



LUÍZA MENDONÇA BONFIM TAVARES

**ESTIMATIVA DE LIGNINA E EXTRATIVOS EM *Eucalyptus*
COMPARANDO EQUIPAMENTOS NIR PORTÁTEIS**

**LAVRAS-MG
2025**

LUÍZA MENDONÇA BONFIM TAVARES

**ESTIMATIVA DE LIGNINA E EXTRATIVOS EM *Eucalyptus* COMPARANDO
EQUIPAMENTOS NIR PORTÁTEIS**

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

Prof. Dr. Paulo Ricardo Gherardi Hein
Orientador

Prof. Dr. Fernando José Borges Gomes
Coorientador

**LAVRAS-MG
2025**

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

Tavares, Luiza.

Estimativa de lignina e extrativo em Eucalyptus comparando equipamentos NIR
portáteis / Luiza Tavares. - 2025.

49 p. : il.

Orientador: Paulo Hein Coorientador:
Fernando Gomes

Dissertação (Mestrado Acadêmico) - Universidade Federal de Lavras, 2025.
Bibliografia.

1. Radiação no NIR. 2. Química da madeira. 3. Qualidade da madeira. 4. Predição
molecular da madeira. I. Hein, Paulo. II. Gomes, Fernando. III. Universidade Federal de
Lavras. IV. Título.

LUÍZA MENDONÇA BONFIM TAVARES

**ESTIMATIVA DE LIGNINA E EXTRATIVOS EM *Eucalyptus* COMPARANDO
EQUIPAMENTOS NIR PORTÁTEIS**

**ESTIMATION OF LIGNIN AND EXTRACTIVES IN *Eucalyptus* COMPARING
PORTABLE NIR EQUIPMENT**

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

APROVADA em 18 de Julho de 2025.

Prof. Dr. Paulo Ricardo Gherardi Hein - UFLA

Prof. Dr. Fernando José Borges Gomes - UFRRJ

Prof. Dr. Adriano Reis Prazeres Mascarenhas - UNIR

Dra. Fernanda Maria Guedes Ramalho - KLABIN

Prof. Dr. Paulo Ricardo Gherardi Hein
Orientador

Prof. Dr. Fernando José Borges Gomes
Coorientador

**LAVRAS-MG
2025**

*A Deus, pela proteção, aos meus pais Miriam
e Fernando, por serem meus pilares e por
todo esforço a mim concedido, a meu irmão
Délcio por todo companheirismo*

DEDICO

AGRADECIMENTOS

Agradeço, primeiramente, a Deus por todas as bênçãos a mim concedidas, por me ajudar em momentos difíceis e por me acompanhar em todo o meu trajeto até o momento.

Agradeço aos meus pais, Míriam e Fernando, por todo amor, incentivo e ajuda em todos os momentos de minha vida, agradeço por sempre acreditarem em mim e sempre me darem forças para enfrentar momentos difíceis. Levo vocês como meus exemplos de vida.

Agradeço a meu irmão, Délcio, por ser meu parceiro em todos os momentos, por me divertir e alegrar sempre, por todas as ligações durante o período de estudo, assim como mamãe e papai levo você como um exemplo para minha vida.

Agradeço a todos da minha família que também me ajudaram nos momentos em que precisei que colaboraram para minha formação de alguma forma. Agradeço, principalmente, a minhas avós, Maria Célia e Maria Teresinha.

Agradeço também ao meu namorado, João Pedro, e sua avó Maria Teresa, por me incentivarem, apoiarem e ajudarem em minha estadia em Lavras tornado todos os momentos mais fáceis e descontraídos.

Agradeço às minhas amigas da República Afrodite, aos demais que também contribuíram por todos os momentos de descontração, brincadeiras, e acolhimento que me proporcionaram.

Agradeço ao meu orientador Dr. Paulo Ricardo Gherardi Hein, por todo ensinamento que me proporcionou durante minha orientação e durante a realização de todas as pesquisas necessárias e por sempre me apoiar em propósitos futuros.

Agradeço à Me. Dayane Targino de Medeiros e Me. Thalles Loiola Dias por todo tempo, disponibilidade e atenção para o andamento e conclusão deste trabalho.

Agradeço a Universidade Federal de Lavras (UFLA), pela estrutura que foi concedida a mim, a todos os professores que encontrei em minha caminhada e que foram essenciais para o meu aprendizado, a todos os funcionários da universidade por dedicarem seus esforços para a manutenção da mesma e ao Laboratório de Ciência e Tecnologia da Madeira da Universidade Federal de Lavras (UFLA) pelo apoio ao trabalho experimental.

Agradeço ao Programa de Pós-graduação em Ciência e Tecnologia da Madeira (PPGCTM), a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior– Brasil (CAPES)– Código Financeiro 001, pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq: bolsa n. 406593/2021-3) e pela Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG, APQ-00742-23).

RESUMO

O controle da qualidade da madeira é indispensável, pois permite uma gestão mais eficiente dessa matéria prima ao longo do processo produtivo. A espectroscopia no infravermelho próximo (NIR) é uma técnica promissora para o monitoramento dessas propriedades, no entanto precisa ser mais estudada para avaliar a eficácia de suas estimativas. O objetivo deste estudo foi avaliar o desempenho de dois espectrômetros NIR portáteis (MicroNIR (Viavi Solutions Inc., CA, Estados Unidos)) considerando diferenças nas configurações dos equipamentos, na metodologia e dos operadores na estimativa dos teores de lignina e extrativos em madeira de *Eucalyptus*. As amostras utilizadas foram obtidas de clones de *Eucalyptus* de duas empresas. A análise de componentes principais (PCA) foi aplicada para analisar a dispersão dos espectros, a regressão por mínimos quadrados parciais (PLS-R) para construir modelos de predição, submetidos a quatro métodos de validação: (1) validação com dados externos à calibração do modelo; (2) calibração do modelo utilizando 70% dos dados e validação com 30% restantes; (3) calibração do modelo com o equipamento 1 e validação com o equipamento 2; e (4) calibração do modelo com o equipamento 2 e validação com o equipamento 1. Já o coeficiente de regressão foi aplicado para avaliar as bandas mais importantes para a construção dos modelos, os quais foram avaliados pelo maior coeficiente de determinação (R^2), menor raiz do erro quadrático médio (RMSE) e maior desvio preditivo residual (RPD). Para a predição do teor de lignina a validação do tipo 70%/30% no equipamento 1 apresentou melhor desempenho comparado aos demais ($R^2= 0,71$, $RMSE_p= 0,44$ e $RPD=1,76$), enquanto para predição do teor de extrativos, a validação com dados externos apresentou altos valores de R^2 e de $RMSE_p$, a validação 70%/30% apresentou baixos valores de $RMSE_p$ e de R^2 também no equipamento 1. A análise dos coeficientes de regressão permitiu analisar bandas que diferenciam os dois componentes, principalmente na região de 1.000 a 1.300 nm, caracterizando ligações da molécula de lignina. Dessa forma, o NIR, utilizando equipamento portátil, demonstra um bom potencial para predição dos componentes químicos da madeira.

Palavras-chave: Radiação no NIR; química da madeira; qualidade da madeira; predição molecular da madeira.

ABSTRACT

Wood quality control is essential, as it enables more efficient management of this raw material throughout the production process. Near-infrared (NIR) spectroscopy is a promising technique for monitoring these properties; however, further studies are needed to evaluate the accuracy of its estimations. The objective of this study was to evaluate the performance of portable NIR spectrometers (MicroNIR, Viavi Solutions Inc., CA United States), considering differences in equipment configurations, methodology and operators, in the estimation of lignin and extractive content in *Eucalyptus* wood. The samples were obtained from *Eucalyptus* clones supplied by two companies. Principal component analysis (PCA) was applied to evaluate spectral dispersion, partial least squares regression (PLS-R) was used to build predictive models, which were subjected to four validation methods: (1) validation with external data not used in the model calibration; (2) model calibration using 70% of the data and validations with the remaining 30%; (3) calibration using equipment 1 and validation with equipment 2; and (4) calibration using equipment 2 and validation with equipment 1. Regression coefficients were also analyzed to identify the most relevant spectral bands for model construction. The models were selected based on the highest coefficient of determination (R^2), lowest root mean square error (RMSE) and highest residual predictive deviations (RPD). For lignin content prediction, the 70%/30% validation using equipment 1 showed the best performance compared to the others methods ($R^2= 0,71$, $RMSEp= 0,44$, and $RPD=3,936$), in the case of extractive content, the external validation showed high R^2 and $RMSEp$ values, whereas the 70%/30% validation yielded both low $RMSEp$ and low R^2 values, also in equipment 1. Analysis of regression coefficients allowed the identification of bands that differentiate the two components, especially in the 1.000 a 1.300 nm region, corresponding to lignin molecular bands. Therefore, NIR using a portable device demonstrates good potential for predicting the chemical composition of wood.

Keywords: NIR radiation; wood chemistry; molecular prediction of wood; wood quality

INDICADORES DE IMPACTO

A adoção de novas tecnologias que otimizam tempo, custo de análise e principalmente controle na qualidade da madeira no setor florestal pode incentivar práticas mais sustentáveis e eficientes, como rapidez na triagem da madeira em campo agilizando a tomada de decisões. A espectroscopia no infravermelho próximo (NIR) surge como uma solução tecnológica promissora, permitindo a predição rápida e precisa de componentes químicos da madeira e aprimorando os métodos de determinação convencionais. A aplicação dessa técnica contribui para a redução do tempo de processamento das amostras, diminuição do uso de reagentes químicos nos métodos de determinação clássicos, além de possibilitar o rápido monitoramento da qualidade da madeira que entra na fábrica. Diante disso, outro avanço a ser considerado é a utilização de equipamentos portáteis, complementando os já consolidados equipamentos de bancada, porque amplia o acesso às tecnologias mais avançadas. O uso de espectrômetros portáteis permite a identificação dos componentes químicos da madeira de forma eficiente, principalmente na facilidade de aquisição espectral em campo, democratizando a tecnologia e permitindo operadores de regiões remotas e pequenas empresas tenham acesso a essa ferramenta, além de ser mais barato e de fácil manuseio, facilitando a capacitação em diferentes locais e inclusão de mais profissionais no setor. Ao explorar as especificações individuais dos equipamentos, suas influências e diferenças metodológicas a pesquisa preenche lacunas na aplicação dessa técnica e equipamento em madeira, inspirando novos estudos na área. Por fim, o estudo avança no uso de diferentes tipos de espectrômetros e suas diferentes especificações, facilitando a aplicação da técnica em campo com equipamentos portáteis a fim de controlar a qualidade da madeira que entra em fábrica para seu melhor aproveitamento. Esses avanços promovem a inovação tecnológica, a sustentabilidade e a eficiência no setor florestal, consolidando a importância da espectroscopia NIR como ferramenta para o futuro da indústria madeireira.

