Utilizando-se espectrômetro Femto (Figura 13), de fabricação nacional, juntamente com Software FemWin900, realizou-se a aquisição dos espectros num intervalo variando de 1.100 a 2.500nm com uma resolução espectral de 2 nm, totalizando 700 valores de absorbância. O equipamento utiliza um corpo de teflon como modo de referência e trabalha em modo de reflexão difusa (log 1/R). A fonte de radiação luminosa consiste numa lâmpada de tungstênio-halogênio 55 W.



FIGURA 13 Espectrômetro Femto

4.3.3 Aquisição espectral

As leituras de reflectância difusa foram realizadas pelos dois diferentes espectrômetros (Bruker e Femto) para os dois tipos de amostras: madeira sólida na face transversal dos corpos-de-prova e madeira moída.

A amostra de madeira moída e o esquema de funcionamento do espectrômetro NIR Femto são apresentados na Figura 14.

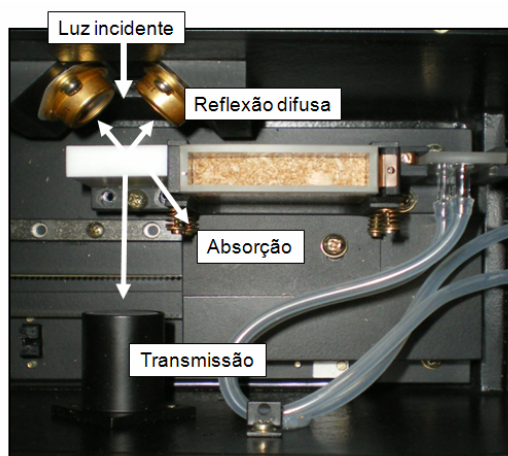


FIGURA 14 Esquema de funcionamento do espectrômetro NIR Femto

4.3.4 Calibração e validação dos modelos

Para estabelecer a relação entre as informações espectrais e as propriedades investigadas, foi utilizada a regressão dos mínimos quadrados parciais (*PLS regression*), por meio do programa *The Unscrambler*® versão 9.1.

Os modelos foram ajustados com um máximo de 12 fatores PLS, tendo o número de fatores PLS adotado para cada modelo sido o valor que minimizou a variância residual da calibração e da validação cruzada.

As calibrações foram realizadas a partir dos espectros originais e dos espectros tratados matematicamente pelo método da primeira e da segunda derivadas “*Savitzky-Golay*” (Savitzky & Golay, 1964).

Amostras classificadas como *outliers* no gráfico de resíduos de *Student* foram detectadas e excluídas dos modelos. O método da validação cruzada completa (*full cross-validation*) foi adotado para a validação dos modelos de calibração.

Para cada propriedade analisada na madeira foram selecionadas, pelo programa, faixas espectrais que melhor se relacionaram com a propriedade de interesse.

4.3.5 Seleção dos modelos

Para selecionar os modelos de predição, foram utilizados os seguintes critérios: coeficiente de correlação do modelo na validação cruzada (Rcv), erro padrão da validação cruzada (SECV), número de fatores PLS utilizados na calibração (Fat) e a relação de desempenho do desvio (RPD).

O SECV mede a eficiência do modelo de calibração na predição da propriedade de interesse em um lote de amostras desconhecidas, diferentes das amostras que compõem o lote de calibração (Schimleck et al., 2003).

O RPD corresponde à relação entre o desvio padrão dos valores da propriedade analisada pelo método convencional (SD) e o erro padrão da validação cruzada (SECV). Este valor permite a comparação entre calibrações para diferentes variáveis, já que possibilita a padronização do erro padrão da predição (Williams & Sobering, 1993).

De acordo com Schimleck et al. (2003), calibrações com a relação de desempenho do desvio (RPD) superior a 2,5 são consideradas satisfatórias para a seleção de árvores em programas de melhoramento, embora valores de RPD

iguais ou superiores a 1,5 sejam suficientes para leituras iniciais. Assim, a espectroscopia de infravermelho próximo pode ser utilizada para predições iniciais, com o objetivo de selecionar árvores jovens com potencial para seleção.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 Propriedades da madeira

5.1.1 Densidade básica

Os valores médios para as densidades básicas: DBDAP e DBM da madeira de *Eucalyptus*, para as regionais e os clones, são apresentados nas Tabelas 5 e 6, respectivamente.

O número de amostras usadas por clone foi igual a 20 e, por regional igual a 30, totalizando as 120 árvores.

TABELA 5 Densidade básica média da madeira de *Eucalyptus* para as regionais

Regionais		DBDAP (g/cm ³)	DBM (g/cm ³)
Cocais	Média	0,47	0,42
	Min	0,30	0,35
	Max	0,64	0,47
	CV (%)	17,83	6,88
Guanhães	Média	0,44	0,44
	Min	0,36	0,36
	Max	0,49	0,48
	CV (%)	7,72	7,85
Rio Doce	Média	0,44	0,44
	Min	0,39	0,38
	Max	0,49	0,48
	CV (%)	5,82	6,08
Sta. Bárbara	Média	0,42	0,43
	Min	0,33	0,35
	Max	0,46	0,46
	CV (%)	7,62	8,12

DBDAP: densidade básica no DAP; DBM: densidade básica média; CV: coeficiente de variação

TABELA 6 Densidade básica média da madeira de *Eucalyptus* para os clones

Clones		DBDAP(g/cm ³)	DBM(g/cm ³)
57	Média	0,45	0,43
	Min	0,39	0,41
	Max	0,52	0,45
	CV	6,15	2,84
1046	Média	0,45	0,43
	Min	0,42	0,42
	Max	0,56	0,45
	CV	6,76	2,02
1213	Média	0,47	0,46
	Min	0,39	0,42
	Max	0,63	0,48
	CV	11,23	3,05
1215	Média	0,44	0,45
	Min	0,30	0,43
	Max	0,56	0,47
	CV	9,88	2,78
1274	Média	0,47	0,45
	Min	0,42	0,42
	Max	0,64	0,48
	CV	12,11	4,07
7074	Média	0,38	0,37
	Min	0,33	0,35
	Max	0,41	0,41
	CV	6,54	5,53

DBDAP: densidade básica no DAP; DBM: densidade básica média; CV: coeficiente de variação

A densidade básica média (DBM) e a densidade determinada a 1,30 m de altura do solo (DBDAP) das madeiras de *Eucalyptus* apresentaram valores médios gerais de 0,43 e 0,44 g/cm³, respectivamente. O menor valor foi evidenciado para o clone 7074 (0,37g/cm³) e o maior, para o clone 1274

(0,47g/cm³). O coeficiente de variação geral (CV) foi baixo, com valores de 7,37% para a DBM e 11,63% para DBDAP.

Os valores de densidade básica estão de acordo com os encontrados na literatura (Carpim & Barrichelo, 1984; Alzate, 2004).

5.1.2 Propriedades químicas

Na Tabela 7 são apresentadas as propriedades químicas das madeiras para as regionais e, na Tabela 8, os valores das mesmas para os clones de *Eucalyptus*.

TABELA 7 Propriedades químicas das madeiras de *Eucalyptus* para as regionais

Regionais		GLI	XIL	CEL	HEM	LT	EXT	SG
Cocais	Média	44,62	10,85	43,23	25,62	30,20	0,96	2,88
	Min	39,74	8,92	38,11	21,13	26,40	0,50	2,15
	Max	48,80	12,74	47,72	28,72	32,75	1,99	3,36
	CV	5,85	9,62	6,37	7,74	4,57	34,25	8,28
Guanhães	Média	43,57	11,26	41,90	26,96	29,96	1,19	2,82
	Min	39,57	9,95	37,84	23,90	27,20	0,55	2,15
	Max	48,32	12,22	46,85	29,05	32,30	2,56	3,29
	CV	5,57	5,52	5,99	4,73	5,18	39,15	10,79
Rio Doce	Média	43,26	11,09	41,66	26,39	30,80	1,15	2,86
	Min	41,14	9,76	39,58	24,00	29,33	0,59	2,57
	Max	46,31	12,58	44,57	28,80	32,80	2,48	3,18
	CV	3,60	7,80	3,70	4,83	3,15	32,41	6,17
Sta. Bárbara	Média	42,53	11,37	40,99	27,04	30,89	1,10	2,77
	Min	38,92	9,75	37,66	25,04	27,43	0,41	2,06
	Max	47,28	12,53	45,71	28,76	33,39	2,53	3,44
	CV	4,87	6,01	5,06	3,50	5,55	43,58	12,16

GLI: glicanas (%); XIL: xilanas (%) CEL: celulose (%); HEM: hemicelulose (%). LT: lignina total (%); EXT: extrativos (%); S/G: relação siringil/guaicil (mol/mol); CV: coeficiente de variação (%)

TABELA 8 Propriedades químicas das madeiras de *Eucalyptus* para os clones

Clones		GLI	XIL	CEL	HEM	LT	EXT	SG
57	Média	44,10	10,24	42,58	25,24	31,10	1,07	2,55
	Min	39,33	8,92	37,70	21,13	29,69	0,60	2,29
	Max	48,80	11,14	47,72	27,76	33,19	1,46	2,74
	CV	4,89	7,85	5,38	7,29	2,92	22,69	5,68
1046	Média	44,73	11,16	43,17	26,27	29,52	1,04	3,01
	Min	41,63	10,30	40,00	23,90	27,43	0,60	2,15
	Max	48,32	12,01	46,85	28,76	32,33	2,48	3,35
	CV	4,50	4,24	4,83	5,00	4,93	44,62	7,75
1213	Média	44,78	10,37	43,21	25,83	29,78	1,18	3,00
	Min	40,54	9,75	38,72	23,64	26,40	0,41	2,06
	Max	47,99	11,74	46,78	28,80	31,39	2,53	3,44
	CV	4,67	5,73	5,43	5,69	3,99	43,80	9,17
1215	Média	42,87	11,41	41,36	26,77	30,73	1,15	2,71
	Min	40,59	10,60	38,71	24,21	28,41	0,50	2,55
	Max	47,28	12,24	45,71	28,76	33,01	2,56	3,02
	CV	4,72	3,37	5,09	4,61	4,47	46,74	5,33
1274	Média	43,15	12,02	41,58	27,38	30,04	1,00	2,87
	Min	39,74	11,41	38,11	25,80	27,20	0,48	2,49
	Max	47,37	12,74	45,86	28,80	32,64	1,99	3,25
	CV	5,18	2,57	5,33	3,14	5,35	36,20	6,30
7074	Média	41,34	11,67	39,77	27,51	31,59	1,16	2,85
	Min	38,92	10,99	37,66	26,15	29,43	0,65	2,15
	Max	44,02	12,53	42,51	29,05	33,39	1,94	3,36
	CV	3,34	4,01	3,46	2,99	3,47	30,06	10,68

GLI: glicanas (%); XIL: xilanas (%) CEL: celulose (%); HEM: hemicelulose (%). LT: lignina total (%); EXT: extrativos (%); S/G: relação siringil/guaicil (mol/mol); CV: coeficiente de variação (%)

Os valores médios gerais para os teores de glicanas, xilanas, celulose, hemiceluloses, lignina total e extrativos foram de 43,50%, 11,14%, 41,94%, 26,50%, 30,46% e 1,10 %. Esses valores estão de acordo com os normalmente observados na literatura para madeira de *Eucalyptus*. Gomide et al. (2005)

estudaram a composição química de 13 clones de *Eucalyptus* e obteve resultados variando entre 27,5% a 31,7%, para teor de lignina total; de 1,76% a 4,13%, para teor de extrativos e de 64,5% a 70,2%, para teores de holocelulose. A relação entre as ligninas siringil e guaiacil (S/G) nas madeiras de eucalipto analisadas apresentou frequência das estruturas siringil cerca de duas a três vezes maior que a das estruturas guaiacil. Mokfienski et al. (2003) encontraram valores de relação S/G de 4,7, para diferentes espécies de *Eucalyptus*, como o *E. globulus*.

5.1.3 Características anatômicas

As características morfológicas médias das fibras das madeiras de *Eucalyptus*, para as regionais e para os clones, são apresentadas nas Tabelas 9 e 10, respectivamente.

TABELA 9 Valores médios dos caracteres anatômicos das fibras para as regionais

Regionais		CF (mm)	LF (µm)	DL (µm)	EP (µm)
Cocais	Média	1,04	17,08	9,87	3,64
	Min	0,82	14,69	8,02	2,98
	Max	1,18	18,61	11,56	4,15
	CV (%)	8,28	4,66	7,76	8,93
Guanhães	Média	1,06	17,02	9,34	3,87
	Min	0,92	15,21	7,21	2,95
	Max	1,21	18,95	12,12	4,74
	CV (%)	6,34	5,25	12,19	11,61
Rio Doce	Média	0,99	15,44	8,45	3,50
	Min	0,79	12,87	6,44	2,99
	Max	1,12	17,83	10,67	4,11
	CV (%)	8,80	9,75	13,71	8,30
Santa Bárbara	Média	0,95	14,28	7,48	3,40
	Min	0,82	12,57	6,21	2,68
	Max	1,13	16,64	9,83	3,78
	CV (%)	7,35	6,83	11,31	8,05

CF: comprimento da fibra (mm); LF: largura da fibra (µm); DL: diâmetro do lume (µm); EP: espessura da parede (µm); CV: coeficiente de variação (%)

TABELA 10 Valores médios dos caracteres anatômicos das fibras para os clones

Clones		CF (mm)	LF (μm)	DL (μm)	EP (μm)
57	Média	1,00	15,58	8,49	3,56
	Min	0,84	12,57	6,25	3,16
	Max	1,16	17,26	10,86	4,16
	CV (%)	9,36	7,95	12,49	7,93
1046	Média	1,04	16,18	8,51	3,86
	Min	0,82	13,15	6,21	3,25
	Max	1,18	18,71	10,19	4,57
	CV (%)	7,92	10,35	15,32	8,53
1213	Média	1,04	16,29	8,91	3,70
	Min	0,88	13,04	6,41	2,68
	Max	1,21	18,02	10,32	4,11
	CV (%)	8,29	9,20	12,16	8,89
1215	Média	1,01	15,86	8,82	3,54
	Min	0,87	12,83	6,40	3,17
	Max	1,12	18,61	11,32	4,27
	CV (%)	6,28	11,07	15,86	8,65
1274	Média	1,02	15,77	8,48	3,66
	Min	0,86	12,79	6,45	3,05
	Max	1,16	18,10	11,01	4,74
	CV (%)	9,05	9,98	16,21	11,81
7074	Média	0,96	16,05	9,50	3,29
	Min	0,79	12,87	6,75	2,83
	Max	1,15	18,95	12,12	4,15
	CV (%)	10,31	11,18	16,94	11,45

CF: comprimento da fibra (mm); LF: largura da fibra (μm); DL: diâmetro do lume (μm); EP: espessura da parede (μm); CV: coeficiente de variação (%)

O valor médio geral encontrado para o comprimento das fibras das madeiras dos clones estudados foi de 1,01 mm. As dimensões da largura das fibras, diâmetro do lume e espessura da parede das fibras foram de 15,96; 8,79; e 3,60 μm , respectivamente. Estes valores estão de acordo com os encontrados na

literatura para dimensões das fibras da madeira de *Eucalyptus* (Tomazello Filho, 1983; Carvalho et al., 1998; Alzate, 2004).

5.2 Calibrações NIRS

As calibrações para a predição das propriedades da madeira de *Eucalyptus* foram realizadas utilizando-se a madeira moída e sólida, em dois espectrômetros distintos: Bruker e Femto. Os números de amostras utilizadas nas calibrações por clone foram iguais a 20 e a 30 por regional, totalizando 120 indivíduos.

Nos resultados deste item são apresentados apenas os modelos que apresentaram melhor desempenho (maiores valores de coeficiente de correlação da validação cruzada - Rcv e da relação de desempenho do desvio - RPD).

De acordo com Schimleck et al. (2003), calibrações com a relação de desempenho do desvio (RPD) igual ou superior a 1,5 são suficientes para leituras iniciais. Assim, a espectroscopia de infravermelho próximo pode ser utilizada para predições iniciais com o objetivo de selecionar árvores jovens com potencial para seleção.

Os demais resultados das calibrações encontram-se em Anexo.

5.2.1 Calibração para densidade básica no DAP (DBDAP)

As calibrações NIRS para a estimativa da densidade básica da madeira, para os seis clones de *Eucalyptus* estudados e para as quatro regionais encontram-se nas Tabelas 11 e 12, respectivamente.