IMPACT INDICATORS

The adoption of new technologies that optimize time and cost analysis in the forestry sector can encourage more sustainable and efficient practices. Near-infrared spectroscopy (NIRs) emerges as a promising technological solution, enabling the rapid and accurate prediction of wood's chemical components and improving conventional determinations methods. The application of this technique contributes to reducing sample processing time, decreasing the use of chemical reagents in laboratory determination processes, and controlling the quality of wood entering the factory, which determines the quantity of reagents used during the cellulose pulping process, reinforcing its environmental and technological relevance. Furthermore, the use of portable equipment, complementing the already established benchtop devices, expands access to more advanced technologies. The practical application of NIR spectroscopy provides greater speed, reliability, reduced use of chemical reagents and mobility in the routine determination of wood's chemical components, benefiting both companies and the environment. The use of portable spectrometers allows for the efficient identification of wood's chemical components, reducing cost, time and chemical products in lab analyses. By exploring the individual specifications of the equipment and their influences, the research fills gaps in the application of this technique and equipment in wood analysis, inspiring new studies in the field. Finally, the study advances the use of different types of spectrometers and their various specifications, facilitating the application of the technique in the field with portable equipment. These advancements promote technological innovations, sustainability and efficiency in the forestry sector, solidifying the importance of NIR spectroscopy as a tool for the future of the timber industry.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	10
2	OBJETIVOS.....	11
3	REFERENCIAL TEÓRICO.....	11
3.1	A importância do eucalipto no Brasil.....	11
3.2	Composição química da madeira.....	12
3.3	Qualidade da madeira.....	15
3.4	Espectroscopia no infravermelho próximo (NIR).....	17
3.4.1	Princípios da técnica.....	17
3.4.2	Análises matemáticas e estatísticas dos espectros.....	18
3.4.3	Aplicação da técnica NIR na tecnologia da madeira.....	20
3.4.4	Aplicação do NIR portátil em madeira.....	22
4	MATERIAL E MÉTODOS.....	23
4.1	Obtenção das amostras.....	23
4.2	Preparação das amostras para caracterização química da madeira.....	24
4.3	Aquisição espectral no NIR.....	24
4.4	Análise multivariada dos dados.....	25
5	RESULTADOS.....	27
5.1	Distribuição dos teores de extrativo e lignina entre os lotes.....	27
5.2	Assinaturas espectrais no NIR.....	28
5.3	Análise dos componentes principais.....	30
5.4	Análise de regressão dos mínimos quadrados parciais.....	33
5.5	Análise dos coeficientes de regressão.....	40
6	CONCLUSÃO.....	43
	REFERÊNCIAS.....	45

1. INTRODUÇÃO

O Brasil vem se destacando mundialmente no cultivo de plantios florestais, principalmente do gênero *Eucalyptus* (eucalipto), onde foram plantados cerca de 7,8 milhões de hectares no ano de 2024, exaltando sua importância na economia florestal brasileira. Mais de 50% dessa área são destinados aos setores de celulose, painéis, pisos laminados, carvão e madeira serrada, os outros 50% pertencem a investidores e produtores independentes (IBÁ, 2024).

A madeira é um material heterogêneo formada por polímeros estruturais como a celulose, hemiceluloses e lignina, além de componentes orgânicos e inorgânicos não estruturais como extrativos e minerais, que são distribuídos de forma desigual devido a sua estrutura anatômica (MANCINI et al., 2021). No que se refere às indústrias de celulose, são desejados altos teores de celulose e hemiceluloses e baixos teores de lignina e extrativos (VIEIRA et al., 2021). Visto que, a lignina e os extrativos são fatores determinantes para a dosagem dos reagentes e solventes, o que afetam a qualidade e a quantidade da polpa e a recuperação da lignina no licor preto (ZHANG et al., 2022; SIMÕES et al., 2022).

Portanto a análise pontual dessas características da matéria-prima é uma atividade usual nas indústrias, para que haja a padronização da qualidade dos produtos. Entretanto, os métodos de caracterização realizados em laboratórios, são normalmente caros, demorados e aplicáveis a um número restrito de amostras, além de serem procedimentos destrutivos (BALDIN et al., 2020). Sendo assim, a técnica NIR surge como alternativa a esses métodos convencionais. Baseada na espectroscopia vibracional ela expõe as amostras à radiação eletromagnética a um comprimento de onda variando de 950 a 2.500 nm, resultando em espectros de absorvância (MUÑIZ et al., 2012).

Estudos como de Pimenta et al. (2024), que desenvolveram modelos de regressão para estimar a densidade básica e o teor de extrativos e lignina em eucalipto em equipamento de bancada, obtiveram resultados robustos (R^2 de 0,81 para lignina e 0,75 para extrativos). Simões et al. (2022) também demonstraram eficácia em modelos baseados em NIR desenvolvidos para madeiras australianas, para prever valores de extrativos em *Eucalyptus globulus* argentinos, com R^2 variando de 0,95 a 0,97 também em equipamento de bancada. Porém estudos utilizando equipamento portátil ainda são poucos, Zhang et al. (2022) avaliaram 4 equipamentos portáteis e a transferência de modelos entre eles para predição de

lignina em cinco espécies de madeira. Os autores apontam que os resultados foram eficazes para otimização do custo e pela precisão, além da transferência reduzir tempo e recursos.

Dessa forma, considerando a necessidade da predição da lignina e dos extrativos atrelada dificuldade de sua predição, devido sua complexidade e variabilidade estrutural, a demora das análises convencionais que ficam retidas em laboratório e pela alta variabilidade da madeira que chega nas fábricas, estudos que caracterizam a composição química da madeira de forma rápida e precisa, utilizando novas tecnologias que facilitem o processo e que são capazes de minimizar a variabilidade entre as madeiras na entrada das fábricas, são de suma importância para o melhor uso da matéria-prima e otimização da cadeia produtiva.

2. OBJETIVOS

- Desenvolver modelos para estimar o teor de extrativos e lignina da madeira de *Eucalyptus* baseado na assinatura espectral no infravermelho próximo a partir de equipamentos portáteis.
- Comparar o desempenho preditivo de modelos para estimativa do teor de extrativos e lignina da madeira a partir de equipamentos NIR portáteis em lotes independentes e externos, considerando as diferenças dos equipamentos, metodologias e variações introduzidas pela coleta dos espectros por diferentes operadores.

3. REFERENCIAL TEÓRICO

3.1. A importância do eucalipto no Brasil

Pertencente à família Myrtaceae, o eucalipto é nativo da Austrália, Tasmânia e algumas ilhas da Oceania, compreendendo mais de 700 espécies reconhecidas botanicamente. Ademais, devido à ampla diversidade de suas propriedades químicas e físicas, o eucalipto é extensamente utilizado para as mais diversas finalidades como a produção de celulose e papel, carvão vegetal, movelaria, energia, medicamentos, lenha, moirões entre outros (EMBRAPA, 2019; MIRANDA et al., 2022).

A introdução dessa espécie no Brasil, para fins técnicos e científicos ocorreu por Edmundo Navarro de Andrade (1881-1941), nas cidades de Jundiaí e Rio Claro no estado de São Paulo, com o intuito de reflorestar áreas desmatadas na construção das ferrovias a fim de suprir as necessidades de lenha, postes e dormentes da Companhia Paulista de Estradas de

Ferro. Na sequência, entre os anos de 1905 a 1915, Navarro arquitetou uma série de testes envolvendo 144 espécies do gênero trazidas da Austrália, a fim de testar sua aclimação. Com o sucesso da escolha, diversos estudos foram iniciados com o objetivo de ampliar suas aplicações e compreender melhor o comportamento do eucalipto em solo brasileiro (OLIVEIRA et al., 2021; MIRANDA et al., 2022).

Em virtude desse sucesso, no ano de 2023 foram plantados 7,8 milhões de hectares de eucalipto no Brasil, representando 76% da área total de florestas plantadas. Esse cultivo apresentou um crescimento de 41% na última década, destacando-se ainda pela expressiva produtividade florestal com um IMA médio de 33,7 m³/ha/ano (IBÁ, 2024), o que evidencia a relevância e o impacto significativo do eucalipto na economia brasileira.

A cadeia produtiva do eucalipto é amplamente representada pela produção de polpa celulósica, que alcançou a expressiva marca de 24,3 milhões de toneladas no ano de 2023 (IBÁ, 2024). Dos quais, 21,3 milhões de toneladas referem-se a fibra curta, 2,5 milhões de toneladas a fibra longa e 0,5 milhão de toneladas a pasta de alto rendimento. Além disso, o Brasil segue como o líder na exportação de celulose e o segundo maior produtor mundial (IBÁ, 2024). Em seguida, figura a produção de papel, em que o país ocupa a 10 posição, com 10,8 milhões de toneladas, além de outros produtos também de base florestal como painéis de madeira, pisos laminados e madeira serrada, cujas produções atingiram 7,1 milhões de m³, 10,4 milhões de m² e 9,6 milhões de m³, respectivamente. A produção de carvão vegetal também se destaca, com 6,7 milhões de toneladas registradas no mesmo ano. Além disso, a produção de pellets vem ganhando espaço na última década, com a produção de 0,7 milhão de toneladas em 2023 (IBÁ, 2024).

Diante disso, é indiscutível a relevância histórica do eucalipto no Brasil e seu papel em consolidar o país como referência mundial na produção de florestas plantadas. Desse modo, as pesquisas sobre a produção e aplicação da madeira de eucalipto são de suma importância para ampliar a possibilidade de uso, desenvolver métodos mais eficientes no aproveitamento dessa matéria-prima e para otimizar toda a cadeia produtiva associada.

3.2. Composição química da madeira

A madeira é um material heterogêneo caracterizado por uma composição química complexa, cujas propriedades são influenciadas por diversos fatores. Entre esses, destacam-se a idade, material genético, procedência, condições ambientais, tratamentos silviculturais, local de plantio entre outros aspectos (MANCINI et al., 2021; VIDAURRE et al., 2022). A mescla

das diferentes combinações de composição química, decorrentes dos fatores mencionados, são responsáveis por variações observadas entre espécies, árvores e até no mesmo indivíduo. Decorrente disso, essas características exercem influência significativa nas propriedades de uso e na qualidade do produto (MANCINI et al., 2021).

A estrutura complexa da madeira é descrita por um sistema de polímeros estruturais de alto peso molecular, compreendendo a celulose, hemiceluloses e lignina. E de componentes orgânicos e inorgânicos não estruturais e de baixo peso molecular, os extrativos (MANCINI et al., 2021; BARBOSA et al., 2021). A celulose, encontrada na parede celular, é um polissacarídeo linear de carboidrato formado por unidades de glicose unidas por ligações glicosídicas $\beta(1\rightarrow4)$ e ligações de hidrogênio que ocorrem de forma intramolecular e intermolecular, resultando em uma estrutura de longa cadeia. Apresenta uma estrutura composta por regiões cristalinas (cadeias ordenadas) e amorfas (cadeias desordenadas), que interagem entre si causando rigidez ou módulo de elasticidade, sendo esse por volta de 120-140 GPa. É um dos responsáveis pela resistência mecânica e sustentação da árvore, além de possuir alta resistência à tração e compressão, devido a presença das ligações cruzadas nos cristais de celulose (SOUZA et al., 2015; NISA et al., 2022). Ademais, embora seja insolúvel em água, as celulosas podem se degradar em solução ácida, sendo sua solubilidade intensificada com a concentração de ácido e a temperatura (SHAH et al., 2022; RAO et al., 2023).

Já as hemiceluloses são formadas por polissacarídeos heterogêneos, cujas rotas de biossíntese diferem da celulose. Sua estrutura é formada principalmente por açúcares como glucanas, xilanas, galactanas, arabinanas e mananas, sendo a maioria conectadas por ligação $\beta(1\rightarrow4)$, similar à celulose. No entanto, ao contrário da celulose, as hemiceluloses possuem apenas estrutura com regiões amorfas, sem a presença de regiões cristalinas. Apesar disso, as hemiceluloses também se organizam para formar microfibrilas, ligando-se tanto à celulose quanto à lignina, contribuindo para a resistência mecânica e rigidez da célula. Em contraste à celulose, o tipo específico de hemiceluloses varia conforme a espécie, a localização da célula e desenvolvimento dele. Semelhante à celulose, apesar das hemiceluloses serem insolúveis em água, elas podem se degradar em solução ácida, sendo sua solubilidade intensificada com a concentração de ácido e a temperatura. Outro ponto, é sua capacidade de possuir diferentes tamanhos e formas, com baixa polimerização (SHAH et al., 2022; RAO et al., 2023).

Os extrativos, também conhecidos como metabólitos secundários, em geral, representam uma pequena fração da árvore e não integram de forma estrutural a parede

celular. São compostos hidrofóbicos ou lipofílicos e não exercem influência significativa no crescimento da árvore ((BARBOSA et al., 2021; VIDAURRE et al., 2022). Pois são biossintetizados com a finalidade de prevenir injúrias ou como uma resposta defensiva a estresses causados por fungos, insetos, chuva, luz, vento entre outros, além de influenciarem na durabilidade, densidade básica, propriedades energéticas, cor, odor e permeabilidade da madeira (BARBOSA et al., 2021; VIDAURRE et al., 2022). Os principais compostos químicos englobam alcalóides, flavonas, flavonóides, fenóis, terpenos, taninos e quinonas (BRODA et al., 2020). A distribuição desses compostos na árvore varia, sendo que no cerne, a presença dos principais compostos químicos se destaca, enquanto no albúrnio, é comum a presença de açúcares, reservas alimentares e constituintes da seiva (MANCINI et al., 2021). Além disso, observa-se que árvores mais jovens apresentam menores teores de extrativos, o que pode ser atribuído às mudanças fisiológicas ocorridas durante a formação do cerne (VIDAURRE et al., 2022). Embora representem uma pequena porcentagem na composição da árvore, os extrativos afetam negativamente tanto na produção de celulose (MANCINI et al., 2021), pois dificultam a penetração dos reagentes durante o processo, reduzindo o rendimento da polpação, aumentando o consumo de reagentes de polpação e branqueamento, como também carga de efluentes além de causarem a formação de depósitos de “pitch” (VIEIRA et al., 2021; SANTOS et al., 2024b). No entanto, esses compostos possuem ampla aplicação na indústria farmacêutica, cosmética, de corantes, biopesticidas, inseticidas e fungicidas (BRODA et al., 2020).

A lignina se difere da celulose e das hemiceluloses por ser constituída de unidades de polímeros aromáticos fenil-propano heterogêneos, com ênfase para três componentes principais: guaiacil propanol (G), siringil propanol (S) e hidroxifenil propanol (H), ligados principalmente por ligações éter (C-O-C) e ligações C-C. Embora a estrutura química dos componentes seja semelhante, as diferenças entre eles estão relacionadas ao grau de substituição dos grupos funcionais metoxi nos anéis aromáticos (SHAH et al., 2022, SETHUPATHY et al., 2022), com isso as ligações aleatórias entre essas três unidades, são responsáveis pela forma tridimensional e amorfa da lignina (DEUS et al., 2022). Além disso, a concentração de lignina varia com alguns fatores, como o tamanho do indivíduo, fatores genéticos, características do meio, idade, silvicultura entre outros. Algumas propriedades da madeira dependem da presença de lignina, como por exemplo a densidade e a umidade. Ademais, como a celulose e as hemiceluloses, a lignina desempenha um papel relevante no suporte mecânico das árvores, além de atuar na defesa contra patógenos e conferir hidrofobicidade às paredes celulares (VIDAURRE et al., 2022). Isso porque a lignina tem a

capacidade de conectar a celulose e as hemiceluloses fortemente em sua estrutura, funcionando como um agente adesivo que sela qualquer espaço vazio na biomassa (SHAH et al., 2022). Entretanto, em razão dessa interligação entre os componentes, a lignina dificulta o processo de degradação e separação entre eles, o que é indispensável para que a celulose fique mais pura e processável, sendo então indispensável a sua separação do restante, utilizando-se técnicas como Kraft, sulfito, soda e organosolv. Por não ser a matéria prima principal da celulose, a lignina é considerada um subproduto, é bastante utilizada para geração de eletricidade e pequenas porções em produtos de valor agregado (SETHUPATHY et al., 2022).

3.3. Qualidade da madeira

A variabilidade da madeira entre diferentes espécies/genótipos desempenha um papel importante no processo de polpação. Sendo um material biológico e heterogêneo, suas características químicas estão sujeitas a variações entre a madeira juvenil e adulta, embora tendam a se estabilizar ao atingir a fase adulta. Os teores de hemicelulose aumentam à medida que a árvore envelhece, enquanto a taxa de celulose e minerais tendem a diminuir. Dessa forma, tanto o material genético quanto a idade impactam a composição química da madeira e, conseqüentemente, o processo de polpação, ponto importante para indústrias do setor de celulose. Um fator de destaque é o momento ideal para o corte de árvores de rápido crescimento e ciclos curtos, como o eucalipto, muito utilizado no Brasil. A determinação desse momento é essencial para permitir cortes mais precoces, visando, principalmente, a produção de celulose (SANTOS et al., 2024a).

Para produção de polpa celulósica altos teores de celulose indicam alto rendimento no processo, enquanto maiores teores de lignina e extrativos resultam em menor rendimento. Esses componentes afetam negativamente a polpação, pois dificultam a penetração dos reagentes durante o processo, afetando diretamente o consumo de reagentes químicos no digestor durante a polpação, o rendimento final do produto, o teor de sólidos no licor preto, a qualidade da polpa não branqueada além de formarem depósitos de “pitch” (SANTOS et al., 2024b; RAMOS et al., 2024).

Quanto aos extrativos, não são desejáveis já que são constituintes que não fazem parte da composição estrutural da madeira e não são convertidos em polpa celulósica. A presença desse componentes, assim como da lignina, demandam maiores quantidades de álcalis para sua remoção, dificultando sua penetração, reduzindo o rendimento da polpa, aumentando os

custos com o branqueamento, se depositando nos equipamentos formando *pitch* além de reduzir a qualidade da polpa (MUNIZ et al., 2023; SANTOS et al., 2024a; FERNANDES et al., 2025). Madeiras com teores próximos a 2-3% são as consideradas de melhor qualidade, enquanto as que compreendem de 5-8%, de menor qualidade, já que quanto maior o teor de extrativos na madeira, mais chances de extrativos na polpa não branqueada. Além disso, a presença dos extrativos podem influenciar na queda da viscosidade da polpa, pois quanto mais álcali usado para sua retirada, maior será a degradação dos carboidratos da madeira causando queda de viscosidade da polpa (RAMOS et al., 2024). Portanto, como a natureza dos extrativos podem influenciar diretamente o processo de polpação a sua quantificação é de grande relevância (SANTOS et al., 2024a).

Elevados teores de lignina na madeira podem influenciar significativamente o processo de polpação, pois demandam maior quantidade de reagentes, reduzindo as projeções de rendimento e afetando a qualidade do produto (FERNANDES et al., 2025). O teor reduzido desse componente é desejável, uma vez que a lignina contém alta concentração de grupos cromóforos (SANTOS et al., 2024a), estruturas responsáveis por absorver luz na região do visível conferindo cor à polpa celulósica (ZHANG et al., 2021). A remoção desses grupos é essencial para aumentar a alvura da polpa, no entanto, esse processo representa uma grande parte dos custos de produção, pois eleva o consumo de reagentes químicos, de água e, conseqüentemente, de efluentes. No processo Kraft, amplamente utilizado no Brasil, uma maior relação siringil/guaiacil é vantajosa, uma vez que a estrutura siringil favorece a deslignificação nesse tipo de cozimento (SANTOS et al., 2024a). Além disso, madeiras com baixos teores necessitam de menor quantidade de álcali ativo para deslignificação comparada àquelas com altos teores, para atingirem um mesmo número kappa em polpas não branqueadas. Por fim, a viscosidade das polpas não branqueadas pode indicar o nível de degradação sofrido pelas fibras durante o processo de polpação. Polpas de eucalipto com maior teor de lignina e hemicelulose necessitam de mais álcali para sua retirada, baixando a viscosidade da polpa, o que não é desejado. (RAMOS et al., 2024).

Já os minerais também são indesejáveis no processo de polpação, pois assim como os extrativos são capazes de causar incrustações e corrosão dos equipamentos de recuperação do licor negro residual (FERNANDES et al., 2025). Por fim, as hemiceluloses também apresentam papel negativo durante a polpação, principalmente na pré-hidrólise, momento da remoção desse constituinte. As pentosanas agem negativamente na viscosidade, filtrabilidade, reatividade, estabilidade térmica, cor e turbidez dos produtos derivados. As xilanas, principais hemiceluloses do eucalipto, contribuem para o maior consumo de álcali durante o

processo Kraft, além de formarem ácidos hexenurônicos, indesejáveis no branqueamento da celulose (SANTOS et al., 2024a). Além disso, as hemiceluloses também afetam na redução da viscosidade da polpa não branqueada, pois quanto maior sua presença e de carboidratos de baixo peso molecular, maior é necessário o uso de reagentes no cozimento ou nas condições mais severas do cozimento, degradando ainda mais as cadeias de celulose (RAMOS et al., 2024).

3.4. Espectroscopia no infravermelho próximo (NIR)

3.4.1. Princípios da técnica

Frederick William Herschel, astrônomo e músico inglês, marcou seu lugar na ciência com a descoberta da região do infravermelho próximo em 1800. Contudo, foi nas décadas de 1980 e 1990, com os trabalhos de Karl Norris voltado para determinação de umidade em produtos agrícolas, que a técnica NIR obteve sucesso. Além disso, os avanços tecnológicos no desenvolvimento de microcomputadores, na instrumentação necessária e o nascimento da quimiometria contribuíram para o progresso dessa técnica (PASQUINI et al., 2003; MUÑIZ et al., 2012).

A espectroscopia no infravermelho próximo (NIR), é uma técnica fundamentada na espectroscopia vibracional, na qual as amostras são expostas à radiação eletromagnética na faixa de comprimento de 750 a 2.500 nm (MUÑIZ et al., 2012). Com o objetivo de analisar a intensidade de absorção da radiação eletromagnética capaz de reagir com as ligações orgânicas que constituem a amostra, e com isso obter espectros de absorbância, eles serão correlacionados com valores de referência obtidos em laboratório, permitindo a construção de modelos estatísticos de predição (MUÑIZ et al., 2012; MEDEIROS et al., 2024). Dessa forma é possível obter informações qualitativas e quantitativas dos constituintes químicos dos materiais biológicos (MUÑIZ et al., 2012).