TABELA 11 Calibrações NIRS para densidade básica no DAP por clone

Espectro	Clone	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	57	2d	0,99	0,77	8	0,003	0,017	1	1,6
F.moída	1046	1d	0,93	0,89	3	0,005	0,007	1	4,3
B.moída	1213	2d	0,95	0,85	3	0,016	0,028	1	1,9
B.sólida	1215	osd	0,79	0,33	5	0,018	0,034	2	1,2
F.sólida	1274	osd	0,95	0,82	4	0,013	0,025	2	2,3
B. moída	7074	1d	0,85	0,81	1	0,013	0,014	1	1,7

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.moída: aparelho Femto amostra de madeira moída; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento; osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (g/cm^3); SECV: erro padrão da validação cruzada (g/cm^3); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

Observa-se que os valores dos coeficientes de correlação da validação cruzada (Rcv) para densidade básica na altura do peito (DBDAP) variaram de 0,33 (Clone 1215) a 0,89 (Clone 1046). Os modelos para os clones 1046, 1213 e 1274 tiveram os maiores valores de Rcv e RPD, destacando-se entre eles o 1046, com baixos SEC ($0,005 \text{ g/cm}^3$) e SECV ($0,007 \text{ g/cm}^3$) e alto RPD (4,3). Para calibrar este modelo, foram utilizados três fatores PLS, descartada uma amostra considerada outlier e os espectros adquiridos por meio do aparelho Bruker com as amostras de madeira moída.

Cogdill et al. (2004) estudaram a densidade básica de *Pinus taeda* por meio de espectroscopia de infravermelho próximo e obtiveram calibrações PLS com o coeficiente de correlação (R) variando de 0,90 a 0,91 e desvio padrão da validação cruzada variando de $0,038$ a $0,041 \text{ g/cm}^3$, para modelos com seis a treze fatores PLS.

TABELA 12 Calibrações NIRS para densidade básica no DAP por regional

Espectro	Regional	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	Cocais	1d	0,99	0,86	12	0,008	0,043	2	1,9
F.sólida	Guanhães	osd	0,93	0,89	6	0,012	0,016	1	2,1
F.sólida	Rio Doce	1d	0,99	0,81	12	0,002	0,015	1	1,7
B.moída	Sta. Bárbara	osd	0,99	0,88	12	0,002	0,016	1	2,0

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (g/cm³); SECV: erro padrão da validação cruzada (g/cm³); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio

Para predizer a densidade básica no DAP da árvore (DBDAP), os modelos das localidades de Cocais, Guanhães, Rio Doce e Santa Bárbara apresentaram, respectivamente, Rcv de 0,86; 0,89; 0,81 e 0,88, e RPD de 1,9; 2,1; 1,7 e 2,0. A regional de Santa Bárbara apresentou maiores valores de RPD para as duas densidades básicas da madeira. Na geração destes modelos, os melhores resultados foram alcançados quando se utilizou o aparelho da marca Femto, com amostra de madeira sólida e o aparelho Bruker, com a amostra moída.

Gindl et al. (2001) estudaram as propriedades físicas de árvores da espécie *Larix decidua* Mill. Os modelos de calibração gerados para a predição da densidade básica apresentaram um coeficiente de correlação (R) de 0,98 e RMSEC de 0,018 e na validação do modelo, pela validação cruzada, os autores obtiveram coeficiente de correlação de 0,97 e RMSECV 0,023.

5.2.2 Calibração para densidade básica média (DBM)

Na Tabela 13 são apresentadas as calibrações NIRS para as densidades avaliadas na madeira de *Eucalyptus* para os seis clones.

TABELA 13 Calibrações NIRS para densidade básica média (DBM) por clone

Espectro	Clones	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	57	osd	0,99	0,95	8	0,001	0,004	2	3,4
B.moída	1046	1d	0,97	0,91	4	0,002	0,003	1	2,6
B.sólida	1213	osd	0,99	0,78	9	0,000	0,007	2	2,1
B.moída	1215	1d	0,99	0,93	7	0,001	0,004	1	3,2
F.sólida	1274	1d	0,98	0,92	5	0,004	0,007	1	2,7
B.moída	7074	osd	0,95	0,89	5	0,006	0,009	1	2,4

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento; osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (g/cm³); SECV: erro padrão da validação cruzada (g/cm³); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

As calibrações para estimar a densidade básica média dos clones apresentaram coeficiente de correlação na validação cruzada entre 0,78 e 0,95, tendo o clone 57 apresentado os maiores valores de Rcv (0,95) e RPD (3,4) e baixo erro padrão de validação cruzada (0,004g/cm³).

Na Tabela 14 encontram-se as calibrações para estimativa da densidade básica média das madeiras nas quatro regionais.

TABELA 14 Calibrações NIRS para densidade básica média (DBM) por regional

Espectro	Regional	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	Cocais	osd	0,96	0,89	8	0,007	0,013	1	2,2
B.moída	Guanhães	osd	0,95	0,85	9	0,011	0,018	0	1,8
B.moída	Rio Doce	1d	0,97	0,86	8	0,006	0,013	2	2,1
B.moída	Sta. Bárbara	1d	0,95	0,91	4	0,009	0,013	1	2,6

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; Trat: tratamento; osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (g/cm³); SECV: erro padrão da validação cruzada (g/cm³); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio

Pelos dados da Tabela 14 observa-se que quando se utilizou a regressão PLS para predizer a densidade básica média nas regionais, as melhores

correlações na validação cruzada foram obtidas por meio de leituras realizadas com o aparelho Bruker na madeira moída. Os modelos gerados para as quatro regionais foram satisfatórios, apresentando valores de coeficientes de correlação da validação cruzada variando entre 0,85 a 0,91 e RPD entre 1,8 e 2,6.

Jones et al. (2006) avaliaram a densidade básica da madeira de *Pinus taeda* L. com idade variando de 21 a 26 anos de idade, provenientes de três diferentes regiões da Geórgia, EUA. Estes autores ajustaram modelos para prever a densidade básica dessas madeiras a partir dos espectros originais e encontraram coeficiente de correlação (R) de 0,90 e RPD de 2,28, com o uso de seis fatores PLS.

5.2.3 Calibração para teor de glicanas

As calibrações NIRS para a estimativa do teor de glicanas na madeira de *Eucalyptus* por clone e regional estão apresentadas nas Tabelas 15 e 16, respectivamente.

TABELA 15 Calibrações NIRS para teor de glicanas por clone

Espectro	Clone	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
F.sólida	57	1d	0,82	0,72	3	1,210	1,505	0	1,4
B.sólida	1046	1d	0,96	0,93	3	0,532	0,787	2	2,6
F.moída	1213	osd	0,90	0,81	3	1,101	1,506	1	1,4
F.sólida	1215	osd	0,88	0,67	6	0,814	1,413	1	1,4
B.sólida	1274	osd	0,99	0,82	8	0,273	1,259	1	1,8
F.moída	7074	osd	0,88	0,75	3	1,852	1,305	1	1,0

B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.moída: aparelho Femto amostra de madeira moída; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento; osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio

O teor de glicanas foi calibrado por modelos com valores de coeficientes de correlação - Rcv variando de 0,67 a 0,93, com destaque para a calibração no

clone 1046, cujo modelo apresentou além de maior Rcv (0,93) maior RPD (2,3). Para a geração deste modelo, duas amostras consideradas *outliers* foram descartadas, três fatores PLS usados e o tratamento espectral da primeira derivada foi empregado para melhoria do mesmo.

Jones et al. (2006), estudando árvores de *Pinus taeda* com idade entre 21 e 25 anos, encontraram modelo para prever o teor de glicanas, com R igual a 0,89 e SECV de 1,780%.

TABELA 16 Calibrações NIRS para teor de glicanas por regional

Espectro	Regional	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	Cocais	osd	0,92	0,83	7	0,981	1,481	1	1,7
B.moída	Guanhães	1d	0,90	0,84	2	1,038	1,334	1	1,8
F.sólida	Rio Doce	osd	0,95	0,86	10	0,450	0,762	2	2,0
B.sólida	Sta. Bárbara	osd	0,95	0,88	8	0,596	0,994	1	2,1

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); *outlier*: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

O modelo para estimar o teor de glicanas da madeira proveniente de Santa Bárbara foi o que apresentou os melhores ajustes, com Rcv de 0,88, RPD de 2,1 e o menor SECV (0,994%). O coeficiente de correlação encontrado foi superior ao obtido por Punsuvon et al. (2003), que avaliaram o teor de glicanas em *Eucalyptus camaldulensis*, cultivados na Tailândia. Estes autores encontraram coeficiente de correlação na calibração de 0,60 e erro padrão da predição (SECV) de 1,353%, utilizando regressão PLS.

5.2.4 Calibração para teor de xilanas

As calibrações NIRS para teor de xilanas avaliado na madeira dos clones de *Eucalyptus* encontram-se na Tabela 17.

TABELA 17 Calibrações NIRS para teor de xilanas por clone

Espectro	Clone	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
F.sólida	57	2d	0,96	0,90	4	0,188	0,300	2	2,7
B.moída	1046	osd	0,98	0,89	8	0,069	0,210	1	2,3
F.moída	1213	osd	0,95	0,89	5	0,252	0,371	1	1,6
B.moída	1215	2d	0,99	0,95	11	0,009	0,120	1	3,2
B.moída	1274	osd	0,90	0,79	5	0,116	0,169	1	1,8
F.sólida	7074	2d	0,82	0,72	2	0,264	0,323	1	1,4

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; F.moída: aparelho Femto amostra de madeira moída; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

A calibração para o teor de xilanas gerou modelos com coeficientes de correlação na validação cruzada, Rcv, entre 0,72 e 0,95 e erro padrão (SECV) variando de 0,120% a 0,371%. Os valores do modelo gerado para o clone 1215, quando foram utilizados 11 fatores PLS e tratamento segunda derivada, foram de: coeficientes de correlação para calibração e validação cruzada (Rc e Rcv) de 0,99 e 0,95, respectivamente; erro padrão da validação cruzada (SECV) de 0,120% e relação de desempenho do desvio (RPD) de 3,2.

Punsuvon et al. (2003) estudaram as propriedades químicas de *Eucalyptus camaldulensis* plantados na Tailândia e encontraram modelo de calibração para determinar o teor de xilanas com valores de SEP de 0,340% e R de 0,84, utilizando três fatores PLS.

Os modelos gerados para predição do teor de xilanas nas regionais de Cocais, Guanhães, Rio Doce e Santa Bárbara são apresentados na Tabela 18.

TABELA 18 Calibrações NIRS para teor de xilanas por regional

Espectro	Regional	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	Cocais	1d	0,96	0,93	2	0,266	0,382	2	2,7
F.moída	Guanhães	2d	0,84	0,75	3	0,379	0,476	1	1,3
B.moída	Rio Doce	1d	0,94	0,90	3	0,273	0,360	1	2,4
B.moída	Sta. Bárbara	1d	0,99	0,79	7	0,053	0,418	0	1,6

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.moída: aparelho Femto amostra de madeira moída; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); *outlier*: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

O teor de xilanas para as regionais foi calibrado por modelos com valores de correlação Rcv variando de 0,75 a 0,93, e RPD de 1,3 a 2,7. O melhor modelo foi gerado para a localidade de Cocais, aplicando o tratamento da primeira derivada e usando dois fatores PLS.

Jones et al. (2006) estimaram o teor de xilanas em *Pinus taeda* provenientes de sete diferentes regiões na Geórgia, EUA e obtiveram coeficiente de correlação (R) de 0,97 e desvio padrão da validação cruzada (SECV) de 0,41, com o uso de seis fatores PLS.

Observa-se que, para quatros dos clones e para todas as regionais, os melhores ajustes foram apresentados quando as leituras foram realizadas na madeira moída.

5.2.5 Calibração para teor de celulose

Nas Tabelas 19 e 20 é apresentado o resumo das calibrações PLS desenvolvidas para predizer os teores de celulose nas madeiras dos clones e nas regionais, respectivamente.

TABELA 19 Calibrações NIRS para teor de celulose por clone

Espectro	Clone	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
F.sólida	57	2d	0,93	0,83	4	0,829	1,284	1	1,8
B.moída	1046	osd	0,89	0,80	4	0,934	1,300	1	1,6
F.sólida	1213	osd	0,92	0,79	7	0,837	1,424	1	1,6
B.moída	1215	1d	0,99	0,83	8	0,166	1,073	1	2,0
B.sólida	1274	osd	0,98	0,86	8	0,321	1,131	2	2,0
F.moída	7074	osd	0,85	0,77	3	1,519	1,901	1	0,8

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

Os ajustes para estimar o teor de celulose dos clones apresentaram Rcv variando entre 0,77 (Clone 7074) a 0,86 (Clone 1274). Para a geração do modelo para o clone 1274, foram descartadas duas amostras consideradas *outliers*. As leituras foram realizadas no espectrômetro Bruker com a amostra de madeira sólida. O número de fatores PLS utilizados foi igual a oito.

Schimleck et al. (2004), estudando *Eucalyptus nitens* aos 13 anos de idade, localizados no norte da Tasmânia, Austrália, encontraram o R para predição do teor de celulose variando entre 0,64 a 0,93 e o erro padrão da predição (SEP) entre 0,500% a 1,200%.

TABELA 20 Calibrações NIRS para teor de celulose por regional

Espectro	Regional	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	Cocais	osd	0,93	0,81	8	0,944	1,638	1	1,7
B.moída	Guanhães	1d	0,89	0,85	2	1,133	1,320	1	1,9
F.sólida	Rio Doce	osd	0,87	0,76	6	0,748	1,006	1	1,5
B.moída	Sta. Bárbara	2d	0,93	0,88	3	0,610	0,812	2	2,6

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

Quando o espectrômetro Bruker e a amostra de madeira moída foram usados juntamente para as leituras, os modelos para três regionais apresentaram melhor desempenho. Os maiores valores de Rcv e RPD (0,88 e 2,6) dos ajustes foram provenientes dos indivíduos localizados na regional de Santa Bárbara.

Jones et al. (2006) avaliaram as propriedades químicas de 17 árvores de *Pinus taeda* L., com idades entre 21 a 25 anos, provenientes de sete diferentes regiões na Geórgia, EUA. Para celulose, calibraram modelo com R de 0,92 e SECV de 0,92 com cinco componentes PLS.

5.2.6 Calibração para teor de hemiceluloses

Os resumos dos modelos calibrados para predição do teor de hemiceluloses na madeira de *Eucalyptus*, por clone e por regional, encontram-se nas Tabelas 21 e 22, respectivamente.

TABELA 21 Calibrações NIRS para teor de hemiceluloses por clone

Espectro	Clone	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
F.sólida	57	osd	0,89	0,78	5	0,793	1,150	1	1,6
B.moída	1046	1d	0,92	0,86	2	0,462	0,610	1	2,2
B.moída	1213	osd	0,90	0,84	4	0,636	0,808	1	1,8
B.moída	1215	2d	0,79	0,72	1	0,665	0,765	1	1,6
B.sólida	1274	osd	0,98	0,89	8	0,161	0,369	1	2,3
F.sólida	7074	2d	0,91	0,85	5	0,333	0,428	1	1,9

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento; osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

A calibração para predizer o teor de hemiceluloses nos clones gerou modelos com coeficientes de correlação na validação cruzada, Rcv, entre 0,72 a 0,89 e erro padrão (SECV) variando de 0,369% a 1,150%. Os valores do modelo

gerado para o clone 1274, quando foram utilizados oito fatores PLS e dados espectrais originais, foram de: coeficientes de correlação para calibração e validação cruzada (Rc e Rcv) de 0,98 e 0,89, respectivamente, erro padrão da validação cruzada (SECV) de 0,369% e relação de desempenho do desvio (RPD) de 2,3.

TABELA 22 Calibrações NIRS para teor de hemiceluloses por regional

Espectro	Regional	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
F.sólida	Cocais	2d	0,95	0,87	5	0,568	0,907	2	2,2
B.moída	Guanhães	osd	0,93	0,65	8	0,450	1,011	1	1,2
B.moída	Rio Doce	1d	0,93	0,85	3	0,470	0,681	1	1,9
F.sólida	Sta. Bárbara	1d	0,99	0,70	12	0,082	0,654	1	1,4

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento; osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

Para a predição do teor de hemiceluloses nas madeiras, os melhores ajustes foram conseguidos quando a aquisição de espectros foi feita utilizando-se a madeira sólida para os clones 57, 1274, 7074 e as regionais de Cocais e Santa Bárbara, e madeira moída para os clones 1046, 1213, 1215 e as regionais de Guanhães e Rio Doce.