Para que essa técnica seja possível, é necessário que as moléculas sejam excitadas, atingindo um estado de maior energia (PAIVA et al., 2015). Isso ocorre porque, à temperatura ambiente, as moléculas se encontram em seus níveis normais de vibração, movendo-se devido à força das ligações e à massa dos átomos que a compõem. Além disso, a amplitude das vibrações é de apenas alguns nanômetros e só aumentará se alguma energia for transferida para a molécula (PASQUINI et al., 2003). Nesse sentido a radiação no infravermelho é capaz de alterar a energia da molécula em uma faixa de aproximadamente 8 a 40 kJ/mol, correspondendo a faixa que engloba as frequências vibracionais de estiramento e

dobramento das ligações de grande parte das moléculas. Durante esse processo, as frequências absorvidas são equivalentes às frequências vibracionais naturais da própria molécula, visando aumentar a amplitude dos movimentos vibracionais das ligações, permitindo então, a coleta dos espectros pelo espectrofotômetro (PAIVA et al., 2015).

Uma vez que cada tipo de ligação possui sua própria frequência natural de vibração, duas moléculas de estruturas diferentes nunca serão idênticas (PAIVA et al., 2015). Esse princípio agrega valor à técnica, pois os espectros permitem a identificação precisa de cada componente do material, refletindo com exatidão sua composição. Além disso, o NIR é capaz de fornecer informações estruturais das moléculas, uma vez que a interação ocorre principalmente com ligações C - C, C=C, C - N, C - O, C=O, O - H, N - H, C - H. Nessas ligações, a absorção da energia ocorre em regiões específicas do infravermelho, permitindo uma análise detalhada das estruturas moleculares da amostra (PAIVA et al., 2015). Dessa forma, a caracterização de uma amostra desconhecida torna-se viável, desde que seu espectro tenha sido obtido e um modelo de predição de suas propriedades tenha sido desenvolvido (MUÑIZ et al., 2012).

3.4.2. Análises matemáticas e estatísticas dos espectros

A designação de quimiometria foi utilizada pela primeira vez em 1971 pelo químico orgânico Svante Wold, sendo definida como um conjunto de métodos apropriados para a obtenção de informações significativas, sob o ponto de vista químico, a partir de um conjunto de dados (FERREIRA et al., 2015). Ou seja, trata-se de uma técnica capaz de aplicar ferramentas estatísticas, matemáticas e tecnológicas para o tratamento, interpretação e previsão de dados químicos em amostras complexas (FERREIRA et al., 2015; GOMES et al., 2024). Além disso, a tecnologia NIR em conjunto com a quimiometria são capazes de correlacionar os espectros à modelos de regressão, com o objetivo de extrair informações qualitativas e quantitativas das amostras, viabilizando a otimização do processo (TSUCHIKAWA et al., 2015; GOMES et al., 2024).

A análise multivariada estabelece um conjunto de técnicas estatísticas capaz de analisar múltiplas variáveis simultaneamente, com o objetivo de avaliar os dados de forma a identificar as informações relevantes e suas correlações (MUÑIZ et al., 2012). Unido a técnica NIR, a estatística multivariada é capaz de analisar os espectros de maneira simultânea em vários comprimentos de onda, proporcionando maior confiabilidade e reduzindo o tempo de análise (MARTINS et al., 2023). Arelado à estatística multivariada, os métodos

qualitativos - métodos utilizados para identificar e comparar similaridades entre dados - a Análise de Componentes Principais (PCA) e a Análise de Mínimos Quadrados Parciais (PLS), além da calibração e validação dos modelos, são mecanismos de suporte à espectroscopia no NIR (MARTINS et al., 2023).

Portanto a PCA é um método habitualmente utilizado na análise de informações. Seu uso possui o objetivo de compreender o conjunto de dados, analisando a presença ou ausência de agrupamentos naturais entre eles. Quando aplicada em espectros no infravermelho, todo o conjunto original de dados é substituído por um novo conjunto de variáveis, denominadas de Componentes Principais (CPs) (MARTINS et al., 2023). Isto permite reduzir a dimensão do conjunto de dados sem perda de informações, preservando a correlação entre os dados e concentrando a maior parte da variação em poucas variáveis, possibilitando visualizar e interpretar as diferenças entre as variáveis, além de examinar suas relações (MUÑIZ et al., 2012). Ademais, a PCA é capaz de detectar amostras com comportamentos distintos ou similares a partir da projeção gráfica do conjunto de dados, mesmo com o elevado número de amostras e variáveis, além da possibilidade de verificar os parâmetros responsáveis pela formação dos grupos (FERREIRA et al., 2015; MARTINS et al., 2023).

A regressão baseada em PLS (Partial Least Square) é um método de calibração multivariada que se destaca por sua capacidade de lidar com problemas complexos, envolvendo variáveis independentes (X), como dados espectrais, e variáveis dependentes (Y), que representam dados de referência. Seu principal objetivo é estabelecer uma relação entre essas variáveis, permitindo prever as variáveis dependentes a partir das variáveis independentes, com o auxílio de novas variáveis geradas por meio da correlação entre ambas, denominadas variáveis latentes (VL) (MARTINS et al., 2023). Esta técnica é especialmente eficaz na resolução de problemas de colinearidade, apresentando uma excelente capacidade de previsão. Por essas características, é amplamente aplicada a dados espectrais, pois consegue condensar as informações das variáveis, gerando modelos simples e de fácil interpretação, além de eliminar os ruídos na forma de resíduo. Adicionalmente, a PLS é um método robusto, pois permite a inclusão ou exclusão de novas amostras no modelo de calibração sem comprometer sua integridade (MUÑIZ et al., 2012). No contexto florestal, essa abordagem é de grande relevância, uma vez que as propriedades de interesse estão em constante variação devido às influências bióticas e abióticas.

Durante o processo de calibração, os espectros são utilizados na construção do modelo matemático, que ajusta os dados espectrais de maneira a correlacioná-los adequadamente aos valores de referência da propriedade em questão. A validação cruzada é

aplicada para realizar a validação interna do erro de previsão nas amostras que fazem parte do conjunto de calibração. Em seguida, a validação externa é utilizada para avaliar a capacidade preditiva do modelo final, por meio de amostras externas àquelas usadas na construção do modelo. Essa fase é de grande relevância, pois os resultados obtidos permitem verificar a qualidade do modelo na previsão da propriedade desejada em futuras aplicações (MUÑIZ et al., 2012).

3.4.3. Aplicação da técnica NIR na tecnologia da madeira

Por se tratar de uma técnica rápida, não destrutiva, com baixos requisitos operacionais e largamente utilizada no setor industrial (ZHANG et al., 2022), a espectroscopia NIR tem ganhado espaço no setor florestal, especialmente na predição de propriedades da madeira. Quando comparada aos métodos de análises tradicionais o NIR oferece inúmeras vantagens, tais como baixo custo, alta velocidade, facilidade na avaliação e precisão dos espectros. Além disso, é capaz de avaliar inúmeras propriedades de maneira simultânea com uma análise (HODGE et al., 2018), proporcionando resultados mais rápidos e eficientes.

Baldin et al. (2020a) investigaram a qualidade da madeira de *Eucalyptus benthamii*, com o objetivo de avaliar os teores de lignina Klason, lignina total, holoceluloses e densidade básica, visando a produção de celulose com apoio da técnica NIR. Os resultados obtidos na calibração mostraram coeficiente de determinação (R^2c) de 0,82 para lignina Klason, 0,74 para lignina total, 0,82 para holoceluloses e 0,73 para densidade básica. Além disso, os erros quadráticos médios da validação cruzada (RMSECV) foram de 0,64% para lignina Klason, 0,74% para lignina total, 0,76% para holoceluloses e 16 kg/m³ para densidade básica.

Hwang et al. (2021) estudaram a predição de características de carbonização de hidrocarbões derivados de lignina kraft em processo de carbonização hidrotérmica, através da elaboração de modelos com a técnica NIR. Espectros NIR foram coletados de amostras de hidrocarbões, sendo analisadas quanto a composição de carbono (%) e a relação entre oxigênio/carbono e hidrogênio/carbono, em diferentes temperaturas. A técnica foi capaz de detectar diferenças significativas entre amostras de ligninas e de hidrocarbões, a análise de componentes principais (PCA) foi capaz de separar claramente as amostras nas diferentes condições da carbonização hidrotérmica. Além disso, a regressão de mínimos quadrados parciais (PLSR) apresentou valores de coeficientes de determinação (R^2p) na predição superiores a 0,96 para a composição de carbono, oxigênio/carbono e hidrogênio/carbono.

Park et al. (2021) estudaram a composição química e a classificação de madeiras de Douglas fir (*Pseudotsuga menziesii*), Pinus (*Pinus radiata*) e Sugi (*Cryptomeria japonica*) utilizando a técnica NIR. A Análise de Componentes Principais (PCA) revelou grandes diferenças nos teores de lignina e extrativos entre as três espécies. Além disso, para a classificação das madeiras, foram adicionadas mais cinco espécies florestais macias coreanas, totalizando oito espécies. A técnica foi capaz de agrupá-las em três grupos distintos com base na similaridade química entre elas, além de fornecer uma classificação individualizada para cada espécie.

Luan et al (2022) estudaram a aplicabilidade da técnica NIR na predição do teor de α e β -pineno na resina de *Pinus elliottii*. Os espectros foram divididos em duas categorias, espectros completos (400 nm - 2.500 nm) e espectros característicos (selecionados por SMC). Os resultados do modelo para α -pineno na calibração e predição para os espectros completos, apresentam coeficientes de determinação (R^2) de 0,89 e 0,81, respectivamente, de 0,74 e 0,98, respectivamente. Para os espectros característicos, os coeficientes de determinação (R^2) foram de 0,89 e 0,82, e os valores de RMSE foram de 0,72 e 0,95, respectivamente. Quanto ao modelo para β -pineno, os resultados de calibração e predição para os espectros completos apresentaram coeficientes de determinação (R^2) de 0,93 e 0,83, respectivamente, e erros quadráticos médios (RMSE) de 0,54 e 0,83, respectivamente. Para os espectros característicos, os coeficientes de determinação (R^2) foram de 0,94 e 0,84, e os valores de RMSE foram de 0,48 e 0,84 respectivamente.

Fujimoto (2022) estudou as mudanças nas propriedades da madeira em relação aos anos decorridos desde a formação da madeira. Através da coleta de espectros NIR em diversas posições de *Chamaecyparis obtusa*, foi possível analisar a variação nos espectros em relação aos anos decorridos. Com base nessa correlação, o autor conseguiu identificar uma diminuição progressiva nos teores de hemiceluloses ao longo dos anos, podendo ser explicada pela diminuição gradual da absorção em bandas específicos relacionados à hemicelulose. Outro ponto é que a análise dos autovetores extraídos da matriz espectral NIR, apresentou distribuição mais ordenada com o passar dos anos, sugerindo que o xilema do cerne da árvore se organizou de forma mais estruturada ao longo do tempo, além de que árvores mais velhas apresentam maior valor de entropia, caracterizando e confirmando um sistema físico mais organizado.

3.4.4. Aplicação do NIR portátil em madeira

O avanço tecnológico é incontestável e inegável em todas as suas aplicações, e no meio florestal não poderia ser diferente. O desenvolvimento da tecnologia NIR possibilitou a criação de novos dispositivos que tornam a rotina nas empresas mais eficiente e economicamente viável. Equipamentos que, anteriormente, eram robustos, pesados e destinados exclusivamente ao uso em laboratórios, agora são compactos, leves e portáteis, visando facilitar a aplicação da técnica tanto em campo quanto em qualquer ambiente fora do laboratório.

Sandak et al. (2021) investigaram a eficácia de um sensor NIR portátil na determinação de diversas qualidades da madeira, relevantes na produção de madeira laminada colada. O reconhecimento das placas de madeira foi utilizado para rastrear o material ao longo do processo de produção, empregando a análise discriminante de mínimos quadrados parciais (PLS-DA), com resultados satisfatórios, evidenciados por taxas de sucesso de 89%. Além disso, foram desenvolvidos modelos de regressão de mínimos quadrados (PLS) com o objetivo de prever diversas propriedades da madeira, com os coeficientes de determinação (R^2) de 0,48 para a densidade, 0,30 para as propriedades mecânicas, 0,44 para a rugosidade da madeira, 0,82 para a umidade e 0,82 para a delaminação total, todos na validação.

Liu et al. (2023) utilizaram um equipamento NIR portátil para desenvolver modelos preditivos de dureza para amostras de madeira arqueológica alagada. Diversos modelos e faixas espectrais foram testadas, sendo que a faixa de 1.000 a 2.100 nm apresentou os melhores resultados, com coeficientes de determinação (R^2) de 0,89 para o teste de predição. Além disso, dados referentes à dureza das amostras corresponderam aos espectros NIR, possibilitando a inclusão dessa propriedade.

Zhang et al. (2022) testaram a transferência de calibração entre quatro equipamentos NIR portáteis a fim de prever o teor de lignina em diferentes espécies. Os resultados dos modelos foram satisfatórios, três dentre os quatro equipamentos obtiveram resultados de R_p entre 0,97 a 0,99, somente um equipamento obteve resultado de 0,72. Quanto aos valores da raiz do erro quadrático médio de previsão (RMSEp), foram muito distintos entre si. Alguns equipamentos obtiveram RMSEp alto de 9,21 e 5,86. Outro de 2,77 e um equipamento obteve um baixo valor de 0,84.

Gomes et al. (2024a) utilizaram um espectrômetro portátil e estimaram as propriedades energéticas de *Handroanthus roseoalba*, *Handroanthus heptaphyllus* e *Piptocarpha rotundifolia*. Os resultados da análise de componentes principais (PCA) foram

eficazes na captura das variações entre as três espécies. Além disso, a regressão de mínimos quadrados parciais (PLS-R) apresentou coeficientes de determinação (R^2) satisfatórios na validação cruzada para todas as propriedades analisadas, alcançando valores de 0,87 para materiais voláteis, 0,86 tanto para carbono fixo quanto para poder calorífico do carvão.

Medeiros et al. (2024) testaram a aplicabilidade do NIR portátil na estimativa da densidade básica em cavacos de *Eucalyptus grandis*, considerando diferentes níveis de umidade e planos anatômicos da madeira (longitudinal radial e longitudinal tangencial). A PCA, não revelou diferenças significativas entre os planos anatômicos da madeira, o que foi corroborado por estudos anteriores. Contudo, na regressão de mínimos quadrados parciais (PLS-R), o coeficiente de determinação (R^2) apresentou valores promissores, alcançando 0,81 para a face radial.

Poucos estudos se dedicaram a avaliar a performance de modelos multivariados baseados em espectros no NIR para estimativa da composição química da madeira.

4. MATERIAL E MÉTODOS

4.1. Obtenção das amostras

O presente estudo foi realizado utilizando-se cavacos de madeira oriundos de clones comerciais do gênero *Eucalyptus* spp., provenientes de plantios de empresas nacionais do Setor de Celulose e Papel de diferentes regiões do Brasil. Duas amostragens foram realizadas:

Lote 1) Lote de calibração e validação, proveniente da empresa 1: O material utilizado foi obtido a partir de amostras de clones de *Eucalyptus* spp. coletadas de 100 talhões. Cada material genético amostrado foi representado por 3 árvores em cada talhão. A madeira das árvores selecionadas (300 árvores representando 100 clones), foi processada em cavacos e depois transformada em serragem, resultando em 100 amostras.

Lote 2) Lote de validação, proveniente da empresa 2: O material utilizado foi obtido de amostras de clones de híbridos de *E. urophylla* x *E. grandis* provenientes do plantio experimental de uma empresa de celulose em Itamarandiba - MG, Brasil (17°51'S, 42°51'W; altitude: 910 m), com precipitação média anual de 1000mm e solo classificado como Latossolo Amarelo (IBGE 2019). Quatro clones (A, B, C, D) foram plantados em quatro arranjos de espaçamento (3x1, 3x2, 3x3 e 3x4m). A amostragem consistiu no corte de três árvores em cada espaçamento de plantio aos 5 anos, em cada árvore foi coletada discos na altura do diâmetro do peito (DAP) localizado a 1,3 m do solo, resultando em 48 amostras.

4.2. Preparação das amostras para caracterização química da madeira

No lote 1 e 2, a madeira processada em serragem foi utilizada para a determinação da composição química e aquisição dos espectros no NIR. Para isso, utilizou-se um moinho de facas Willey, sendo analisada a porção que passou pela peneira de malha 40 *mesh* e foi retida na malha de 60 *mesh*.

Para o Lote 1, as amostras foram transferidas para sacos plásticos hermeticamente fechados e armazenados em sala climatizada, com temperatura de 25°C e umidade relativa de 65%, após isso a massa seca foi medida (TAPPI, T 264 om-88, 1997). Para o conteúdo de extrativos totais foi utilizado 2g de serragem. A extração sequencial foi realizada em serragem combinando álcool com tolueno (1:2) por 5h, e com álcool 96° GL por 4h, em aparelho Soxhlet completo. Além disso, foi imerso em água quente por 1h em banho-maria a 100°C, com base nos padrões TAPPI T 204 cm-97 (1997). A lignina Klason foi determinada seguindo o padrão TAPPI T 222 om-98 (1998) e adaptação de Gomide e Demuner (1986).

A reação da amostra livre de extrativos (0,3g) e com 3ml de ácido sulfúrico a 72% foi realizada a 30° C durante 1 h em banho-maria. Em seguida, essa amostra foi diluída pela adição de 84 ml de água destilada e transferida para autoclave por 1h a 120°C. Posteriormente o material foi filtrado em cadinho com placa sinterizada sob sucção, seco e posteriormente quantificado. A fração de lignina solúvel foi determinada segundo o método TAPPI UM 250, utilizando espectrofotometria na região do ultravioleta-visível (UV-Vis) com base na TAPPI UM 250. Por fim, o teor de lignina total foi obtido pela soma dos conteúdos de lignina insolúvel (Klason) e da lignina solúvel.

Já no lote 2, a partir da serragem, os extrativos foram determinados em etanol-tolueno de acordo com a norma ASTM D1107-96 (ASTM 2013). A determinação da lignina insolúvel foi realizada de acordo com o método Klason e a lignina solúvel foi determinada por espectrometria. O teor de lignina total consistiu na soma dos dois valores. Essas amostras foram anteriormente investigadas em Pimenta et al. (2024).

4.3. Aquisição espectral no NIR

A aquisição espectral foi realizada em 2g de serragem das 100 amostras, armazenadas em cadinho de porcelana imediatamente antes das leituras. Foi utilizado o mesmo modelo de equipamentos em duas diferentes configurações (Figura 1): (1) MicroNIR (Viavi Solutions Inc., CA, Estados Unidos), configurado no modo de reflectância, com faixa espectral de 887 a 1.650 nm (11.274 a 6.060 cm^{-1}) com resolução variável de 7,01 a 6,10 nm, com média de

6,24 nm, gerando 125 variáveis espectrais; (2) On-site MicroNIR (Viavi Solutions Inc., CA, Estados Unidos), configurado no modo de reflectância, com faixa espectral de 908 a 1.676 nm (11.013 a 5.966 cm^{-1}) com resolução fixa de 6,19 nm, gerando 125 variáveis espectrais. Cada espectro foi composto por uma média de 150 varreduras, com duração de 10 segundos de medição. Os dados foram coletados por meio do software SpectralSoft Solutions (Viavi Solutions Inc., CA, EUA).

Figura 1 – Detalhe do equipamento de espectroscopia NIR portátil utilizado no estudo.



Fonte: Da autora (2025).

4.4. Análise multivariada dos dados

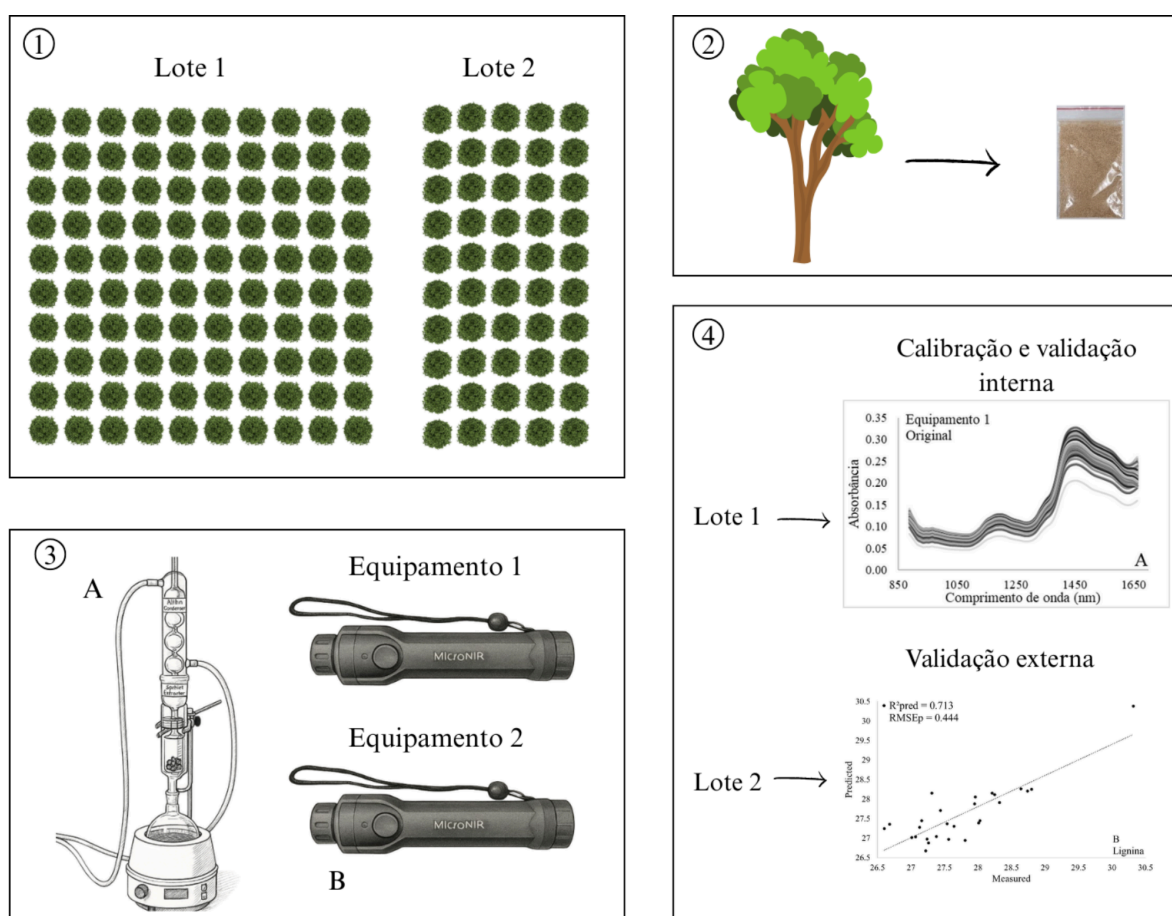
A análise dos dados utilizados foi realizada por meio da estatística multivariada tanto no formato original quanto com tratamentos matemáticos, os quais passaram por Primeira Derivada com 15 pontos de alisamento, polinômio de segunda ordem e derivada de primeira ordem, como também pelos tratamentos de *Multiplicative Scatter Correction* (MSC) e *Standard Normal Variate* (SNV), utilizados com e sem a presença de outliers.