Jones et al. (2006) avaliaram as propriedades químicas de 17 árvores de *Pinus taeda* L., com idades entre 21 a 25 anos e calibraram modelo com R de 0,73 e SECV de 1,130%, com três componentes PLS.

5.2.7 Calibração para teor de lignina total

O resumo das calibrações PLS desenvolvidas para predizer o teor de lignina na madeira de clones de *Eucalyptus* encontra-se na Tabela 23.

TABELA 23 Calibrações NIRS para teor de lignina total por clone

Espectro	Clone	Trat	Rc	Rcv	Fatores	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	57	1d	0,99	0,80	8	0,092	0,558	0	1,6
B.sólida	1046	1d	0,97	0,94	2	0,352	0,503	1	2,9
B.sólida	1213	osd	0,86	0,79	4	0,573	0,706	1	1,7
F.sólida	1215	1d	0,98	0,83	12	0,224	0,721	1	1,9
F.moída	1274	1d	0,99	0,89	12	0,063	0,511	2	3,1
B.moída	7074	2d	0,90	0,83	2	0,454	0,601	1	1,8

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.moída: aparelho Femto amostra de madeira moída; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento; osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d: segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

Para estimar o teor de lignina total, os modelos apresentaram Rcv variando de 0,79 a 0,94, com erro padrão na validação cruzada (SECV) de 0,503% a 0,721%. As amostras pertencentes ao clone 1046 geraram os melhores ajustes (Rcv = 0,94 e RPD = 2,9), aplicando o tratamento da primeira derivada nos espectros.

Meder et al. (1999) encontraram valores de R de 0,96 e RMSEP de 0,910%, calibrando modelos para prever o teor de lignina Klason em *Pinus radiata*.

Baillères et al. (2002) ajustaram modelos para prever o teor de lignina Klason em híbridos de *Eucalyptus urophylla* x *Eucalyptus grandis*. Utilizando oito fatores PLS, foi possível obter um coeficiente de correlação de 0,93, SECV de 0,370%, e RPD de 2,3.

As calibrações NIRS para o teor de lignina total são apresentadas na Tabela 24.

TABELA 24 Calibrações NIRS para teor de lignina total por regional

Espectro	Regional	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	Cocais	1d	0,83	0,72	2	0,670	0,842	2	1,6
F.sólida	Guanhães	1d	0,99	0,88	9	0,597	0,860	2	1,8
B.moída	Rio Doce	2d	0,65	0,42	2	0,721	0,890	1	1,1
B.moída	Sta. Bárbara	1d	0,93	0,88	2	0,624	0,824	2	2,1

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); *outlier*: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

O teor de lignina dos indivíduos plantados na localidade de Santa Bárbara pode ser estimado por um modelo que apresentou coeficiente de correlação na validação cruzada (Rcv) de 0,88 e relação de desempenho de desvio (RPD) de 2,1. Os melhores desempenhos nas calibrações para as regionais Cocais, Rio Doce e Santa Bárbara foram conseguidos utilizando-se a madeira moída e o espectrômetro Bruker nas leituras.

Hodge & Woodbridge (2004) estudaram o teor de lignina de *Pinus caribaea*, *P. oocarpa* e *P. tecunumanii*, provenientes de testes de progênie da Aracruz Celulose. Estes autores calibraram o teor de lignina a partir de madeira moída por meio de regressão PLS e obtiveram R de 0,95 e SEC de 0,350%. Para a validação em um lote independente de amostras, Hodge & Woodbridge (2004) encontraram R de 0,96 e desvio padrão de predição (SEP) de 0,360%. Os autores utilizaram cinco fatores PLS na modelagem dos dados espectrais.

5.2.8 Calibração para teor de extrativos

Nas Tabelas 25 e 26 observa-se o resumo das calibrações PLS desenvolvidas para estimar o teor de extrativos nas madeiras de *Eucalyptus* dos clones e nas regionais.

TABELA 25 Calibrações NIRS para teor de extrativos por clone

Espectro	Clone	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	57	2d	0,96	0,90	3	0,062	0,102	1	2,4
B.moída	1046	1d	0,93	0,61	6	0,169	0,380	1	1,2
B.moída	1213	1d	0,93	0,83	3	0,178	0,276	1	1,9
F.moída	1215	osd	0,98	0,86	5	0,078	0,206	1	2,6
B.moída	1274	osd	0,98	0,90	10	0,056	0,163	1	2,2
F.moída	7074	osd	0,86	0,68	4	0,269	0,391	1	0,9

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; F.moída: aparelho Femto amostra de madeira moída; Trat: tratamento; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); *outlier*: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

Para a predição do teor de extrativos, o clone 57 apresentou o melhor modelo utilizando três fatores PLS e tratamento da segunda derivada, com os maiores valores de coeficientes de correlação, tanto na calibração (0,96) como na validação cruzada (0,90), e também menor erro padrão na validação cruzada (0,102%)

Baillères et al. (2002), estudando híbridos de *Eucalyptus urophylla* x *grandis* com 5 anos de idade, ajustaram calibrações para estimar o teor de extrativos com R de 0,93; SECV de 0,27 e RPD de 2,2.

Meder et al. (1999), estudando madeiras de *Pinus radiata*, calibraram modelos para predizer o teor de extrativos com R de 0,85 e RMSEP de 0,59%.

TABELA 26 Calibrações NIRS para teor de extrativos por regional

Espectro	Regional	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
F.sólida	Cocais	1d	0,97	0,93	10	0,057	0,090	2	3,6
B.sólida	Guanhães	osd	0,98	0,85	9	0,074	0,254	1	1,8
B.moída	Rio Doce	1d	0,74	0,64	1	0,158	0,180	2	2,1
F.moída	Sta. Bárbara	osd	0,58	0,51	1	0,210	0,223	2	2,1

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.moída: aparelho Femto amostra de madeira moída; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); *outlier*: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

O teor de extrativos por regional foi calibrado por modelos com Rcv entre 0,51 a 0,93 e RPD entre 1,8 e 3,6. O melhor modelo para a estimativa da propriedade em questão foi obtido para as árvores pertencentes à regional de Cocais. Entretanto, o número de fatores PLS utilizados para este modelo foi alto (10 fatores PLS).

Gierlinger et al. (2002) avaliaram 175 indivíduos do gênero *Larix* aos 38 anos, provenientes de diferentes regiões da França e Alemanha. Esses autores calibraram modelos para estimar o teor de fenóis, extrativos em água quente e acetona e encontraram coeficientes de correlação de 0,84 a 0,99 e o desvio padrão da validação cruzada (RMSECV) variou de 0,210% a 1,850%.

5.2.9 Calibração para relação siringil guaiacil (S/G)

As calibrações para a relação das ligninas siringil e guaiacil (S/G) nas madeiras dos clones encontram-se na Tabela 27.

TABELA 27 Calibrações NIRS para relação S/G por clone

Espectro	Clone	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	57	osd	0,99	0,96	9	0,018	0,040	1	3,6
F.moída	1046	osd	0,87	0,82	2	0,133	0,161	1	1,4
F.moída	1213	osd	0,61	0,42	2	0,196	0,229	1	1,2
B.moída	1215	1d	0,97	0,94	3	0,027	0,042	1	3,5
F.sólida	1274	1d	0,82	0,65	3	0,092	0,125	1	1,5
B.moída	7074	1d	0,89	0,81	2	0,120	0,154	1	2,0

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; F.moída: aparelho Femto amostra de madeira moída; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (mol/mol); SECV: erro padrão da validação cruzada (mol/mol); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

Os modelos gerados para prever a relação S/G das madeiras dos clones apresentaram os melhores ajustes quando a madeira moída foi usada nas leituras.

Os maiores valores de Rcv (0,96) e RPD (3,6) foram conseguidos utilizando-se as amostras pertencentes ao clone 57.

Na Tabela 28 são apresentadas as calibrações para a relação S/G das madeiras nas quatro regionais.

TABELA 28 Calibrações NIRS para relação S/G por regional

Espectro	Regional	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.móida	Cocais	2d	0,77	0,63	2	0,149	0,188	0	1,2
B.móida	Guanhães	osd	0,86	0,71	6	0,133	0,191	2	1,6
B.sólida	Rio Doce	osd	0,97	0,90	9	0,038	0,078	1	2,3
B.móida	Sta. Bárbara	1d	0,89	0,85	2	0,131	0,153	2	2,2

B.móida: aparelho Bruker amostra de madeira móida; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d: segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat :número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (mol/mol); SECV: erro padrão da validação cruzada (mol/mol); *outlier*: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

A relação dos monômeros siringil e guaiacil (S/G) foi calibrada, tendo o modelo da regional Rio Doce apresentado os maiores coeficiente de correlação (0,90) e RPD (2.3), utilizando para o modelo nove fatores PLS. A regional Cocais apresentou modelos com os valores mais baixos de Rcv (0,63) e RPD (1,2) para predição da relação S/G.

Baillères et al. (2002) ajustaram calibrações para estimar a relação S/G em *Eucalyptus urophylla* x *Eucalyptus grandis* e encontraram R de 0,95, SECV de 0,220 mol/mol e RPD de 2,4, com dez fatores PLS.

5.2.10 Calibração para comprimento da fibra (CF)

O resumo dos modelos para predição do comprimento das fibras dos clones estudados encontra-se na Tabela 29.

TABELA 29 Calibrações NIRS para comprimento das fibras por clone

Espectro	Clone	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	57	2d	0,94	0,90	2	0,030	0,037	1	2,5
F.moída	1046	1d	0,89	0,81	3	0,031	0,042	1	1,9
F.sólida	1213	2d	0,93	0,89	3	0,030	0,040	1	2,2
B.moída	1215	1d	0,94	0,90	2	0,022	0,028	1	2,3
B.sólida	1274	1d	0,96	0,83	5	0,024	0,051	0	1,8
F.moída	7074	1d	0,98	0,93	3	0,015	0,028	1	3,5

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.moída: aparelho Femto amostra de madeira moída; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d: segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (mm); SECV: erro padrão da validação cruzada (mm); *outlier*: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

Para prever o comprimento das fibras, foram empregados tratamentos primeira e segunda derivada e o número de fatores PLS utilizados nas calibrações variou entre dois e cinco. As calibrações geraram modelos com coeficientes de correlação na validação cruzada, Rcv, entre 0,81 e 0,93 e erro padrão (SECV) variando de 0,028 a 0,052 mm.

Na Tabela 30 encontram-se as calibrações para o comprimento das fibras nas regionais.

TABELA 30 Calibrações NIRS para comprimento das fibras por regional

Espectro	Regional	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
F.sólida	Cocais	1d	0,99	0,88	12	0,006	0,039	2	2,2
B.moída	Guanhães	1d	0,87	0,67	5	0,030	0,046	1	1,4
F.moída	Rio Doce	2d	0,94	0,84	8	0,021	0,035	2	2,5
B.moída	Sta. Bárbara	osd	0,95	0,86	7	0,021	0,036	2	1,9

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; F.moída: aparelho Femto amostra de madeira moída; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d: segunda derivada Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (mm); SECV: erro padrão da validação cruzada (mm); *outlier*: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

Os valores do modelo gerado para os indivíduos da regional Rio Doce, quando foram utilizados oito fatores PLS e tratamento segunda derivada, foram de: coeficientes de correlação para calibração e validação cruzada (Rc e Rcv) de 0,94 e 0,84, respectivamente, erro padrão da validação cruzada (SECV) de 0,035 mm e relação de desempenho do desvio (RPD) de 2,5.

Os valores de Rcv encontrados neste trabalho foram maiores e os valores de SECV menores que os encontrados por Magalhães et al. (2005) que, para estimar o comprimento das fibras, calibraram modelos com R de 0,63 e SECV de 0,290 mm.

A utilização de madeira moída nas leituras teve mais sucesso na maioria dos ajustes para a predição do comprimento das fibras, quando comparada com a madeira sólida.

5.2.11 Calibração para largura da fibra (LF)

Na Tabela 31 são apresentadas as calibrações NIRS para a largura das fibras das madeiras nos seis clones.

TABELA 31 Calibrações NIRS para largura das fibras por clone

Espectro	Clone	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
F.sólida	57	1d	0,97	0,92	5	0,260	0,460	1	2,7
F.moída	1046	osd	0,89	0,83	3	0,698	0,891	1	1,9
B.moída	1213	osd	0,94	0,90	4	0,500	0,669	1	2,2
B.moída	1215	1d	0,94	0,92	2	0,523	0,635	2	2,8
B.moída	1274	osd	0,99	0,95	8	0,186	0,495	1	3,2
F.moída	7074	1d	0,98	0,92	4	0,297	0,578	1	3,1

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; F.moída: aparelho Femto amostra de madeira moída; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: fatores; SEC: erro padrão da calibração (μm); SECV: erro padrão da validação cruzada (μm); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

Para prever a largura das fibras, o clone 1274 apresentou o melhor modelo utilizando oito fatores PLS, com os maiores valores de coeficientes de correlação, tanto na calibração (0,99) como na validação cruzada (0,95), e também maior relação de desempenho do desvio (RPD =3,2).

Magalhães et al. (2005) ajustaram modelos para descrever as dimensões das fibras da madeira de espécies de *Pinus*. Para estimar a largura das fibras, as calibrações foram realizadas com 20 amostras e apresentaram coeficiente de correlação (R) de 0,65 e erro padrão na validação cruzada (SECV) de 3,87 µm.

O resumo dos modelos para predição da largura fibras, nas quatro regionais estudadas, encontra-se na Tabela 32.

TABELA 32 Calibrações NIRS para largura das fibras por regional

Espectro	Regional	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	Cocais	2d	0,83	0,72	5	0,421	0,528	2	1,5
B.moída	Guanhães	1d	0,79	0,73	1	0,515	0,576	1	1,5
B.moída	Rio Doce	osd	0,86	0,77	5	0,748	0,957	1	1,6
B.moída	Sta. Bárbara	1d	0,9	0,81	3	0,438	0,585	2	1,7

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d: segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: fatores; SEC: erro padrão da calibração (µm); SECV: erro padrão da validação cruzada (µm); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

Nos modelos para a predição da largura das fibras, observa-se que os espectros coletados quando a amostra foi madeira moída foram responsáveis pelos maiores valores de Rcv e RPD para cada clone e regional.

5.2.12 Calibração para diâmetro do lume (DL)

Nas Tabelas 33 e 34 são apresentados os dados referentes às calibrações realizadas para prever o diâmetro do lume das fibras dos seis clones de *Eucalyptus* e das árvores nas quatro regionais, respectivamente.

TABELA 33 Calibrações NIRS para diâmetro do lume por clone

Espectro	Clone	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
F.sólida	57	2d	0,86	0,78	2	0,531	0,657	0	1,6
F.moída	1046	osd	0,97	0,89	7	0,235	0,555	1	2,3
B.moída	1213	1d	0,98	0,97	2	0,186	0,282	1	3,8
B.moída	1215	osd	0,87	0,84	1	0,684	0,776	1	1,8
B.moída	1274	osd	0,93	0,86	4	0,507	0,704	1	2,0
B.moída	7074	1d	0,94	0,89	2	0,541	0,744	1	2,2

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.moída: aparelho Femto amostra de madeira moída; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d: segunda derivada Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (μm); SECV: erro padrão da validação cruzada (μm); *outlier*: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

As amostras pertencentes ao clone 1213 apresentaram os melhores resultados para estimar o diâmetro do lume das fibras. Para obter tais valores, o tratamento primeira derivada foi aplicado e utilizou-se um modelo com dois fatores PLS, com a exclusão de uma amostra que foi considerada *outlier*. O Rc e o Rcv encontrados foram de 0,98 e 0,97, respectivamente e o RPD de 3,8. O erro padrão na validação cruzada (SECV) para este clone também apresentou menor valor, de 0,282 μm .