No software Chemoface, versão 1.66 (Nunes et al., 2012), a análise de componentes principais (PCA) foi aplicada para analisar a distribuição dos espectros em espectrômetros NIR portáteis em diferentes tratamentos matemáticos e nos teores de lignina e extrativo a cada 1% de variação, a regressão de mínimos quadrados parciais (PLS-R), a fim de desenvolver modelos de predição para os teores de lignina e extrativos da madeira, utilizando validação cruzada (*leave-one-out*) e validação independente (*test set*) e a análise dos coeficientes de regressão a fim de informar as bandas mais importantes para a construção dos modelos.

As amostras do Lote 1 foram utilizadas para a calibração do modelo e validação cruzada, enquanto as amostras do Lote 2 foram utilizadas, somente, para a validação independente. No conjunto de validação independente (*test set*), os espectros foram divididos em quatro conjuntos: (1) validação com dados externos à construção do modelo (dados do Lote 2); (2) construção do modelo utilizando 70% dos dados do Lote 1 e validação com 30% restantes; (3) construção do modelo com o equipamento 1 e validação com dados do equipamento 2; e (4) construção do modelo com o equipamento 2 e validação com dados do equipamento 1.

Por fim, os modelos de regressão PLS-R foram avaliados pela RMSEcv, RMSEp, pelo R^2_{cv} , e R^2_p , pelas Variáveis Latentes (LV) para os dados de calibração e pelo desvio preditivo residual (RPD) para os de validação. A Figura 2 representa o fluxograma das atividades.

Figura 2 - Fluxograma das etapas do estudo.



1-Obtenção das amostras; 2-Preparação das amostras; 3- a) caracterização química e b) aquisição espectral nos dois equipamentos ; 4- calibração e validação dos modelos.

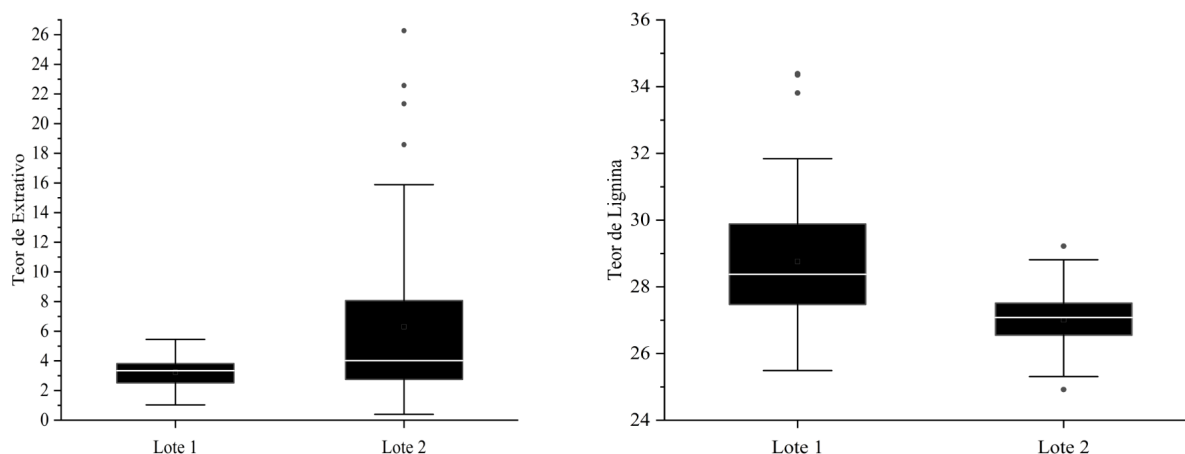
Fonte: Da autora (2025).

5. RESULTADOS

5.1. Distribuição dos teores de extrativo e lignina entre os lotes

Na Figura 3 são apresentados os box plot referentes ao teor de extrativos e lignina para os dois lotes de amostras utilizados.

Figura 3 - Distribuição dos teores de extrativos e lignina entre lotes



Fonte: Da autora (2025).

Observa-se que para os extrativos, o Lote 1 apresenta valores mais concentrados e próximos da mediana, indicando menor variabilidade entre as amostras, com valores variando de 1,03% a 5,45% e uma média de 3,23%. Já o Lote 2 exibe maior dispersão dos dados, refletida pelo comprimento mais amplo da caixa e a presença de outliers, sugerindo maior variabilidade química nesse lote, seus valores variaram de 0,40% a 26,27% com média de 6,31%.

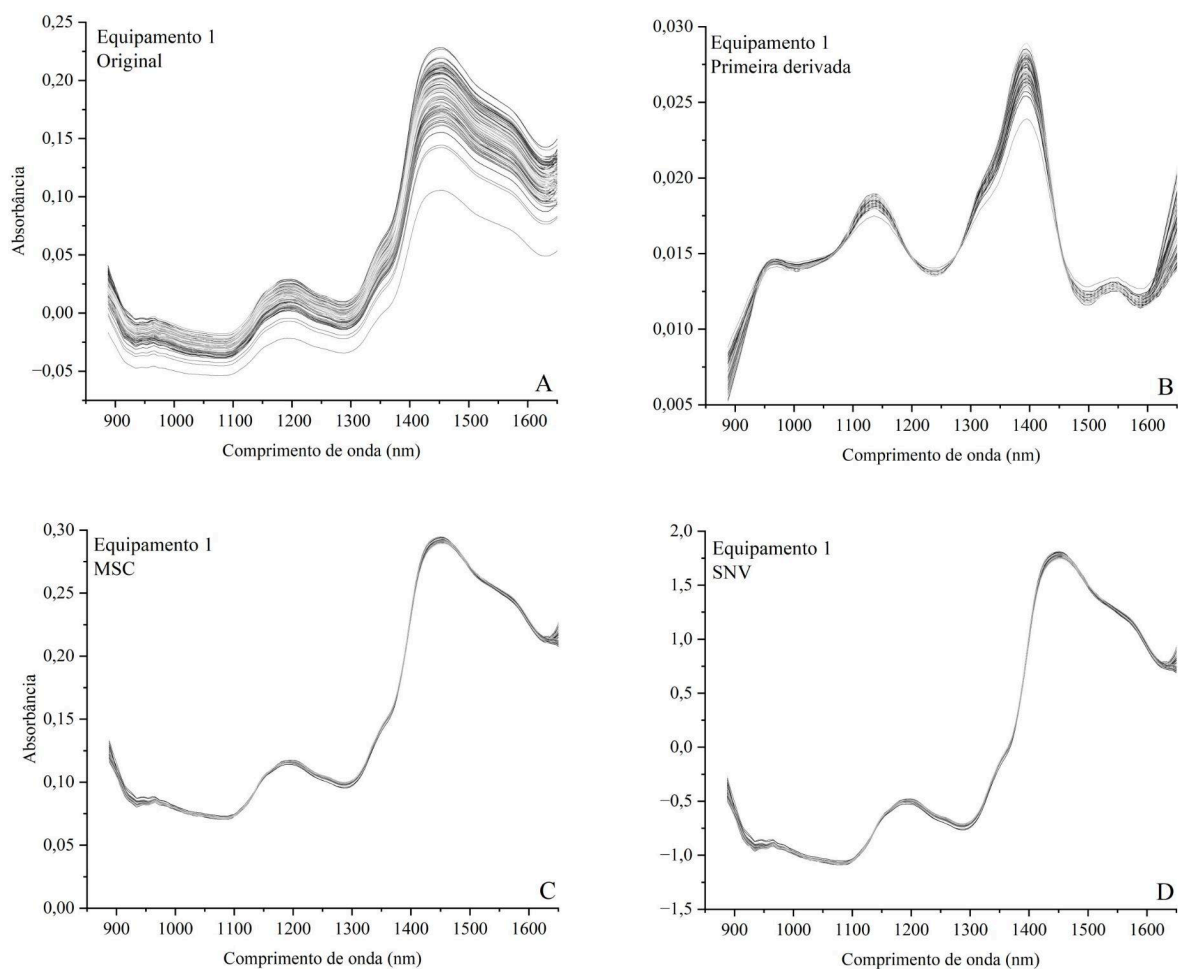
Em relação ao teor de lignina, nota-se que o Lote 1 apresenta valores médios mais elevados em comparação ao Lote 2, além de uma dispersão maior, com variação de 25,49% a 34,39%, média de 28,76% além da presença de outliers. Por sua vez, o Lote 2 mostra distribuição mais compacta e homogênea, embora apresente alguns outliers, possui uma variação de 24,92% a 29,22% com média de 27,01%.

Assim, de forma geral os box plot apresentam diferenças nos comportamentos entre os dois lotes: o Lote 1 apresenta menor heterogeneidade no teor de extrativos e maior no teor de lignina, e o contrário ocorre com o Lote 2, maior heterogeneidade no teor de extrativos e menor no teor de lignina.