Tabela 34 Calibrações NIRS para diâmetro do lume por regional

Espectro	Regional	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
F.moída	Cocais	1d	0,87	0,70	4	0,462	0,694	2	1,1
B.moída	Guanhães	1d	0,98	0,85	9	0,175	0,637	1	1,8
F.moída	Rio Doce	osd	0,51	0,36	2	1,096	1,211	1	1,0
B.moída	Sta. Bárbara	osd	0,93	0,81	9	0,302	0,516	1	1,6

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; F.moída: aparelho Femto amostra de madeira moída; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (μm); SECV: erro padrão da validação cruzada (μm); *outlier*: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

Quando se utilizou a regressão PLS para predizer modelos para estimar o diâmetro do lume das fibras, obteve-se Rcv com alta amplitude, sendo o menor valor de 0,36 para a regional Rio Doce e o maior valor de 0,85, para a regional Guanhães. Os valores do erro padrão na validação variaram de 0,516 a 1,211 μm .

Schimleck & Evans (2004), ajustando modelos para predizer o diâmetro radial de traqueídeos de *Pinus radiata*, encontraram coeficientes de correlação na predição (R) de 0,55 e 0,53, erro padrão da predição (SEP) de 2,70 e 1,90 μm e relação de desempenho do desvio (RPD) de 1,0 e 1,1. No mesmo trabalho, obtiveram modelos para prever o diâmetro tangencial do traqueídeo com valores para R de 0,83 e 0,89; SEP de 1,20 e 1,70 μm e RPD de 1,5 e 1,1.

Assim como nas demais características anatômicas, a utilização de madeira moída na aquisição dos espectros gerou modelos com maiores coeficientes de correlação e RPD para cada clone e regional avaliados.

5.2.13 Calibração para espessura da parede (EP)

As calibrações para estimativa da espessura da parede das fibras nas madeiras de clones de *Eucalyptus* encontram-se na Tabela 35.

TABELA 35 Calibrações NIRS para espessura da parede da fibra por clone

Espectro	Clone	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
F.sólida	57	1d	0,95	0,75	10	0,073	0,170	2	1,7
F.sólida	1046	1d	0,97	0,91	5	0,070	0,125	1	2,6
F.sólida	1213	1d	0,97	0,93	6	0,073	0,120	1	2,7
F.sólida	1215	osd	0,98	0,84	7	0,060	0,167	1	1,8
B.sólida	1274	osd	0,85	0,78	3	0,189	0,225	1	1,9
F.moída	7074	1d	0,94	0,89	2	0,201	0,261	0	1,4

B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.moída: aparelho Femto amostra de madeira moída; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento; osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (μm); SECV: erro padrão da validação cruzada (μm); *outlier*: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

Pelos dados da Tabela 35 observa-se que quando se utilizou a regressão PLS para predizer modelos para estimar a espessura da parede das fibras dos clones de *Eucalyptus*, obteve-se o menor valor de Rcv para o clone 57 (0,75) e o maior valor de 0,93 para o clone 1213. O modelo para este último clone também apresentou o menor valor de SECV (0,120 μm) e o maior RPD (2,7).

Schimleck & Evans (2004), avaliando as características anatômicas de *Pinus radiata*, encontraram valores de coeficientes de correlação R de 0,94 e 0,95 para espessura de parede do traqueídeo, SEP de 0,2 e 0,5 μm e RPD de 1,4 e 2,7.

Na estimativa da propriedade em questão, os espectros obtidos da madeira sólida proporcionaram os melhores modelos para cinco dos clones. As calibrações para espessura da parede das fibras das madeiras nas diferentes localidades encontram-se na Tabela 36.

TABELA 36 Calibrações NIRS para espessura da parede da fibra por regional

Espectro	Regional	Trat	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	Cocais	2d	0,79	0,68	2	0,194	0,237	1	1,4
B.moída	Guanhães	1d	0,98	0,85	8	0,062	0,233	2	2,0
B.sólida	Rio Doce	osd	0,83	0,68	5	0,161	0,217	1	1,3
F.sólida	Sta. Bárbara	1d	0,76	0,32	4	0,164	0,257	1	1,1

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d: segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: fatores; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); *outlier*: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

A espessura da parede das fibras da madeira foi predita por meio de modelos que geraram coeficientes de calibração entre 0,32, para a regional Santa Bárbara a 0,85, para a regional de Guanhães. Os valores de RPD não foram satisfatórios, de acordo com Schimleck et al. (2003), que consideram 1,5 como valor mínimo suficiente para leituras iniciais. Somente o ajuste para a regional de Guanhães apresentou um melhor desempenho (Rcv = 0,85 e RPD = 2,0).

De acordo com Magalhães et al. (2005), a espessura da parede das fibras de *Pinus* pode ser estimada por uma calibração com R de 0,91 e desvio padrão de validação cruzada de 0,340 μm .

CONCLUSÃO

Com base nos resultados apresentados, pode-se que concluir que:

- de maneira geral, a técnica NIRS mostrou-se eficiente para a predição da densidade básica e das propriedades químicas e anatômicas dos clones;
- a espectroscopia no infravermelho próximo mostrou-se eficaz para estimar a densidade básica e as propriedades químicas e anatômicas das madeiras pertencentes às regionais;
- o espectrômetro NIR Bruker proporcionou a maior parte (cerca de 65%) dos melhores resultados nas calibrações;
- os espectros adquiridos com amostras de madeira moída foram, na sua maioria (cerca de 70%), responsáveis pelos melhores ajustes nas calibrações para as propriedades estudadas;
- a madeira sólida também pode ser usada com sucesso para estimativas de propriedades da madeira pela técnica da espectroscopia no infravermelho próximo.
- sugere-se a repetição do trabalho na idade de corte, procurando aumentar o número de árvores amostradas por clones e/ou regionais.

7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALENCAR, G.S.B. **Estudo da qualidade da madeira para produção de polpa celulósica relacionada à precocidade na seleção de um híbrido *Eucalyptus grandis* x *Eucalyptus urophylla***. 2002. 73p. Dissertação (Mestrado em Ciências Florestais)-Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Piracicaba.

ALZATE, S.B.A. **Caracterização da madeira de árvores de clones de *Eucalyptus grandis*, *E. saligna* e *E. grandis* x *urophylla***. 2004. 133p. Tese (Doutorado em Recursos Florestais – Tecnologia de Produtos Florestais)-Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Piracicaba.

ALZATE, S.B.A.; TOMAZELLO FILHO, M.; PIEDADE, S.M.S. Variação longitudinal da densidade básica da madeira de clones de *Eucalyptus grandis* Hill ex Maiden, *E. saligna* Sm. e *E. grandis* x *urophylla*. **Scientia Forestalis**, Piracicaba, n.68, p.87-95, 2005.

ANDRADE, E.N. **O eucalipto**. Jundiaí: Companhia Paulista de Estradas de Ferro, 1961. 667p.

ASSIS, T.F. de. Melhoramento genético do eucalipto. **Informe Agropecuário**, Belo Horizonte, v.18, n.185, p.32-51, 1996.

ASSIS, T.F. de. Aspectos do melhoramento de *Eucalyptus* para obtenção de produtos sólidos de madeira. In: WORKSHOP TÉCNICAS DE ABATE, PROCESSAMENTO E UTILIZAÇÃO DA MADEIRA DE EUCALIPTO, 1999, Viçosa, MG. **Anais...** Viçosa, MG: UFV/DEF/SIF/IEF, 1999. p.61-72.

BAILLÈRES, H.; DAVRIEUX, F.; HAM-PICHAVANT, F. Near infrared analysis as a tool for rapid screening of some major wood characteristics in a *Eucalyptus* breeding program. **Annals of Forest Science**, Lês Ulis, v.59, p.479-490, 2002.

BARRICHELO, L.E.G.; FOELKEL, C.E.B. Processo sulfato de madeiras de diferentes espécies de eucalipto. **Silvicultura**, São Paulo, v.28, n.28, p.732-733, 1983.

BARRICHELO, L.G.; BRITO, J.O. A madeira das espécies de eucalipto como matéria-prima para indústria de celulose e papel. **Divulgação PRODEPEF**, Brasília, n.45, p.1-145, 1976.

BARTHUS, R.C. **Aplicação de métodos quimiométricos para análises de controle de qualidade de óleos vegetais utilizando espectroscopia no infravermelho e Raman**. 1999. 89p. Dissertação (Mestrado em Química)-Universidade Estadual de Campinas, Campinas.

BAUNSGAARD, D.; NORGAARD, L.; GODSHALL, M.A. Fluorescence of raw cane sugars evaluated by chemometrics. **Journal of Agricultural and Food Chemistry**, Easton, v.48, p.4955-4962, 2000.

BEEBE, K.R.; PELL, R.J.; SESASHOLTZ, M.B. **Chemometrics: a practical guide**. New York: Wiley, 1998. 348p.

BERTOLUCCI, F. de L.G.; REZENDE, G.D.S.P.; PANCHEL, R. Produção e utilização de híbridos de eucalipto. **Silvicultura**, São Paulo, v.26, n.51, p.12-16, 1995.

BIRKETT, M.D.; GAMBINO, M.J.T. Potential applications for Near Infrared Spectroscopy in the pulping industry. **Paper Southern Africa**, Pretoria, v.11, n.12, p.34-38, 1988.

BOKOBZA, L. Near infrared spectroscopy. **Journal of Near Infrared Spectroscopy**, Sussex, v.6, p.3-17, 1998.

BORIN, V. **Aplicação de quimiometria e espectroscopia no infravermelho no controle de qualidade de lubrificantes**. 2003. 104p. (Mestrado em Química)-Universidade Estadual de Campinas, Campinas.

BOUVET, J.M.; BOUILLET, J.P.; VIGNERON, P.; OGNOUABI, N. Genetic and environmental effects on growth and wood basic density with two *Eucalyptus* hybrids. In: CONECTING BETWEEN SILVICULTURE AND WOOD QUALITY THROUGH MODELLING APPROACHES AND SIMULATION SOFTWARE, 1999, Johannesburgo. **Proceedings...** Johannesburgo, 1999. p.5-12.

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

BRIGATTI, R.A.; FERREIRA, M.; SILVA, A.P.; FREITAS, M. Estudo comparativo do comportamento de alguns híbridos de *Eucalyptus* spp. **IPEF**, Piracicaba, v.123, p.1-7, 1980.

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

BUSNARDO, C.A.; GONZAGA, J.V.; FOELKEL, C.E.B. Em busca da qualidade ideal da madeira de eucalipto para produção de celulose: VI, altura ideal de amostragem para avaliação da densidade média para árvores de *Eucalyptus grandis*. In: CONGRESSO ANUAL DA ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE CELULOSE E PAPEL, 1987, São Paulo, SP. **Anais...** São Paulo: ABCP, 1987. p.17-33.

CARPIM, M.A.; BARRICHELO, L.E.G. Influência da procedência e classe de diâmetro sobre as características da madeira de *Eucalyptus grandis*. In: CONGRESSO ANUAL DE CELULOSE E PAPEL, 17., 1984, São Paulo, SP. **Anais...** São Paulo: ABCP, 1984. p.411-422.

CARVALHO, A.M. **Valorização da madeira do híbrido *Eucalyptus grandis* x *Eucalyptus urophylla* através da produção conjunta de madeira serrada em pequenas dimensões, celulose e lenha**. 2000. 128p. Dissertação (Mestrado em Recursos Florestais – Tecnologia de Produtos Florestais)-Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Piracicaba.

CARVALHO, H.G.; OLIVEIRA, R.C.; GOMIDE, J.L.; COLODETTE, J.L. Efeito da idade de corte da madeira e de variáveis de refino nas propriedades da celulose Kraft branqueada de eucalipto. In: CONGRESSO ANUAL DE CELULOSE E PAPEL DA ABTCP, 31., 1998, São Paulo, SP. **Anais...** São Paulo: ABTCP, 1998. p.367-381.

CHIMELLO, J. **Anotações sobre anatomia e identificação de madeiras**. São Paulo: IPT, 1980. Apostila.

CHURCH, J.S.; O’NEILL, J.A.; WOODHEAD, A.L. **Applied Spectroscopy**, Beltimore, v.52, p.1039, 1998.

CIENFUGOS, F. Análise instrumental: conceitos e avanços da análise no infravermelho. **Revista Química e Derivados**, São Paulo, v.38, n.413, p.40-46, mar. 2003.

CLARKE, C.R.E. **The estimation of genetic parameters of pulp and paper properties in *E. grandis* Hill ex Maiden and their implications for tree improvement**. 1990. 120p. Thesis (Magister Scientiae)-University of Natal, Pietermaritzburg.

COGDILL, R.P.; SCHIMLECK, L.R.; JONES, P.D.; PETER, G.F.; DANIELS, R.F.; CLARK, A. Estimation of the physical wood properties of *Pinus taeda* L. radial strips using least square support vector machines. **Journal of Near Infrared Spectroscopy**, Sussex, v.12, p.263-269, 2004.

COLEMAN, P.B. **Practical sampling techniques for infrared analysis**. London: CRC, 1993.

COWN, D.J.; KIBBLEWHITE, R.P. Effects of wood quality variation in New Zealand radiata pine on kraft paper properties. **Journal of Forest Science**, Praha, v.10, n.3, p.521-532, 1980.

EASTY, D.B.; BERBEN, S.A.; DETHOMAS, F.A.; BRIMMER, P.J. Near-infrared Spectroscopy for the analysis of wood pulp: quantifying hardwood-softwood mixtures and estimating lignin content. **Tappi Journal**, Atlanta, v.73, n.10, p.257-261, 1990.

ELDRIDGE, K.; DAVIDSON, J.; HARDWOOD, H.; WYK, G. van. **Eucalypt domestication and breeding**. Oxford: Clarendon, 1993. 288p.

ESAU, K. **Anatomia das plantas com sementes**. São Paulo: E. Blücher; EDUSP, 1974. 293p.

EVANS, J.L.W.; SENFT, J.F.; GREEN, D.W. Juvenile wood effect in red alder: analysis of physical and mechanical data to delineate juvenile and mature wood zones. **Forest Products Journal**, Madison, v.50, n.7/8, p.75-87, 2000.

FENGEL, D.; WEGENER, G. **Wood, chemistry, ultrastructure, reactions**. New York: Waster & Grugter, 1984. 613p.

FERREIRA, M.; KAGEYAMA, P.Y. Melhoramento genético da densidade da madeira de eucalipto. **Boletim Informativo IPEF**, Piracicaba, v.6, n.20, p.A-1/A-14, 1978.

FOELKEL, C.E.B. **Estrutura da madeira**. Belo Oriente: Cenibra, 1977. 84p.

GARBUTT, D.C.F.; DONKIN, M.J.; MEYER, J.H. Near-infrared reflectance analysis of cellulose and lignin in wood. **Paper Southern Africa**, Pretoria, v.2, n.4, p.45, 1992.

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

GIERLINGER, N.; SCHWANNINGER, M.; HINTERSTOISSER, B.; WIMMER, R. Rapid determination of heartwood extractives in *Larix* sp. by means of Fourier transform near infrared spectroscopy. **Journal of Near Infrared Spectroscopy**, Sussex, v.10, p.203-214, 2002.

GINDL, W.; TEISCHINGER, A.; SCHWANNINGER, M.; HINTERSTOISSER, B. The relationship between Near Infrared Spectra of radial wood surfaces and wood mechanical properties. **Journal of Near Infrared Spectroscopy**, Sussex, v.9, p.255-261, 2001.

GOLDSCHMID, O. Ultraviolet spectra. In: SARKANEM, K.; LUDWING, C.H. **Lignins**: occurrence, formation, structure and reactions. New York: J. Wiley, 1971. p.241-298.

GOMIDE, J.L.; COLODETTE, J.L.; OLIVEIRA, R.C.; SILVA, C.M. Qualidade de las maderas de clones de Eucalyptus de Brasil para la producción de celulosa kraft. In: INTERNATIONAL COLLOQUIUM ON EUCALYPTUS PULP, 2., 2005, Concepción. **Anais...** Concepción: Universidad de Concepción, 2005. p.1-17.

GOMIDE, J.L.; DEMUNER, B.J. Determinação do teor de lignina na madeira: método Klason modificado. **O Papel**, São Paulo, v.47, p.36-38, 1986.

GOUVEA, C.F.; MORI, E.S.; BRASIL, M.A.A.; VALLE, C.F.; BONINE, C.A.V. Seleção fenotípica por padrão de proporção de casca rugosa persistente em árvores de *Eucalyptus urophylla* S.T Blake, visando formação de população base de melhoramento genético: qualidade da madeira. In: IUFRO CONFERENCE ON SILVICULTURE AND IMPROVEMENT OF EUCALIPTS, 1997, Salvador, BA. **Anais...** Colombo: Embrapa-CNPQ, 1997. v.1, p.355-360.