5.2. Assinaturas espectrais no NIR

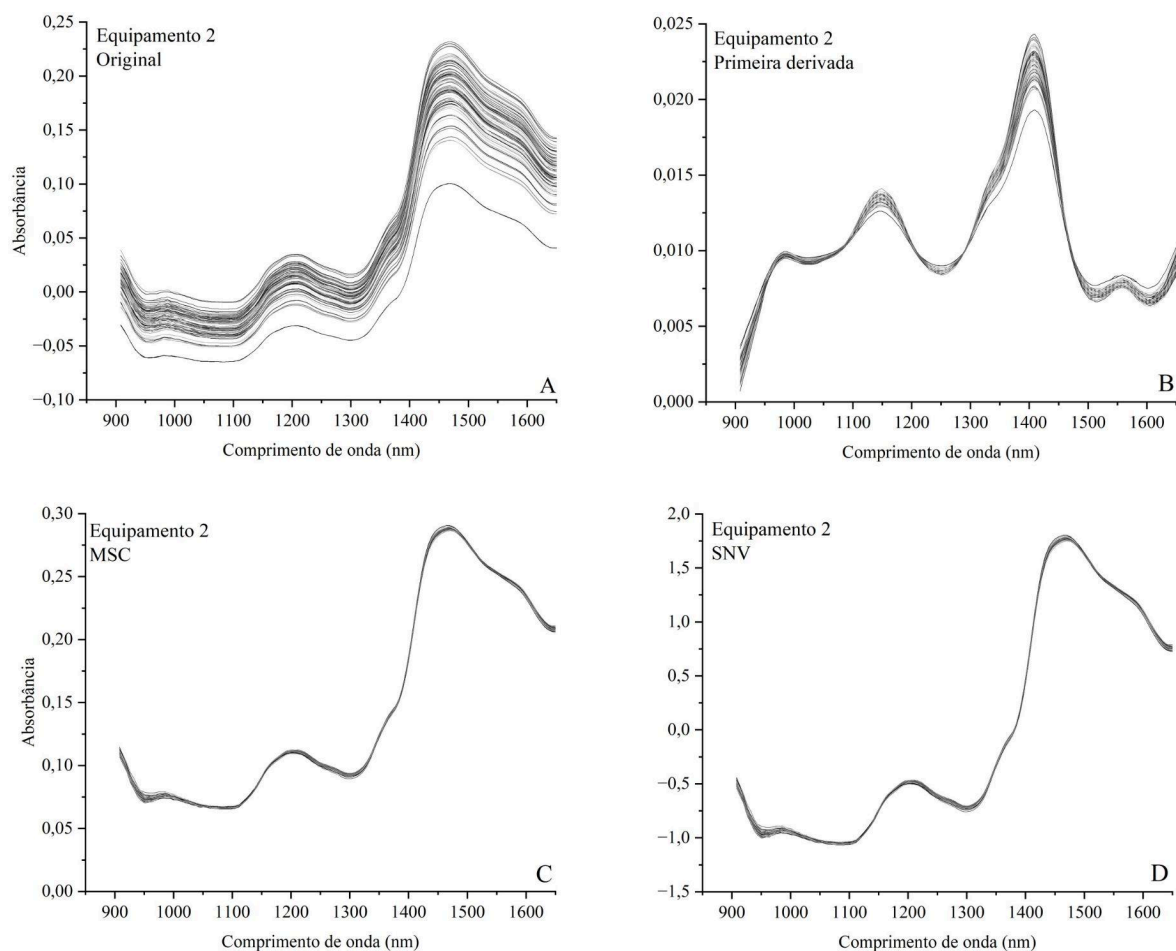
A Figura 4a apresenta os espectros na forma original, a Figura 4b demonstra os espectros após a aplicação do tratamento com a primeira derivada, a Figura 4c os espectros após a aplicação do tratamento com MSC e a Figura 4d após a aplicação com SNV, todos referente ao equipamento 1. De modo análogo, a Figura 5c exibe os espectros originais, a Figura 5b demonstra os espectros após a aplicação do tratamento com a primeira derivada, a Figura 5c os espectros após a aplicação do tratamento com MSC e a Figura 5d após a aplicação com SNV, todos referente ao equipamento 2.

Figura 4 - Espectros NIR do lote 1 de *Eucalyptus* obtidos por meio de equipamento portátil 1



Fonte: Da autora (2025).

Figura 5 - Espectros NIR do lote 1 de *Eucalyptus* obtidos por meio de equipamento portátil 2



Fonte: Da autora (2025).

Nota-se que a aplicação da primeira derivada contribuiu para a redução de ruídos e para a evidência de regiões espectrais relevantes, favorecendo a interpretação dos dados. Contudo, a definição do tratamento mais adequado para a construção dos modelos não se restringiu a essa etapa exploratória, mas foi estabelecida com base na avaliação comparativa dos parâmetros estatísticos de calibração e validação. Dessa forma, a utilização da primeira derivada não implicou necessariamente em melhor desempenho preditivo, sendo sua eficácia dependente dos resultados obtidos em cada conjunto de dados analisado.

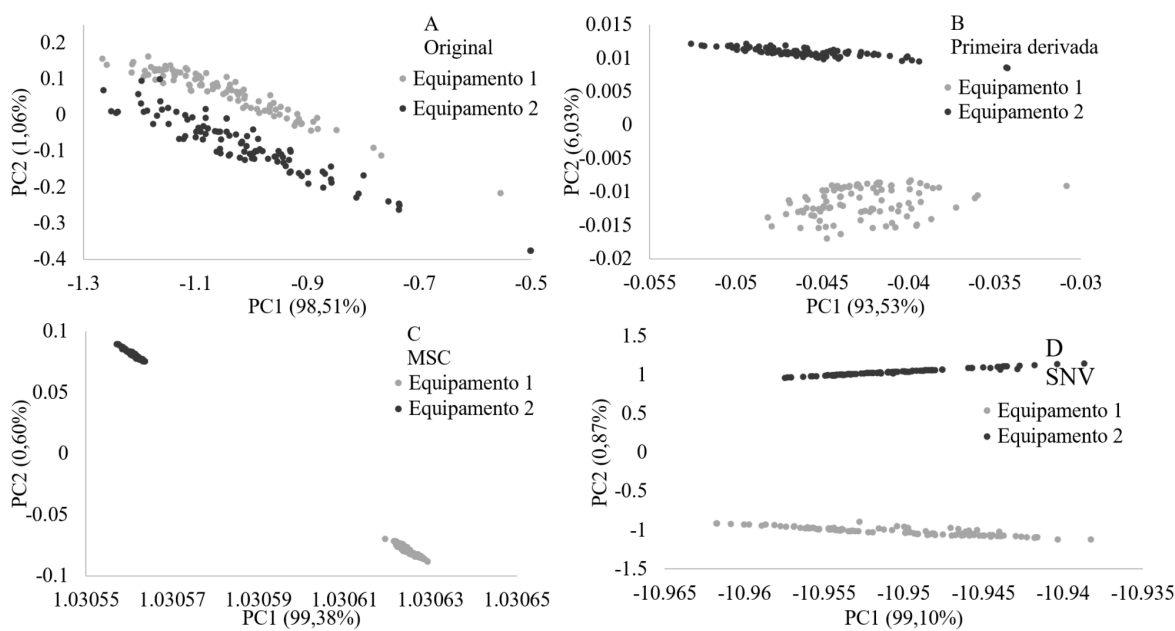
Ademais, é possível identificar, por meio dos espectros, bandas mais intensas para a caracterização dos compostos presentes nas amostras. Para o equipamento 1 (Figura 4b) observa-se que as bandas de absorvância mais intensas estão localizados na faixa de 1.136 nm até 1.390 nm, enquanto, para o equipamento 2 (Figura 5d), ocorrem na faixa de 1.150 nm até 1.410 nm. Bandas na faixa de 1.000 nm até 1.300 nm podem estar associadas a absorção

de ligações C-O de alcoóis, éteres, ésteres, ácidos carboxílicos e anídeos, enquanto bandas na faixa de 1.390 nm podem estar associadas a grupos isolados de OH e combinação de ligações C-H, esses componentes também podem ser encontrados em extrativos e lignina o que pode representar a ocorrência desses compostos. Já a banda 1.410 nm refere-se a grupos hidroxilas fenólicas presentes tanto em extrativos quanto na própria molécula de lignina. (SCHWANNINGER, 2011).

5.3. Análise dos componentes principais

A Figura 6a representa a dispersão das novas variáveis com base nos espectros de forma original, a Figura 6b representa as variáveis a partir dos espectros tratados com a primeira derivada, a Figura 6c representa as variáveis a partir dos espectros tratados com a MSC e a Figura 6d representa as variáveis a partir dos espectros tratados com SNV.

Figura 6 - Análise de componentes principais (PCA) dos espectros obtidos por meio de espectrômetros NIR portáteis submetidos a diferentes tratamentos matemáticos



Fonte: Da autora (2025).

A PCA apresentou diferenças nos espectros obtidos pelos dois equipamentos, mesmo antes da aplicação de qualquer tratamento matemático. A Figura 6a sugere a presença de variabilidade instrumental associada a fatores como a diferença metodológica e as condições de coleta dos espectros. A PC1, responsável por 98,51% da variância, aponta essa

discrepância, validando Safanelli et al. (2013), que aponta os efeitos instrumentais como uma fonte significativa de variação em dados espectroscópicos.

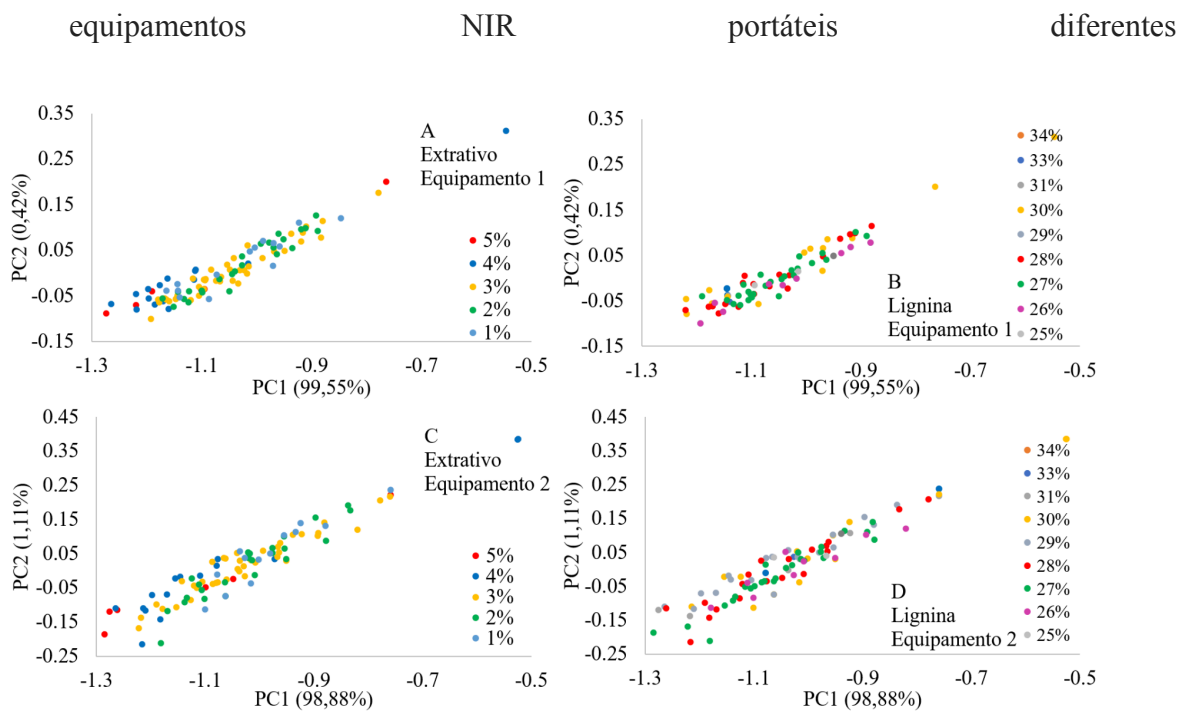
A aplicação da primeira derivada, apesar de estreitar a dispersão dos pontos em torno da PC1 (93,53% de variância), principalmente para o equipamento 2, ainda houve a separação clara entre os dois equipamentos, indicando que embora esse tratamento tenha sido eficaz na remoção da baseline e realçar os picos, não foi eficaz na correção das diferenças causadas por efeitos de espalhamento da luz ou diferenças entre os equipamentos.

A aplicação da MSC, normalmente utilizada para minimizar os efeitos da dispersão indesejável e estimar os coeficientes de correção com contribuições aditivas e multiplicativas, padronizando o espectro registrado a partir de um espectro de referência (RINNAN, 2009), apresentou desempenho insatisfatório. Mesmo com a PC1 explicando 99,38% da variância, a MSC pode amplificar variações quando aplicado a dados provenientes de diferentes instrumentos, como também observado por Shalini et al. (2025), que reportam desempenho inferior da MSC comparado ao SNV na correção espectral.