HARRIS, J.M.; COWN, D.J. Basic wood properties. In: KININMONTH, J.A.; WHITEHOUSE, L.J. (Ed.). **Properties and uses of New Zealand radiata pine**. New Zealand: Ministry of Forestry, Forest Research Institute. 1991. v.1, p.6.1-6.28.

HAYGREEN, J.G.; BOWYER, J.L. **Forest products and wood science introduction**. Ames: Iowa State University, 1982. 549p.

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

HILLIS, W.E.; BROWN, A.G. ***Eucalyptus* for wood production**. Melbourne: CSIRO, 1978. 434p.

HODGE, G.R.; WOODBRIDGE, W.C. Use of near infrared spectroscopy to predict lignin content in tropical and sub-tropical pines. **Journal of Near Infrared Spectroscopy**, Sussex, v.12, p.381-390, 2004.

HOFFMEYER, P.; PEDERSEN, J.G. Evaluation of density and strength of Norway spruce wood by near infrared reflectance spectroscopy. **Holz als Roh- und Werkstoff**, v.53, n.3, p.165-170, 1995.

ISAKSSON, T.; NAERBO, G.; RUKKE, E.O.; SAHNI, N.S. In-line determination of moisture in margarine, using near infrared diffuse transmittance. **Journal Near Infrared Spectroscopy**, Sussex, v.9, p.11, 2001.

JONES, P.D.; SCHIMLECK, L.R.; PETER, G.F.; DANIELS, R.F.; CLARK, A. Nondestructive estimation of wood chemical composition of sections of radial wood strips by diffuse reflectance near infrared. **Wood Science Technology**, v.40, p.709-720, 2006.

KARR, W.E.; COLL, L.G.; MERRIMAN, M.M.; BRINK, D.L. The complete analysis of wood polysaccharides using HPLC. **Journal of Wood Chemistry and Technology**, Vancouver, v.11, p.447-463, 1991.

KAYS, S.E.; BARTON, F.E.; WINDHAM, W.R. Predicting protein content by near infrared reflectance spectroscopy in diverse cereal food products. **Journal Near Infrared Spectroscopy**, Sussex, v.8, p.35, 2000.

KELLEY, S.S.; RIALS, T.G.; GROOM, L.R.; SO, C.L. Use of near infrared Spectroscopy to predict the mechanical properties of six softwoods. **Holzforschung**, Berlin, v.58, p.252-260, 2004.

KEMPEN, T. van; JACKSON, D. NIRS may provide rapid evaluation of amino acids. **Feedstuffs**, Minnetonka, v.68, p.12-15, 1996.

KLOCK, U. **Qualidade da madeira juvenil de *Pinus maximinoi* H.E. Moore.** 2000. 291p. Tese (Doutorado em Ciências Florestais)-Universidade Federal do Paraná, Curitiba.

KOLLMANN, F. **Tecnología de la Madera y sus aplicaciones.** Madrid: Instituto Forestal de Investigaciones y Experiencias y Servicios de La Madera, 1959. 675p.

KOLLMANN, F.F.P.; KUENZI, E.W.; STAMM, A.J. **Principles of wood science and technology.** Berlin: Springer-Verlag, 1975. v.2, 703p.

KOWALSKI, B.R.; SEASHOLTZ, M.B. Recent developments in multivariate calibration, **Journal of Chemometrics**, Chichester, v.5, p.129-145, 1991.

KRAMER, K.; EBEL, S.; **Analytical Chemical Acta**, Amsterdam, v.420, p.155, 2000.

LEWIN, M.; GOLDSTEIN, I.S. **Wood structure and composition.** New York: M. Dekker, 1991. 488p.

LIN, S.Y.; DENCE, C.W. **Methodos in lignin chemistry.** Berlin: Springer-Verlag, 1992. 578p.

LOPES, G.A.; GARCIA, J.N. Densidade básica e umidade natural da madeira de *Eucalyptus saligna* Smith, de Itatinga, associadas aos padrões de casca apresentados pela população. **IPEF**, Piracicaba, n.62, p.13-23, 2002.

MAGALHÃES, W.L.E.; PEREIRA, J.C.D.; MUÑIZ, G.I.B.; KLOCK, U.; SILVA, J.R.M. Determinação de propriedades químicas e anatômicas de madeira com o uso da reflexão difusa de infravermelho próximo. **Boletim Pesquisa Florestal**, Colombo, n.50, p.25-36, 2005.

MALINOWSKI, E.R. **Factor analysis in chemistry.** New York: Wiley, 1991. 350p.

MARTENS, H.; NAES, T. **Multivariate calibration.** New York: Wiley, 1996.

MARTINI, A.J. **História, geografia e meio ambiente.** Disponível em: <<http://www.canalrioclaro.com.br/colunas/?coluna=61>>. Acesso em: 18 set. 2008.

MASSART, D.L.; VANDEGINSTE, B.G.; DEMING, S.N.; MICHOTTE, Y.; KAUFMAN, L. **Chemometrics**: a textbook. New York: Elsevier, 1986.

MEDER, R.; GALLAGHER, S.; MACKIE, K.L.; BÖHLER, H.; MEGLÉN, R.R. Rapid determination of the chemical composition and density of *Pinus radiata* by PLS modelling of transmission and diffuse reflectance FTIR Spectra. **Holzforschung**, Berlin, v.53, p.261-266, 1999.

MOKFIENSKI, A.; GOMIDE, J.L.; COLODETTE, J.L.; OLIVEIRA, R.C. Importância da densidade e do teor de carboidratos totais da madeira de eucalipto no desempenho da linha de fibras. In: COLÓQUIO INTERNACIONAL SOBRE CELULOSE KRAFT DE EUCALIPTO, 2003, Viçosa, MG. **Colóquio...** Viçosa, MG, 2003. p.15-38.

NAES, T.; ISAKSSON, T. Different strategies for handling non-linearity problems in NIR calibration. **NIR News**, Chichester ,v.5, n.1, p.4-11, 1994.

OLIVEIRA, F.C.; SOUZA, A.T.P.C.; DIAS, J.A.; DIAS, S.C.L.; RUBIM, J.C. A escolha da faixa espectral no uso combinado de métodos espectroscópicos e quimiométricos. **Química Nova**, São Paulo, v.27, n.2, p.218-255, 2004.

OLIVEIRA, J.T. da S. **Caracterização da madeira de eucalipto para a construção civil**. 1997. v.2. Tese (Doutorado em Engenharia de Construção Civil e Urbana)-Universidade de São Paulo, São Paulo.

OSBORNE, S.D.; JORDAN, R.D.; KÜNNEMEYER, R. Method of wavelength selection for partial least square. **Analyst**, v.122, p.1531-1537, 1997.

OTTO, M. **Chemometrics**. Weinheim: Wiley, 1999.

PANTOJA, P.A. **Aplicação da espectroscopia de infravermelho próximo na caracterização da carga de petróleo para o processo de destilação atmosférica**. 2006. 91p. Dissertação (Mestrado em Engenharia)-Universidade de São Paulo, São Paulo.

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

PHILIPP, P.; ALMEIDA, M.L.O. d'. **Celulose e papel**: tecnologia de fabricação da pasta celulósica. 2.ed. São Paulo: IPT, 1988. 964p.

PUNSUVON, V.; TERDWONGWORAKUL, A.; THANAPASE, W.; TSUCHIKAWA, S. Rapid NIR analysis of chemical and mechanical properties for *Eucalyptus camaldulensis* at plantation in Thailand. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON NEAR INFRARED SPECTROSCOPY, 11., 2003, Córdoba. **Proceedings...** Córdoba, 2003. p.781-785.

RAMALHO, R.S. **O uso de macerado no estudo anatômico de madeiras.** Viçosa, MG: UFV/DEF, 1987. 4p. Relatório.

ROWELL, R.M.; PETTERSEN, R.; HAN, J.S.; ROWELL, J.S.; TSHABALALA, M.A. Cell wall chemistry. In: ROWELL, R.M. (Ed.). **Handbook of wood chemistry and wood composites.** New York: Taylor & Francis, 2005. chap.3.

SALIBA, E.O.S.; RODRIGUEZ, N.M.; MORAIS, S.A.L.; PILÓ-VELOSO, D. Ligninas: métodos de obtenção e caracterização química. **Ciência Rural**, Santa Maria, v.31, n.5, p.917-928, 2001.

SANSÍGOLO, C.A. **Deslignificação em metanol-água de *Eucalyptus globulus*, Labill:** características da lignina e da polpa. 1994. 163f. Tese (Doutorado em Ciências)-Universidade de São Paulo, São Carlos.

SANTOS, C.P.; REIS, I.N.; MOREIRA, J.E.B.; BRASILEIRO, L.B. Papel: como se fabrica? **Revista Química Nova na Escola**, São Paulo, n.14, p.3-7, nov. 2001.

SAVITZKY, A.; GOLAY, M.J.E. Smoothing and differentiation of data by simplified least-squares procedures. **Analytical Chemistry**, Washington, 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**, Easton, v.51, p.2433-2437, 2003.

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

SCHIMLECK, L.R.; EVANS, R.; ILLIC, J.; MATHESON, A.C. Estimation of wood stiffness of increment cores by near-infrared spectroscopy. **Canadian Journal of Forest Research**, Ottawa, v.32, n.1, p.129-135, 2002.

SCHIMLECK, L.R.; KUBE, P.D.; RAYMOND, C.A. Genetic improvement of kraft pulp yield in *Eucalyptus nitens* using cellulose content determined by near infrared spectroscopy. **Canadian Journal of Forest Research**, Ottawa, v.34, p.2363-2370, 2004.

SCHIMLECK, L.R.; MICHELL, A.J.; RAYMOND, C.A.; MUNERI, A. Estimation of basic density of *Eucalyptus globulus* using near-infrared spectroscopy. **Canadian Journal of Forest Research**, Ottawa, v.29, p.194-201, 1999.

SCHULTZ, T.P.; BURNS, D.A. Rapid secondary analysis of lignocellulose: comparison of near infrared (NIR) and fourier transform infrared (FTIR). **Tappi Journal**, Atlanta, v.73, n.5, p.209-212, May 1990.

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

SHIMOYAMA, V.R.S. **Variações da densidade básica e características anatômicas e químicas da madeira em *Eucalyptus spp.*** 1990. 93f. Dissertação (Mestrado em Ciências Florestais)-Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Piracicaba.

SIESLER, H.W.; OZAKI, Y.; KAWATA, S.; HEISE, H.M. **Near infrared spectroscopy**: principles, instruments, applications. New York: Wiley-VCH, 2002.

SILVA, J.C. **Caracterização da madeira de *Eucalyptus grandis* Hill ex. Maiden, de diferentes idades, visando a sua utilização na indústria moveleira.** 2002. 160f. Tese (Doutorado em Ciências Florestais/Tecnologia e Utilização de Produtos Florestais)-Universidade Federal do Paraná, Curitiba.

SILVA JUNIOR, F.G.; GOMES, I.M.B.; BARRICHELO, L.E.G.; ODA, S. Avaliação da qualidade da madeira de híbridos de *Eucalyptus grandis* x *Eucalyptus cmaldulensis* visando a produção de celulose. In: CONGRESSO FLORESTAL BRASILEIRO, 7., 1993, Curitiba, PR. **Anais...** São Paulo: SBS/SBEF, 1993. v.2, p.581-585.

SJÖSTRÖM, E. **Wood chemistry**: fundamentals and applications. 2.ed. London: Academic, 1993. p.140-161.

SKOOG, D.A.; HOLLER, F.J.; NIEMAN, T.A. **Princípios de análise instrumental**. 5.ed. São Paulo: Bookman, 2001. 838p.

SOARES, T.S.; CARVALHO, R.M.M.A.; VALE, A.B. do. Avaliação econômica de um povoamento de *Eucalyptus grandis* destinado a multiprodutos. **Revista Árvore**, Viçosa, MG, v.27, n.5, p.689-694, 2003.

SOTELO, F.F. **Aplicação da espectroscopia de infravermelho próximo na caracterização de petróleo**: simulação de uma unidade de destilação atmosférica. 2006. 154p. (Doutorado em Engenharia Química)-Universidade de São Paulo, São Paulo.

SOUZA, V.R.; CARPIM, M.A.; BARRICHELO, L.E.G. Densidade básica entre procedências, classes de diâmetro e posição em árvores de *Eucalyptus grandis* e *Eucalyptus saligna*. **IPEF**, Piracicaba, v.3, p.63-72, 1986.

STURION, J.A.; BELLOTE, A.F.J. Implantação de povoamentos florestais com espécies de rápido crescimento. In: GALVÃO, A.P.M. **Reflorestamento de propriedades rurais para fins produtivos e ambientais**. Brasília, DF: Embrapa Florestas, 2000. p.209-219.

STWART, A.D.; TROTMAN, S.M.; DOOLAN, K.J.; FREDERICKS, P.M. Spectroscopy measurement of used lubricating oil quality. **Applied Spectroscopy**, Beltimore, v.43, p.55-60, 1995.

TAIZ, L.; SEIGER, E. **Fisiologia vegetal**. Porto Alegre: Artmed, 2004. 719p.

TAPPI. Preparation of wood for chemical analysis. In: _____. **Test methods**. Atlanta, 1988.

TAPPI. Standard methods of technical association of the pulp and paper industry. In: _____. **Test methods 1998-1999**. Atlanta, 1999.

THUMM, A.; MEDER, R. Stiffness prediction of radiata pine clearwood test pieces using near infrared spectroscopy. **Journal of Near Infrared Spectroscopy**, Sussex, v.9, p.117-122, 2001.

THYGESEN, L.G. Determination of dry matter content and basic density of Norway spruce by near infrared reflectance and transmission spectroscopy. **Journal of Near Infrared Spectroscopy**, Sussex, v.2, p.127-135, 1994.

TOMAZELLO FILHO, M. **Variação radial dos constituintes anatômicos e da densidade básica da madeira de oito espécies de Eucalipto**. Piracicaba: ESALQ/LCF, 1983. 102p.

TOMAZELLO FILHO, M. Variação radial da densidade básica e da estrutura anatômica da madeira do *Eucalyptus saligna* e *E. grandis*. **IPEF**, Piracicaba, n.29, p.37-45, 1985.

TRUGILHO, P.F.; LIMA, J.T.; MORI, F.A. Correlação canônica das características químicas e físicas de clones de *Eucalyptus grandis* e *Eucalyptus saligna*. **Cerne**, Lavras, v.9, n.1, p.66-80, 2003.

VALDERRAMA, P. **Avaliação de figuras de mérito em calibração multivariada na determinação de parâmetros de controle de qualidade em indústria alcooleira por espectroscopia no infravermelho próximo**. 2005. 128p. Dissertação (Mestrado em Química)-Universidade Estadual de Campinas, Campinas.

VALE, A.T.; MOURA, V.P.G.; MARTINS, I.S.; RESENDE, D.C.A. Densidade básica medida em função da profundidade de penetração do pino do “pilodyn” e da classe dimétrica e variação axial da densidade básica em *Eucalyptus grandis* Hill ex Maiden. **Revista Árvore**, Viçosa, MG, v.19, n.1, p.80-91, 1995.

VIEIRA, R.A.M.; SAYER, C.; LIMA, E.L.; PINTO, J.C. In-line and in situ monitoring of semi-batch emulsion copolymerizations using near-infrared spectroscopy. **Journal of Applied Polymer Science**, New York, v.84, p.2670, 2002.

VIGNERON, P.; GERARD, J.; BOUVET, J.M. Relationship between basic density and growth in a fertilization trial with clones of *Eucalyptus hybrid* in Congo. In: EUCALYPT PLANTATIONS: IMPROVING FIBRE YIELD AND QUALITY, 1995, Hobart. **Proceedings...** Sand Bay: CRCTHF/IUFRO, 1995. v.1, p.68-72.

VITAL, B.R. **Fatores que afetam a densidade da madeira**. Viçosa, MG: SIF, 1985. 6p. (Informativo SIF, 3).

WAGBERG, L.; ANNERGREN, G. Physicochemical characterization of papermaking fibres. In: FUNDAMENTAL RESEARCH SYMPOSIUM, 11., 1997, Cambridge. **Anais...** Cambridge, 1997. p.1-82.

WILLIAMS, P.; NORRIS, K. **Near-infrared technology**. 2.ed. Saint Paul: American Association of Cereal Chemistry, 2001. 296p.

WILLIAMS, P.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**, Sussex, v.1, n.1, p.25-33, 1993.

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

WORKMAN, J.; WEYWER, L. **Practical guide to interpretive near-infrared spectroscopy**. Boca Raton: CRC, 2007. 332p.

WRIGHT, P.J.; WALLIS, A.F.A. Rapid determination of cellulose in plantation *Eucalyptus* wood to predict Kraft pulp yields. **Tappi Journal**, Atlanta, v.81, n.2, 1998.

ZOBEL, B.J.; BUIJTENEN, J.P. van. **Wood variation**: its causes and control. New York: Springer-Verlag, 1989. 363p.

ANEXOS

TABELA 1 Calibrações NIRS para densidade básica no DAP por clone

Aparelho	Clones	Filtro	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.móida	57	2 der	0,99	0,77	8	0,003	0,017	1	1,6
	1046	1 der	0,98	0,85	10	0,002	0,008	1	3,6
	1213	2 der	0,95	0,85	3	0,016	0,028	1	1,9
	1215	osd	0,99	0,62	10	0,001	0,023	1	1,9
	1274	osd	0,93	0,75	5	0,020	0,038	1	1,5
	7074	1 der	0,85	0,81	1	0,013	0,014	1	1,7
B.sólida	57	osd	0,66	0,30	4	0,018	0,024	1	1,1
	1046	osd	0,82	0,65	4	0,008	0,012	1	2,6
	1213	osd	0,43	0,02	4	0,048	0,108	0	0,5
	1215	osd	0,87	0,65	5	0,006	0,009	2	4,8
	1274	1 der	0,84	0,72	2	0,031	0,040	0	1,4
	7074	osd	0,62	0,52	1	0,019	0,021	1	1,2
F.móida	57	1 der	0,22	-0,26	1	0,050	0,056	0	0,5
	1046	1 der	0,93	0,89	3	0,005	0,007	1	4,3
	1213	2 der	0,86	0,70	4	0,020	0,029	1	1,8
	1215	osd	0,58	0,42	2	0,025	0,028	2	1,5
	1274	2 der	0,74	0,61	3	0,046	0,055	0	1,0
	7074	osd	0,75	0,46	3	0,030	0,042	0	0,6
F.sólida	57	osd	0,64	0,43	3	0,018	0,022	1	1,3
	1046	1 der	0,93	0,71	7	0,005	0,012	1	2,6
	1213	osd	0,52	0,23	2	0,032	0,038	1	1,4
	1215	osd	0,65	0,15	1	0,022	0,031	1	1,4
	1274	osd	0,95	0,82	4	0,013	0,025	2	2,3
	7074	1 der	0,66	0,54	1	0,017	0,019	1	1,3

B.móida: aparelho Bruker amostra de madeira móida; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (g/cm^3); SECV: erro padrão da validação cruzada (g/cm^3); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

TABELA 2 Calibrações NIRS para densidade básica no DAP por regional

Aparelho	Regional	Filtro	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	Cocais	1 der	0,99	0,86	12	0,008	0,043	2	1,9
	Guanhães	1 der	0,91	0,83	3	0,013	0,019	1	1,8
	Rio Doce	1 der	0,91	0,70	11	0,010	0,018	1	1,4
	Sta. Bárbara	osd	0,99	0,88	12	0,002	0,016	1	2,0
B.sólida	Cocais	1d	0,90	0,79	5	0,034	0,049	1	1,7
	Guanhães	osd	0,93	0,73	7	0,012	0,024	2	1,4
	Rio Doce	osd	0,89	0,78	7	0,011	0,016	2	1,6
	Sta. Bárbara	osd	0,94	0,86	6	0,011	0,016	0	2,0
F.moída	Cocais	osd	0,27	0,08	1	0,023	0,024	1	3,4
	Guanhães	2 der	0,87	0,57	3	0,012	0,020	2	1,7
	Rio Doce	2 der	0,71	0,46	4	0,042	0,055	0	0,5
	Sta. Bárbara	2 der	0,98	0,90	8	0,008	0,017	1	1,9
F.sólida	Cocais	2 der	0,70	0,56	3	0,053	0,062	2	1,3
	Guanhães	osd	0,93	0,89	6	0,012	0,016	1	2,1
	Rio Doce	1 der	0,99	0,81	12	0,002	0,015	1	1,7
	Sta. Bárbara	osd	0,80	0,66	5	0,019	0,024	0	1,3

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (g/cm^3); SECV: erro padrão da validação cruzada (g/cm^3); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio

TABELA 3 Calibrações NIRS para densidade básica média (DBM) por clone

Aparelho	Clones	Filtro	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.móida	57	1 der	0,85	0,72	2	0,007	0,009	1	1,4
	1046	1 der	0,97	0,91	4	0,002	0,003	1	2,6
	1213	2 der	0,52	0,38	1	0,009	0,010	1	1,5
	1215	1 der	0,99	0,93	7	0,001	0,004	1	3,2
	1274	osd	0,88	0,70	6	0,008	0,013	1	1,4
	7074	osd	0,95	0,89	5	0,006	0,009	1	2,4
B.sólida	57	osd	0,99	0,95	8	0,001	0,004	2	3,4
	1046	osd	0,72	0,58	2	0,006	0,008	2	1,2
	1213	osd	0,99	0,78	9	0,000	0,007	2	2,1
	1215	2 der	0,99	0,93	5	0,002	0,004	0	2,9
	1274	osd	0,46	0,22	1	0,015	0,017	1	1,0
	7074	osd	0,67	0,60	1	0,015	0,017	1	1,2
F.móida	57	osd	0,91	0,80	4	0,006	0,010	0	1,3
	1046	1 der	0,63	0,38	3	0,009	0,012	1	0,7
	1213	osd	0,70	0,43	3	0,024	0,032	1	0,4
	1215	osd	0,46	0,27	1	0,032	0,035	1	0,4
	1274	1 der	0,94	0,81	7	0,010	0,019	2	1,0
	7074	osd	0,99	0,82	12	0,003	0,025	1	0,8
F.sólida	57	1 der	0,96	0,89	5	0,003	0,005	0	2,3
	1046	1 der	0,48	0,02	2	0,007	0,010	1	0,9
	1213	1 der	0,99	0,65	11	0,001	0,011	1	1,3
	1215	osd	0,80	0,72	2	0,006	0,008	2	1,6
	1274	1 der	0,98	0,92	5	0,004	0,007	1	2,7
	7074	1 der	0,73	0,64	1	0,014	0,016	1	1,3

B.móida: aparelho Bruker amostra de madeira móida; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (g/cm^3); SECV: erro padrão da validação cruzada (g/cm^3); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

TABELA 4 Calibrações NIRS para densidade básica média (DBM) por regional

Aparelho	Regional	Filtro	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	Cocais	osd	0,96	0,89	8	0,007	0,013	1	2,2
	Guanhães	osd	0,95	0,85	9	0,011	0,018	0	1,8
	Rio Doce	1 der	0,97	0,86	8	0,006	0,013	2	2,1
	Sta. Bárbara	1 der	0,95	0,91	4	0,009	0,013	1	2,6
B.sólida	Cocais	osd	0,80	0,72	3	0,016	0,019	1	1,6
	Guanhães	osd	0,91	0,56	8	0,014	0,032	0	1,1
	Rio Doce	osd	0,97	0,83	10	0,005	0,015	2	1,8
	Sta. Bárbara	osd	0,99	0,97	9	0,004	0,007	0	4,7
F.moída	Cocais	osd	0,47	0,05	4	0,009	0,012	1	2,4
	Guanhães	osd	0,25	0,01	1	0,017	0,018	1	1,9
	Rio Doce	osd	0,25	0,00	1	0,013	0,014	1	1,9
	Sta. Bárbara	1 der	0,97	0,93	6	0,008	0,013	1	2,7
F.sólida	Cocais	osd	0,98	0,83	9	0,006	0,016	1	1,8
	Guanhães	1 der	0,96	0,92	5	0,009	0,013	1	2,5
	Rio Doce	osd	0,95	0,80	7	0,007	0,016	1	1,7
	Sta. Bárbara	osd	0,85	0,80	2	0,017	0,019	1	1,9

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (g/cm^3); SECV: erro padrão da validação cruzada (g/cm^3); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

TABELA 5 Calibrações NIRS para teor de glicanas por clone

Aparelho	Clones	Filtro	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.móida	57	osd	0,69	0,60	1	1,363	1,532	1	1,4
	1046	osd	0,89	0,79	4	0,915	1,276	1	1,6
	1213	1 der	0,90	0,71	4	0,906	1,540	1	1,4
	1215	osd	0,80	0,65	4	1,058	1,386	1	1,5
	1274	osd	0,93	0,74	7	0,787	1,548	1	1,4
	7074	2 der	0,79	0,54	2	0,771	1,089	1	1,3
B.sólida	57	osd	0,21	-0,25	1	2,108	2,395	0	0,9
	1046	1 de	0,96	0,93	3	0,532	0,787	2	2,6
	1213	osd	0,88	0,53	6	0,946	1,840	1	1,1
	1215	osd	0,29	0,02	1	1,930	2,148	0	0,9
	1274	osd	0,99	0,82	8	0,273	1,259	1	1,8
	7074	osd	0,40	0,13	1	1,163	1,341	1	1,0
F.móida	57	osd	0,72	0,19	4	1,284	2,090	1	1,0
	1046	1 der	0,65	0,56	1	1,109	1,215	1	1,7
	1213	osd	0,90	0,81	3	1,101	1,506	1	1,4
	1215	2 der	0,81	0,05	3	0,673	1,431	1	1,4
	1274	osd	0,42	0,11	1	1,820	2,086	1	1,1
	7074	osd	0,96	0,83	7	0,767	1,645	1	0,8
F.sólida	57	1 der	0,82	0,72	3	1,210	1,505	0	1,4
	1046	2 der	0,84	0,73	2	1,047	1,325	2	1,5
	1213	osd	0,90	0,80	5	0,852	1,221	1	1,7
	1215	osd	0,88	0,67	6	0,814	1,413	1	1,4
	1274	osd	0,68	0,50	4	0,581	0,712	1	3,1
	7074	1 der	0,62	0,46	1	1,043	1,198	1	1,2

B.móida: aparelho Bruker amostra de madeira móida; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

TABELA 6 Calibrações NIRS para teor de glicanas por regional

Aparelho	Regional	Filtro	Rc	Rev	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	Cocais	osd	0,92	0,83	7	0,981	1,481	1	1,7
	Guanhães	1 der	0,90	0,84	2	1,038	1,334	1	1,8
	Rio Doce	osd	0,70	0,64	1	1,098	1,198	1	1,3
	Sta. Bárbara	osd	0,75	0,63	4	1,236	1,499	1	1,4
B.sólida	Cocais	osd	0,15	-0,36	1	2,577	3,048	0	0,9
	Guanhães	osd	0,90	0,83	6	1,034	1,358	0	1,8
	Rio Doce	osd	0,94	0,66	8	0,503	1,294	2	1,2
	Sta. Bárbara	osd	0,95	0,88	8	0,596	0,994	1	2,1
F.moída	Cocais	1 der	0,93	0,53	4	0,792	1,851	1	1,4
	Guanhães	2 der	0,65	0,44	4	1,323	1,644	2	1,5
	Rio Doce	osd	0,58	0,28	3	1,848	2,455	0	0,6
	Sta. Bárbara	osd	0,12	-0,27	1	1,416	1,494	0	1,4
F.sólida	Cocais	osd	0,95	0,80	11	0,601	1,244	0	2,1
	Guanhães	osd	0,85	0,77	4	1,250	1,532	1	1,6
	Rio Doce	osd	0,95	0,86	10	0,450	0,762	2	2,0
	Sta. Bárbara	1 der	0,80	0,67	4	1,136	1,431	1	1,4

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rev: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

TABELA 7 Calibrações NIRS para teor de xilanas por clone

Aparelho	Clones	Filtro	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.móida	57	osd	0,94	0,85	7	0,272	0,428	1	1,9
	1046	osd	0,98	0,89	8	0,069	0,210	1	2,3
	1213	1 der	0,93	0,83	2	0,219	0,334	1	1,8
	1215	2 der	0,99	0,95	11	0,009	0,120	1	3,2
	1274	osd	0,90	0,79	5	0,116	0,169	1	1,8
	7074	osd	0,81	0,70	3	0,271	0,338	1	1,4
B.sólida	57	osd	0,97	0,90	6	0,182	0,351	2	2,3
	1046	osd	0,95	0,79	8	0,139	0,312	1	1,5
	1213	osd	0,24	-0,65	1	0,577	0,705	0	0,8
	1215	osd	0,48	0,28	1	0,298	0,335	1	1,1
	1274	osd	0,62	0,37	2	0,181	0,224	2	1,4
	7074	osd	0,74	0,67	1	0,305	0,344	2	1,4
F.móida	57	osd	0,83	0,77	2	0,644	0,751	1	1,1
	1046	1 der	0,92	0,76	3	0,114	0,198	1	2,4
	1213	osd	0,95	0,89	5	0,252	0,371	1	1,6
	1215	2 der	0,59	0,02	2	0,445	0,632	1	0,6
	1274	2 der	0,68	0,56	1	0,547	0,633	1	0,5
	7074	osd	0,99	0,39	9	0,044	0,841	0	0,6
F.sólida	57	2 der	0,96	0,90	4	0,188	0,300	2	2,7
	1046	2 der	0,95	0,87	5	0,148	0,241	1	2,0
	1213	2 der	0,67	0,52	1	0,434	0,505	1	1,2
	1215	osd	0,88	0,61	6	0,156	0,296	1	1,3
	1274	1 der	0,97	0,77	8	0,068	0,187	1	1,7
	7074	2 der	0,82	0,72	2	0,264	0,323	1	1,4

B.móida: aparelho Bruker amostra de madeira móida; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

TABELA 8 Calibrações NIRS para teor de xilanas por regional

Aparelho	Regional	Filtro	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	Cocais	1 der	0,96	0,93	2	0,266	0,382	2	2,7
	Guanhães	2 der	0,69	0,57	2	0,411	0,475	2	1,3
	Rio Doce	1 der	0,94	0,90	3	0,273	0,360	1	2,4
	Sta. Bárbara	1 der	0,99	0,79	7	0,053	0,418	0	1,6
B.sólida	Cocais	osd	0,90	0,74	7	0,438	0,700	2	1,5
	Guanhães	osd	0,59	0,39	3	0,475	0,557	1	1,1
	Rio Doce	osd	0,90	0,69	7	0,368	0,679	2	1,3
	Sta. Bárbara	osd	0,88	0,74	6	0,261	0,380	3	1,8
F.moída	Cocais	1 der	0,74	0,68	1	0,462	0,506	2	2,0
	Guanhães	2 der	0,84	0,75	3	0,379	0,476	1	1,3
	Rio Doce	1 der	0,50	0,30	2	0,377	0,427	1	2,0
	Sta. Bárbara	osd	0,58	0,40	2	0,328	0,380	2	1,8
F.sólida	Cocais	1 der	0,93	0,86	5	0,359	0,500	1	2,1
	Guanhães	1 der	0,57	0,43	2	0,474	0,528	1	1,2
	Rio Doce	osd	0,94	0,83	8	0,292	0,484	1	1,8
	Sta. Bárbara	1 der	0,88	0,67	5	0,290	0,472	1	1,4

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

TABELA 9 Calibrações NIRS para teor de celulose por clone

Aparelho	Clones	Filtro	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.móida	57	osd	0,68	0,58	1	1,472	1,644	1	1,4
	1046	osd	0,89	0,80	4	0,934	1,300	1	1,6
	1213	1 der	0,90	0,74	4	0,997	1,655	1	1,4
	1215	1 der	0,99	0,83	8	0,166	1,073	1	2,0
	1274	1 der	0,40	0,20	1	1,887	2,074	1	1,1
	7074	osd	0,98	0,86	8	0,321	1,131	2	2,0
B.sólida	57	osd	0,69	0,39	1	1,435	1,881	1	1,2
	1046	osd	0,68	0,58	1	1,588	1,774	2	1,2
	1213	osd	0,86	0,50	6	1,169	2,244	0	1,0
	1215	osd	0,38	0,13	1	1,746	1,998	1	1,1
	1274	osd	0,98	0,86	8	0,321	1,131	2	2,0
	7074	osd	0,35	0,07	1	1,285	1,462	0	0,9
F.móida	57	osd	0,75	0,62	2	1,471	1,771	1	1,3
	1046	1 der	0,47	0,22	1	1,245	1,425	1	1,5
	1213	osd	0,80	0,72	2	1,635	1,880	1	1,2
	1215	2 der	0,79	0,03	3	1,014	1,954	0	1,1
	1274	osd	0,41	0,10	1	1,819	2,084	1	1,1
	7074	osd	0,88	0,82	3	1,299	1,602	1	0,9
F.sólida	57	2 der	0,93	0,83	4	0,829	1,284	1	1,8
	1046	1 der	0,81	0,71	2	1,203	1,444	1	1,4
	1213	osd	0,92	0,79	7	0,837	1,424	1	1,6
	1215	osd	0,86	0,71	5	0,940	1,349	1	1,6
	1274	1 der	0,47	0,27	1	1,857	2,089	1	1,1
	7074	1 der	0,61	0,44	1	1,046	1,210	1	1,1

B.móida: aparelho Bruker amostra de madeira móida; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

TABELA 10 Calibrações NIRS para teor de celulose por regional

Aparelho	Regional	Filtro	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	Cocais	osd	0,93	0,81	8	0,944	1,638	1	1,7
	Guanhães	1 der	0,89	0,85	2	1,133	1,320	1	1,9
	Rio Doce	osd	0,67	0,59	2	1,121	1,231	1	1,3
	Sta. Bárbara	2 der	0,93	0,88	3	0,610	0,812	2	2,6
B.sólida	Cocais	1d	0,88	0,64	7	1,236	2,191	1	1,3
	Guanhães	osd	0,91	0,83	7	0,986	1,447	0	1,7
	Rio Doce	osd	0,92	0,65	8	0,607	1,212	1	1,3
	Sta. Bárbara	osd	0,95	0,87	8	0,619	1,035	1	2,0
F.moída	Cocais	osd	0,41	0,10	2	2,103	2,422	0	1,1
	Guanhães	2 der	0,67	0,44	4	1,432	1,806	2	1,4
	Rio Doce	osd	0,55	0,04	3	1,750	2,450	2	0,6
	Sta. Bárbara	1 der	0,69	0,58	2	0,929	1,061	2	2,0
F.sólida	Cocais	2 der	0,89	0,74	4	1,205	1,858	2	1,5
	Guanhães	1 der	0,88	0,80	4	1,115	1,497	2	1,6
	Rio Doce	osd	0,87	0,76	6	0,748	1,006	1	1,5
	Sta. Bárbara	1 der	0,8	0,68	4	1,133	1,428	1	1,5

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

TABELA 11 Calibrações NIRS para teor de hemiceluloses por clone

Aparelho	Clones	Filtro	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.móida	57	osd	0,83	0,57	5	0,873	1,413	1	1,3
	1046	1 der	0,92	0,86	2	0,462	0,610	1	2,2
	1213	osd	0,90	0,84	4	0,636	0,808	1	1,8
	1215	2 der	0,79	0,72	1	0,665	0,765	1	1,6
	1274	osd	0,91	0,78	5	0,354	0,553	1	1,6
	7074	1 der	0,88	0,82	2	0,350	0,439	1	1,9
B.sólida	57	osd	0,99	0,74	8	0,153	1,221	3	1,5
	1046	osd	0,99	0,89	10	0,041	0,617	1	2,1
	1213	osd	0,22	-0,35	1	1,397	1,780	0	0,8
	1215	osd	0,95	0,63	8	0,364	1,115	0	1,1
	1274	osd	0,98	0,89	8	0,161	0,369	1	2,3
	7074	osd	0,86	0,77	3	0,386	0,484	1	1,7
F.móida	57	osd	0,96	0,75	6	0,558	1,349	1	1,4
	1046	1 der	0,81	0,02	1	0,449	0,932	1	1,4
	1213	osd	0,66	0,51	2	1,284	1,510	1	1,0
	1215	osd	0,60	0,42	2	0,827	0,963	0	1,3
	1274	2 der	0,56	0,42	1	0,890	0,995	1	0,9
	7074	osd	0,64	0,42	2	0,951	1,151	0	0,7
F.sólida	57	osd	0,89	0,78	5	0,793	1,150	1	1,6
	1046	2 der	0,61	0,37	2	0,964	1,189	1	1,1
	1213	2 der	0,87	0,79	2	0,701	0,877	1	1,7
	1215	osd	0,98	0,69	11	0,181	0,926	1	1,3
	1274	1 der	0,72	0,54	2	0,519	0,654	2	1,3
	7074	2 der	0,91	0,85	5	0,333	0,428	1	1,9

B.móida: aparelho Bruker amostra de madeira móida; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

TABELA 12 Calibrações NIRS para teor de hemiceluloses por regional

Aparelho	Regional	Filtro	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	Cocais	1 der	0,89	0,82	3	0,927	1,168	1	1,7
	Guanhães	osd	0,93	0,65	8	0,450	1,011	1	1,2
	Rio Doce	1 der	0,93	0,85	3	0,470	0,681	1	1,9
	Sta. Bárbara	osd	0,70	0,47	4	0,599	0,768	2	1,2
B.sólida	Cocais	osd	0,76	0,64	2	1,283	1,526	1	1,3
	Guanhães	osd	0,47	0,27	2	1,124	1,257	0	1,0
	Rio Doce	osd	0,80	0,60	6	0,754	1,066	0	1,2
	Sta. Bárbara	osd	0,49	0,39	1	0,821	0,875	0	1,1
F.moída	Cocais	1 der	0,51	0,35	1	1,417	1,550	0	1,3
	Guanhães	osd	0,88	0,50	7	0,656	1,242	1	1,0
	Rio Doce	1 der	0,56	0,39	3	0,860	0,975	1	1,3
	Sta. Bárbara	osd	0,78	0,62	4	0,438	0,568	2	1,7
F.sólida	Cocais	2 der	0,95	0,87	5	0,568	0,907	2	2,2
	Guanhães	1 der	0,35	0,04	2	1,190	1,355	0	0,9
	Rio Doce	osd	0,98	0,80	10	0,171	0,759	1	1,7
	Sta. Bárbara	1 der	0,99	0,70	12	0,082	0,654	15	1,4

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

TABELA 13 Calibrações NIRS para teor de lignina por clone

Aparelho	Clones	Filtro	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.móida	57	1 der	0,99	0,80	8	0,092	0,558	0	1,6
	1046	osd	0,84	0,68	4	0,769	1,089	1	1,3
	1213	2 der	0,90	0,14	2	0,505	1,341	0	0,9
	1215	1 der	0,99	0,74	8	0,071	0,950	1	1,4
	1274	2 der	0,92	0,87	2	0,585	0,777	1	2,1
	7074	2 der	0,90	0,83	2	0,454	0,601	1	1,8
B.sólida	57	osd	0,35	0,06	1	0,849	0,973	0	0,9
	1046	1 der	0,97	0,94	2	0,352	0,503	1	2,9
	1213	osd	0,86	0,79	4	0,573	0,706	1	1,7
	1215	osd	0,54	0,28	1	1,104	1,324	1	1,0
	1274	osd	0,91	0,80	5	0,653	0,983	1	1,6
	7074	osd	0,58	0,39	1	0,887	1,050	1	1,0
F.móida	57	osd	0,59	0,46	1	0,784	0,888	1	1,0
	1046	1 der	0,63	0,45	1	1,081	1,274	1	1,1
	1213	osd	0,59	0,33	2	1,210	1,465	0	0,8
	1215	osd	0,75	0,63	2	0,616	0,736	1	1,9
	1274	1 der	0,99	0,89	12	0,063	0,511	2	3,1
	7074	osd	0,99	0,92	7	0,192	0,772	1	1,4
F.sólida	57	1 der	0,74	0,52	3	0,560	0,737	1	1,2
	1046	1 der	0,83	0,66	5	0,731	1,021	1	1,4
	1213	osd	0,93	0,67	6	0,436	0,927	0	1,3
	1215	1 der	0,98	0,83	12	0,224	0,721	1	1,9
	1274	osd	0,99	0,62	12	0,022	1,242	1	1,3
	7074	1 der	0,51	0,34	1	0,854	0,949	1	1,2

B.móida: aparelho Bruker amostra de madeira móida; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

TABELA 14 Calibrações NIRS para teor de lignina por regional

Aparelho	Regional	Filtro	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	Cocais	1 der	0,83	0,72	2	0,670	0,842	2	1,6
	Guanhães	osd	0,86	0,80	4	0,765	0,922	2	1,7
	Rio Doce	2 der	0,65	0,42	2	0,721	0,890	1	1,1
	Sta. Bárbara	1 der	0,93	0,88	2	0,624	0,824	2	2,1
B.sólida	Cocais	osd	0,80	0,64	5	0,791	1,012	1	1,4
	Guanhães	osd	0,99	0,75	10	0,211	1,042	1	1,5
	Rio Doce	osd	0,89	0,39	9	0,969	1,102	0	0,9
	Sta. Bárbara	osd	0,95	0,86	9	0,507	0,880	1	1,9
F.moída	Cocais	osd	0,78	0,66	3	0,780	0,942	1	1,4
	Guanhães	2 der	0,70	0,58	2	0,871	1,003	1	1,5
	Rio Doce	osd	0,54	0,01	3	1,362	1,984	0	0,5
	Sta. Bárbara	osd	0,17	0,03	1	1,128	1,177	0	1,5
F.sólida	Cocais	osd	0,27	0,00	1	1,325	1,441	0	0,9
	Guanhães	1 der	0,99	0,88	9	0,597	0,860	2	1,8
	Rio Doce	1 der	0,39	0,19	1	0,891	0,971	0	1,0
	Sta. Bárbara	1 der	0,82	0,67	4	0,950	1,289	17	1,3

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio.

TABELA 15 Calibrações NIRS para teor de extrativos por clone

Aparelho	Clones	Filtro	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.móida	57	2 der	0,96	0,90	3	0,062	0,102	1	2,4
	1046	1 der	0,93	0,61	6	0,169	0,380	1	1,2
	1213	1 der	0,93	0,83	3	0,178	0,276	1	1,9
	1215	1 der	0,97	0,82	5	0,104	0,251	1	2,1
	1274	osd	0,98	0,90	10	0,056	0,163	1	2,2
	7074	osd	0,53	0,14	3	0,210	0,269	2	1,3
B.sólida	57	osd	0,48	0,27	1	0,212	0,242	0	1,0
	1046	osd	0,89	0,45	6	0,143	0,296	2	1,6
	1213	osd	0,20	0,01	1	0,504	0,551	0	0,9
	1215	osd	0,99	0,74	9	0,058	0,340	2	1,6
	1274	osd	0,81	0,58	4	0,206	0,289	1	1,3
	7074	osd	0,62	0,10	4	0,240	0,360	1	1,0
F.móida	57	osd	0,47	0,02	2	0,375	0,479	0	0,5
	1046	osd	0,38	0,17	1	0,365	0,398	1	1,2
	1213	osd	0,67	0,51	2	0,229	0,269	0	1,9
	1215	osd	0,98	0,86	5	0,078	0,206	1	2,6
	1274	osd	0,77	0,60	4	0,180	0,235	1	1,5
	7074	osd	0,86	0,68	4	0,269	0,391	4	0,9
F.sólida	57	1 der	0,99	0,80	6	0,032	0,140	1	1,7
	1046	osd	0,66	0,49	2	0,175	0,218	2	2,1
	1213	osd	0,63	0,04	4	0,320	0,508	1	1,0
	1215	osd	0,79	0,11	5	0,328	0,715	0	0,7
	1274	1 der	0,99	0,74	12	0,005	0,245	0	1,5
	7074	1 der	0,44	0,15	2	0,313	0,364	0	1,0

B.móida: aparelho Bruker amostra de madeira móida; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio

TABELA 16 Calibrações NIRS para teor de extrativos por regional

Aparelho	Regional	Filtro	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	Cocais	osd	0,64	0,44	4	0,250	0,304	0	1,1
	Guanhães	1 der	0,84	0,62	4	0,214	0,321	1	1,4
	Rio Doce	1 der	0,74	0,64	1	0,158	0,180	2	2,1
	Sta. Bárbara	1 der	0,35	0,09	1	0,347	0,385	2	1,2
B.sólida	Cocais	1d	0,87	0,74	4	0,159	0,223	1	1,5
	Guanhães	osd	0,98	0,85	9	0,074	0,254	1	1,8
	Rio Doce	osd	0,15	-0,20	1	0,368	0,392	0	1,0
	Sta. Bárbara	osd	0,47	0,27	1	0,354	0,398	1	1,2
F.moída	Cocais	osd	0,66	0,52	3	0,189	0,219	1	1,5
	Guanhães	osd	0,73	0,63	2	0,344	0,392	2	1,2
	Rio Doce	osd	0,64	0,01	5	0,376	0,607	0	0,6
	Sta. Bárbara	osd	0,58	0,51	1	0,210	0,223	2	2,1
F.sólida	Cocais	1 der	0,97	0,93	10	0,057	0,090	2	3,6
	Guanhães	1 der	0,52	0,40	1	0,337	0,364	1	1,3
	Rio Doce	osd	0,66	0,42	4	0,211	0,262	1	1,4
	Sta. Bárbara	osd	0,53	0,10	4	0,404	0,556	0	0,9

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (%); SECV: erro padrão da validação cruzada (%); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio

TABELA 17 Calibrações NIRS para relação S/G por clone

Aparelho	Clones	Filtro	Rc	Rcv	Fatores	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.móida	57	osd	0,99	0,96	9	0,018	0,040	1	3,6
	1046	2 der	0,70	0,54	1	0,086	0,103	1	2,3
	1213	1 der	0,43	0,12	1	0,248	0,287	0	1,0
	1215	1 der	0,97	0,94	3	0,027	0,042	4	3,5
	1274	1 der	0,82	0,57	3	0,079	0,117	2	1,5
	7074	1 der	0,89	0,81	2	0,120	0,154	1	2,0
B.sólida	57	osd	0,94	0,84	6	0,044	0,075	1	1,9
	1046	osd	0,59	0,38	2	0,096	0,114	1	2,0
	1213	osd	0,39	0,09	1	0,153	0,171	1	1,6
	1215	1 der	0,91	0,75	4	0,053	0,088	2	1,7
	1274	osd	0,32	-0,18	1	0,153	0,181	1	1,0
	7074	osd	0,78	0,60	3	0,163	0,213	1	1,4
F.móida	57	osd	0,57	0,13	4	0,126	0,178	1	0,8
	1046	osd	0,87	0,82	2	0,133	0,161	1	1,4
	1213	osd	0,61	0,42	2	0,196	0,229	1	1,2
	1215	osd	0,97	0,95	4	0,059	0,085	1	1,7
	1274	osd	0,48	0,30	1	0,107	0,119	1	1,5
	7074	2 der	0,90	0,63	8	0,165	0,337	0	0,9
F.sólida	57	1 der	0,94	0,88	3	0,047	0,069	0	2,1
	1046	2 der	0,39	0,20	1	0,110	0,120	1	1,9
	1213	2 der	0,49	0,28	1	0,145	0,165	1	1,7
	1215	2 der	0,95	0,92	3	0,042	0,055	1	2,6
	1274	1 der	0,82	0,65	3	0,092	0,125	1	1,5
	7074	osd	0,54	0,40	1	0,256	0,282	0	1,1

B.móida: aparelho Bruker amostra de madeira móida; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (mol/mol); SECV: erro padrão da validação cruzada (mol/mol); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio

TABELA 18 Calibrações NIRS para relação S/G por regional

Aparelho	Regional	Filtro	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	Cocais	2 der	0,77	0,63	2	0,149	0,188	0	1,2
	Guanhães	osd	0,86	0,71	6	0,133	0,191	2	1,6
	Rio Doce	osd	0,98	0,87	11	0,035	0,091	2	1,9
	Sta. Bárbara	1 der	0,89	0,85	2	0,131	0,153	2	2,2
B.sólida	Cocais	osd	0,60	0,48	2	0,157	0,174	1	1,4
	Guanhães	osd	0,89	0,69	7	0,123	0,210	2	1,4
	Rio Doce	osd	0,97	0,90	9	0,038	0,078	1	2,3
	Sta. Bárbara	osd	0,35	0,21	11	0,214	1,157	1	0,3
F.moída	Cocais	osd	0,84	0,56	4	0,138	0,222	1	1,1
	Guanhães	1 der	0,78	0,56	7	0,091	0,135	1	2,2
	Rio Doce	osd	0,46	0,26	2	0,163	0,182	0	1,0
	Sta. Bárbara	osd	0,81	0,64	5	0,129	0,178	1	1,9
F.sólida	Cocais	osd	0,99	0,53	12	0,012	0,184	0	1,3
	Guanhães	1 der	0,88	0,75	8	0,129	0,188	1	1,6
	Rio Doce	osd	0,93	0,70	10	0,059	0,126	1	1,4
	Sta. Bárbara	osd	0,89	0,85	4	0,150	0,180	1	1,9

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (mol/mol); SECV: erro padrão da validação cruzada (mol/mol); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio

TABELA 19 Calibrações NIRS para comprimento das fibras por clone

Aparelho	Clones	Filtro	Rc	Rcv	Fatores	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.móida	57	2 der	0,94	0,90	2	0,030	0,037	1	2,5
	1046	1 der	0,97	0,78	4	0,019	0,054	1	1,5
	1213	osd	0,84	0,68	4	0,047	0,066	1	1,3
	1215	1 der	0,94	0,90	2	0,022	0,028	1	2,3
	1274	1 der	0,73	0,65	1	0,055	0,063	2	1,5
	7074	1 der	0,97	0,87	4	0,022	0,047	1	2,1
B.sólida	57	osd	0,98	0,67	8	0,015	0,079	1	1,2
	1046	osd	0,79	0,66	3	0,049	0,062	0	1,3
	1213	osd	0,83	0,61	5	0,044	0,070	1	1,2
	1215	osd	0,67	0,42	3	0,038	0,051	2	1,3
	1274	1 der	0,96	0,83	5	0,024	0,051	0	1,8
	7074	1 der	0,94	0,89	3	0,032	0,044	1	2,3
F.móida	57	osd	0,99	0,70	12	0,006	0,059	0	1,6
	1046	1 der	0,89	0,81	3	0,031	0,042	1	1,9
	1213	1 der	0,43	0,24	1	0,063	0,069	1	1,2
	1215	1 der	0,93	0,85	4	0,039	0,055	1	1,2
	1274	1 der	0,99	0,86	9	0,015	0,057	1	1,6
	7074	1 der	0,98	0,93	3	0,015	0,028	1	3,5
F.sólida	57	osd	0,91	0,84	4	0,036	0,049	1	1,9
	1046	osd	0,40	0,19	1	0,060	0,067	1	1,2
	1213	2 der	0,93	0,89	3	0,030	0,040	1	2,2
	1215	osd	0,97	0,57	8	0,011	0,047	2	1,4
	1274	osd	0,55	0,39	2	0,074	0,082	1	1,1
	7074	osd	0,95	0,88	5	0,029	0,048	1	2,1

B.móida: aparelho Bruker amostra de madeira móida; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (mm); SECV: erro padrão da validação cruzada (mm); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio

TABELA 20 Calibrações NIRS para o comprimento das fibras por regional

Aparelho	Regional	Filtro	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	Cocais	osd	0,98	0,70	9	0,015	0,065	1	1,3
	Guanhães	1 der	0,87	0,67	5	0,030	0,046	1	1,4
	Rio Doce	osd	0,99	0,73	12	0,001	0,056	1	1,6
	Sta. Bárbara	osd	0,95	0,86	7	0,021	0,036	2	1,9
B.sólida	Cocais	1d	0,94	0,73	4	0,028	0,060	0	1,4
	Guanhães	osd	0,47	0,27	3	0,059	0,067	0	1,0
	Rio Doce	osd	0,83	0,71	4	0,047	0,060	1	1,4
	Sta. Bárbara	osd	0,45	0,26	2	0,055	0,060	1	1,2
F.moída	Cocais	osd	0,33	0,02	2	0,085	0,096	0	0,9
	Guanhães	osd	0,50	0,03	3	0,067	0,087	1	0,8
	Rio Doce	2 der	0,94	0,84	8	0,021	0,035	2	2,5
	Sta. Bárbara	osd	0,23	-0,40	1	0,090	0,109	0	0,6
F.sólida	Cocais	1 der	0,99	0,88	12	0,006	0,039	2	2,2
	Guanhães	osd	0,51	0,39	1	0,057	0,062	1	1,1
	Rio Doce	1 der	0,88	0,80	4	0,039	0,050	1	1,7
	Sta. Bárbara	1 der	0,99	0,77	10	0,007	0,039	2	1,8

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (mm); SECV: erro padrão da validação cruzada (mm); *outlier*: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio

TABELA 21 Calibrações NIRS para espessura da parede das fibras por clone

Aparelho	Clones	Filtro	Rc	Rcv	Fatores	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.móida	57	osd	0,66	0,50	2	0,211	0,248	0	1,1
	1046	osd	0,86	0,76	4	0,148	0,189	1	1,7
	1213	1 der	0,97	0,92	3	0,057	0,091	1	3,6
	1215	2 der	0,83	0,76	1	0,145	0,168	1	1,8
	1274	1 der	0,73	0,57	2	0,273	0,339	1	1,3
	7074	osd	0,38	0,02	2	0,348	0,402	0	0,9
B.sólida	57	osd	0,43	0,10	1	0,255	0,297	0	1,0
	1046	osd	0,97	0,86	7	0,072	0,175	2	1,9
	1213	osd	0,73	0,32	5	0,225	0,350	0	0,9
	1215	osd	0,79	0,67	3	0,158	0,193	2	1,6
	1274	osd	0,85	0,78	3	0,189	0,225	1	1,9
	7074	osd	0,84	0,63	5	0,190	0,287	2	1,3
F.móida	57	1 der	0,68	0,58	1	0,140	0,158	1	1,8
	1046	osd	0,55	0,21	2	0,246	0,309	0	1,1
	1213	osd	0,87	0,71	4	0,166	0,251	1	1,3
	1215	osd	0,66	0,59	1	0,219	0,237	1	1,3
	1274	1 der	0,28	0,13	1	0,336	0,359	0	1,2
	7074	1 der	0,94	0,89	2	0,201	0,261	0	1,4
F.sólida	57	1 der	0,95	0,75	10	0,073	0,170	2	1,7
	1046	1 der	0,97	0,91	5	0,070	0,125	1	2,6
	1213	1 der	0,97	0,93	6	0,073	0,120	1	2,7
	1215	osd	0,98	0,84	7	0,060	0,167	1	1,8
	1274	osd	0,64	0,40	3	0,308	0,388	1	1,1
	7074	1 der	0,87	0,70	7	0,156	0,249	1	1,5

B.móida: aparelho Bruker amostra de madeira móida; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (μm); SECV: erro padrão da validação cruzada (μm); *outlier*: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio

TABELA 22 Calibrações NIRS para a espessura da parede das fibras por regional

Aparelho	Regional	Filtro	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	Cocais	2 der	0,79	0,68	2	0,194	0,237	1	1,4
	Guanhães	1 der	0,98	0,85	8	0,062	0,233	2	2,0
	Rio Doce	osd	0,92	0,57	6	0,107	0,236	1	1,2
	Sta. Bárbara	osd	0,02	-0,90	1	0,217	0,237	0	1,2
B.sólida	Cocais	osd	0,07	-0,60	1	0,324	0,382	0	0,8
	Guanhães	osd	0,86	0,69	7	0,226	0,344	1	1,3
	Rio Doce	osd	0,83	0,68	5	0,161	0,217	1	1,3
	Sta. Bárbara	osd	0,20	-0,43	1	0,266	0,320	0	0,9
F.moída	Cocais	osd	0,69	0,54	3	0,270	0,319	1	1,0
	Guanhães	2 der	0,45	0,30	1	0,195	0,212	1	2,1
	Rio Doce	osd	0,25	0,02	1	0,342	0,364	1	0,8
	Sta. Bárbara	2 der	0,59	0,04	2	0,281	0,394	0	0,7
F.sólida	Cocais	1 der	0,43	0,27	1	0,265	0,289	2	1,1
	Guanhães	1 der	0,88	0,84	2	0,213	0,247	2	1,8
	Rio Doce	osd	0,44	0,03	4	0,260	0,319	0	0,9
	Sta. Bárbara	1 der	0,76	0,32	4	0,164	0,257	1	1,1

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (μm); SECV: erro padrão da validação cruzada (μm); outlier: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio

TABELA 23A Calibrações NIRS para a largura das fibras por clone

Aparelho	Clones	Filtro	Rc	Rcv	Fatores	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.móida	57	2 der	0,82	0,75	1	0,726	0,838	1	1,5
	1046	osd	0,90	0,81	4	0,733	1,019	1	1,6
	1213	osd	0,94	0,90	4	0,500	0,669	1	2,2
	1215	1 der	0,94	0,92	2	0,523	0,635	2	2,8
	1274	osd	0,99	0,95	8	0,186	0,495	1	3,2
	7074	1 der	0,96	0,90	3	0,492	0,791	1	2,3
B.sólida	57	osd	0,92	0,63	7	0,399	0,895	2	1,4
	1046	osd	0,93	0,82	5	0,547	0,868	2	1,9
	1213	osd	0,79	0,47	5	0,904	1,562	0	1,0
	1215	1 der	0,76	0,61	2	1,079	1,372	1	1,3
	1274	osd	0,88	0,78	3	0,675	0,895	3	1,8
	7074	osd	0,84	0,72	4	0,970	1,243	0	1,4
F.móida	57	1 der	0,85	0,79	2	0,742	0,886	1	1,4
	1046	osd	0,89	0,83	3	0,698	0,891	1	1,9
	1213	1 der	0,96	0,89	5	0,407	0,685	1	2,2
	1215	osd	0,88	0,82	3	0,797	0,963	1	1,8
	1274	2 der	0,91	0,79	5	0,617	0,948	1	1,7
	7074	1 der	0,98	0,92	4	0,297	0,578	1	3,1
F.sólida	57	1 der	0,97	0,92	5	0,260	0,460	1	2,7
	1046	1 der	0,98	0,71	7	0,264	1,144	1	1,5
	1213	2 der	0,91	0,83	3	0,628	0,845	1	1,8
	1215	osd	0,99	0,64	10	0,232	1,435	1	1,2
	1274	1 der	0,37	0,19	1	1,407	1,551	1	1,0
	7074	osd	0,98	0,93	6	0,282	0,631	1	2,8

B.móida: aparelho Bruker amostra de madeira móida; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (μm); SECV: erro padrão da validação cruzada (μm); *outlier*: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio

TABELA 24 Calibrações NIRS para a largura das fibras por regional

Aparelho	Regional	Filtro	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	Cocais	2 der	0,83	0,72	5	0,421	0,528	2	1,5
	Guanhães	1 der	0,79	0,73	1	0,515	0,576	1	1,5
	Rio Doce	osd	0,86	0,77	5	0,748	0,957	1	1,6
	Sta. Bárbara	1 der	0,9	0,81	3	0,438	0,585	2	1,7
B.sólida	Cocais	osd	0,24	-0,05	1	0,647	0,702	1	1,1
	Guanhães	osd	0,18	-0,18	1	0,877	0,942	0	0,9
	Rio Doce	osd	0,21	-0,22	1	1,469	1,625	0	0,9
	Sta. Bárbara	osd	0,8	0,63	5	0,582	0,775	1	1,3
F.moída	Cocais	osd	0,37	0,04	2	1,267	1,449	0	0,5
	Guanhães	2 der	0,67	0,46	2	1,091	1,325	2	0,7
	Rio Doce	osd	0,7	0,51	4	1,019	1,265	1	1,2
	Sta. Bárbara	osd	0,62	0,11	3	1,329	1,897	2	0,5
F.sólida	Cocais	1 der	0,4	0,25	1	0,611	0,652	1	1,2
	Guanhães	osd	0,72	0,61	3	0,575	0,667	2	1,3
	Rio Doce	osd	0,43	0,25	2	1,264	1,383	2	1,1
	Sta. Bárbara	1 der	0,98	0,67	10	0,157	0,733	1	1,3

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (μm); SECV: erro padrão da validação cruzada (μm); *outlier*: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio

TABELA 25 Calibrações NIRS para diâmetro do lume das fibras por clone

Aparelho	Clones	Filtro	Rc	Rcv	Fatores	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.móida	57	1 der	0,78	0,70	1	0,571	0,661	1	1,6
	1046	1 der	0,89	0,82	2	0,580	0,750	1	1,7
	1213	1 der	0,98	0,97	2	0,186	0,282	1	3,8
	1215	osd	0,87	0,84	1	0,684	0,776	1	1,8
	1274	osd	0,93	0,86	4	0,507	0,704	1	2,0
	7074	1 der	0,94	0,89	2	0,541	0,744	1	2,2
B.sólida	57	osd	0,58	0,12	5	0,856	1,392	0	0,8
	1046	osd	0,90	0,84	3	0,569	0,726	2	1,8
	1213	osd	0,76	0,35	5	0,698	1,320	0	0,8
	1215	1 der	0,84	0,56	2	0,699	1,092	1	1,3
	1274	osd	0,90	0,69	6	0,432	0,928	3	1,5
	7074	osd	0,71	0,46	4	1,120	1,518	0	1,1
F.móida	57	osd	0,68	0,34	3	0,952	1,401	0	0,8
	1046	osd	0,97	0,89	7	0,235	0,555	1	2,3
	1213	osd	0,55	0,32	2	1,017	1,202	0	0,9
	1215	osd	0,94	0,83	6	0,600	0,989	1	1,4
	1274	osd	0,56	0,23	2	0,867	1,147	1	1,2
	7074	osd	0,42	-0,07	2	0,742	0,934	0	1,7
F.sólida	57	2 der	0,86	0,78	2	0,531	0,657	0	1,6
	1046	2 der	0,60	0,48	1	1,018	1,129	1	1,2
	1213	1 der	0,90	0,83	3	0,455	0,591	1	1,8
	1215	osd	0,99	0,67	11	0,060	0,968	2	1,4
	1274	1 der	0,50	0,32	1	1,173	1,313	1	1,0
	7074	osd	0,70	0,25	3	1,136	1,758	0	0,9

B.móida: aparelho Bruker amostra de madeira móida; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (μm); SECV: erro padrão da validação cruzada (μm); *outlier*: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio

TABELA 26 Calibrações NIRS para diâmetro do lume das fibras por regional

Aparelho	Regional	Filtro	Rc	Rcv	Fat	SEC	SECV	Outlier	RPD
B.moída	Cocais	2 der	0,62	0,46	2	0,597	0,690	0	1,1
	Guanhães	1 der	0,98	0,85	9	0,175	0,637	1	1,8
	Rio Doce	osd	0,42	0,27	1	0,938	1,014	2	1,1
	Sta. Bárbara	osd	0,93	0,81	9	0,302	0,516	1	1,6
B.sólida	Cocais	osd	0,81	0,44	7	0,404	0,656	1	1,2
	Guanhães	osd	0,98	0,73	9	0,192	0,771	1	1,5
	Rio Doce	osd	0,42	-0,12	4	1,046	1,320	0	0,9
	Sta. Bárbara	osd	0,88	0,82	3	0,395	0,485	2	1,7
F.moída	Cocais	1 der	0,87	0,70	4	0,462	0,694	2	1,1
	Guanhães	2 der	0,61	0,45	3	1,013	1,168	1	1,0
	Rio Doce	osd	0,51	0,36	2	1,096	1,211	1	1,0
	Sta. Bárbara	osd	0,86	0,42	5	0,799	1,547	1	0,5
F.sólida	Cocais	osd	0,47	0,33	1	0,557	0,602	2	1,3
	Guanhães	1 der	0,76	0,64	3	0,668	0,805	2	1,4
	Rio Doce	1 der	0,38	0,22	1	1,014	1,086	1	1,1
	Sta. Bárbara	2 der	0,47	0,33	2	0,745	0,806	0	1,0

B.moída: aparelho Bruker amostra de madeira moída; B.sólida: aparelho Bruker amostra de madeira sólida; F.sólida: aparelho Femto amostra de madeira sólida; Trat: tratamento. osd: dados espectrais originais; 1d: primeira derivada; 2d:segunda derivada; Rc: coeficiente de correlação da calibração; Rcv: coeficiente de correlação da validação cruzada; Fat: número de fatores PLS; SEC: erro padrão da calibração (μm); SECV: erro padrão da validação cruzada (μm); *outlier*: número de amostras descartadas; RPD: relação de desempenho do desvio