Por fim, o tratamento com SNV mostrou-se eficaz na correção das diferenças instrumentais. A Figura 5d revela que os espectros de ambos os equipamentos estão alinhados no mesmo eixo e apresentam menor dispersão, com PC1 explicando 99,10% da variância. Esse resultado indica que o SNV foi capaz de reduzir os efeitos de espalhamento e variações sistemáticas, promovendo a harmonização dos dados. Estudos anteriores, como de Grisanti et al. (2018), Ye et al. (2020) e Xiao et al. (2022), demonstraram que o SNV melhora a robustez de modelos preditivos e reduz variâncias entre instrumentos.

A Figura 5 exibe o gráfico da PCA. As Figuras 6a e 6b representam, respectivamente, os escores referentes aos teores de extrativo e lignina obtidos para o equipamento 1. De forma similar, as Figuras 6c e 6d correspondem, respectivamente, aos escores dos teores de extrativos e lignina do equipamento 2.

Figura 7 - Visualização por PCA da dispersão dos teores de lignina e extrativos em dois



Fonte: Da autora (2025).

A análise dos teores de extrativos (Figura 7a e 7c) foi realizada com segmentação a cada 1% de variação, não sendo observado nenhum padrão de agrupamento na dispersão dos teores entre as amostras, independente do equipamento utilizado. O mesmo comportamento foi verificado para os teores lignina (Figura 7b e 7d).

A distribuição ocorreu de forma homogênea, o que pode indicar uma estabilidade entre os teores de extrativos e lignina das amostras, a baixa variabilidade observada também pode ser atribuída à homogeneidade dos talhões, refletindo na uniformidade das amostras. Isso sugere que as condições de crescimento, manejo e processamento das árvores foram similares em todos os talhões, especialmente por se tratar de amostras compostas. Além disso, a semelhança entre as faixas espectrais dos equipamentos colabora para a similaridade da dispersão independentemente do equipamento.

Para os teores de extrativo (Figura 7a e 7c) a PCA apresentou discriminação equivalente para os dois equipamentos, com a PC1 responsável por 99,55% das informações, enquanto a PC2 0,42%. De forma similar, para os teores de lignina, a PC1 discriminou 98,88% das informações, enquanto a PC2 representou 1,11%, também para ambos os equipamentos.

5.4. Análise de regressão dos mínimos quadrados parciais

De modo geral, os modelos foram ajustados por meio da PLS-R, usando os espectros tanto na sua forma original quanto com a aplicação de tratamentos matemáticos (primeira derivada, SNV e MSC).

Em relação ao equipamento 1, conforme apresentado na Tabela 1, observa-se que o modelo preditivo selecionado para o teor de extrativos, foi com o tratamento SNV, cujo critério de desempate baseou-se no maior R^2_{cv} , menor $RMSE_{cv}$, como também feito por Baldin et al. (2020) e Miranda et al. (2024). Sendo assim, o modelo selecionado (modelo 4) apresentou parâmetros estatísticos com R^2_{cv} de 0,706. Em ao $RMSE_{cv}$, o valor foi de 0,566, utilizando-se 10 variáveis latentes.

Já para a lignina, os tratamentos que utilizaram os espectros Originais sem outlier, a MSC sem outlier, apresentaram valores próximos tanto para R^2_{cv} quanto para $RMSE_{cv}$. No entanto, o tratamento selecionado foi o MSC sem outlier (modelo 10), cujo critério de desempate também foi baseado no maior R^2 , menor RMSE e número de variáveis latentes, como também feito por Baldin et al. (2020) e Miranda et al. (2024). Dessa forma, o modelo 10 obteve os melhores resultados, com R^2_{cv} de 0,828. Em relação ao $RMSE_{cv}$, o valor foi de 0,620, utilizando-se 10 variáveis latentes.

É válido destacar que, para a construção dos modelos referentes ao teor de extrativos, não foi necessário a remoção de outlier, porém o mesmo não ocorre nos modelos preditivos para lignina.

Tabela 1 - Parâmetros estatísticos da validação cruzada dos modelos PLS-R para estimativa dos teores do extrativo e lignina da madeira de *Eucalyptus* por meio de espectrômetros NIR portáteis

(Continua)							
Modelo	Equipamento	Componente	Tratamento	Outliers	R^2_{cv}	$RMSE_{cv}$	LV
1	1	Extrativo	Original	0	0,672	0,596	9
2			1 D	0	0,643	0,620	9
3			MSC	0	0,679	0,592	10
4			SNV	0	0,706	0,566	10
5		Lignina	Original	0	0,726	0,921	10
6			Original	3	0,813	0,645	10

Tabela 1 - Parâmetros estatísticos da validação cruzada dos modelos PLS-R para estimativa dos teores do extrativo e lignina da madeira de *Eucalyptus* por meio de espectrômetros NIR portáteis

							(Conclusão)
6			Original	3	0,813	0,645	10
7			1 D	0	0,653	1,038	9
8			1 D	3	0,752	0,744	9
9			MSC	0	0,683	1,006	10
10			MSC.	3	0,828	0,620	10
11			SNV	0	0,728	0,922	9
12			SNV	3	0,836	0,605	10
13	2	Extrativo	Original	0	0,495	0,735	9
14			1 D	0	0,533	0,705	8
15			MSC	0	0,454	0,766	7
16			SNV	0	0,454	0,767	7
17		Lignina	Original	0	0,495	1,201	9
18			Original	2	0,547	1,013	9
19			1 D	0	0,442	1,259	8
20			1D	2	0,513	1,047	8
21			MSC	0	0,503	1,185	7
22			MSC	2	0,544	1,012	7
23			SNV	0	0,502	1,185	7
24			SNV	2	0,544	1,012	7

R²cal- coeficiente de determinação para calibração; RMSEc- raiz do erro quadrático médio da calibração; R²cv- coeficiente de determinação para validação cruzada; RMSEcv- raiz do erro quadrático médio para validação cruzada; LV- variável latente; 1D- primeira derivada; SNV- variável normal padrão, MSC- correção multiplicativa de espalhamento.

Fonte: Da autora (2025).

Em relação ao equipamento 2, conforme apresentado na Tabela 1, observa-se que o modelo preditivo selecionado para o teor de extrativos, foi o da primeira derivada, cujo critério de desempate baseou-se no maior R²cv, menor RMSEcv e menor número de variável latente. Sendo assim, o modelo selecionado (modelo 14) apresentou parâmetros estatísticos

com R^2_{cv} de 0,533. Em relação ao RMSE_{cv}, o valor foi de 0,705, utilizando-se 8 variáveis latentes.

Já para a lignina, os tratamentos que utilizaram os espectros originais sem outlier, e MSC sem outlier, apresentaram valores próximos tanto para R^2_{cv} quanto para RMSE_{cv}. No entanto, o tratamento selecionado, também foi o MSC sem outlier, cujo critério de desempate também foi baseado no maior R^2 , menor RMSE e número de variáveis latentes, como também feito por Baldin et al. (2020) em eucalipto e Miranda et al. (2024) em Corymbia e eucalipto, para prever propriedades químicas da madeira. Dessa forma, o tratamento MSC sem outlier (modelo 22) obteve os melhores resultados, com R^2 de 0,544 na validação cruzada. Em relação ao RMSE, o valor foi de 1,012 na validação cruzada, utilizando-se 7 variáveis latentes.

Zhang et al. (2022), utilizando cavacos de *Pinus massoniana*, *Cunninghamia lanceolata*, Acácia, Eucalipto e álamo obtiveram resultados de R^2 na validação variando entre -3,5 a 0,96 e valores de 9,21 a 0,84 para RMSE, em diferentes tipos de instrumentos portáteis, quando analisaram o teor de lignina. Diniz et al. (2019a) obtiveram valores de R^2 variando entre 0,31 e 0,47 para predição da relaçãoiringil/guaiacil utilizando validação cruzada e independente, com a aplicação da variável normal padrão (SNV), correção de dispersão multiplicativa (SNV) e primeira e segunda derivada, em equipamento portátil. Os valores de R^2_{cv} obtidos nesse trabalho para o teor de extrativos (0,706 e 0,533) e de lignina (0,50,828 e 0,544) indicando consistência com os resultados apresentados nessas literaturas.

É válido ressaltar que, para a construção dos modelos referentes ao teor de extrativos, não foi necessário a remoção de outlier, porém o mesmo não ocorre nos modelos preditivos para lignina. Não somente nos modelos com espectros originais quanto nos demais tratamentos utilizados, a remoção dos 3 outliers presentes resultou em um aumento perceptivelmente nos valores de R^2_{cv} , além de uma redução nos valores de RMSE_{cv}.

A diferença entre os resultados dos dois equipamentos pode ser explicada pela diferença dos dois equipamentos e pela diferença da metodologia, já que foram aplicados os mesmos tratamentos (SNV, MSC e primeira derivada) para a criação dos modelos para extrativo e para lignina em ambos os equipamentos, quando necessário foram retirados os outliers e aplicado novamente o tratamento.

Outro ponto relevante, é que a aplicação de alguns tratamentos matemáticos nos espectros melhorou os parâmetros dos modelos, conforme relatado também por Loureiro et al. (2022). Esse pré-processamento possibilita eliminar ruídos e informações irrelevantes nos

espectros, resultando em modelos mais precisos (ZHANG, 2022). Para extrativos, o uso da SNV e da primeira derivada foi mais eficaz, enquanto, para lignina a MSC surtiu mais efeito.

De forma similar, Pimenta et al. (2024), também destacaram melhorias em modelos de predição de extrativos em eucalipto com a primeira derivada. Zhang et al. (2022) reforçam que a MSC pode reduzir influências de diferentes coeficientes de dispersão causados pela distribuição desigual de partículas de pó de madeira e diferentes tamanhos de partículas do espectro medido.

A partir da seleção dos melhores modelos referentes à calibração e validação cruzada, estes foram selecionados para avançarem à etapa de validação independente. Conforme mostra na Tabela 2, tanto o modelo construído com o equipamento 1 e validado com o equipamento 2 (Modelo 1 validado 2), quanto o modelo construído com o equipamento 2 e validado com o equipamento 1 (Modelo 2 validado 1), apresentaram resultados do coeficiente de determinação para validação externa (R^2_{pred}) e raiz do erro quadrático médio para validação externa (RMSEp) muito baixos em relação aos dois outros tipos de validação. Transferências de calibração com equipamentos portáteis, como em Zhang et al., (2021), obtiveram variações de R^2_{pred} de 0,96 a -3,5 e RMSEp de 0,84 a 9,21 em diferentes equipamentos e os autores informam ser viáveis as transferências. Um motivo que pode ter explicado a variação dos resultados com o mesmo equipamento neste estudo, pode ser a diferença metodológica entre as amostras e a diferença dos equipamentos.

Para a predição do teor de extrativo, a validação com dados externos no lote 2 (Tabela 2) apresentou maiores valores de R^2_{pred} , porém com altos valores de RMSEp comparado aos erros dos outros tipos de validação. Para o equipamento 1, o modelo 4 obteve R^2_{pred} no valor de 0,737 e um RMSEp de 6,541, utilizando-se 10 variáveis latentes. Já no equipamento 2, o modelo 14 obteve R^2_{pred} de 0,645 e um RMSEp de 8,362 com 8 variáveis latentes. Já a validação do tipo 70%/30%, apresentou os menores resultados para RMSEp, porém com baixos valores de R^2_{pred} . Para o equipamento 1, o modelo 4 obteve R^2_{pred} no valor de 0,494 e um RMSEp de 0,660, utilizando-se 10 variáveis latentes. Já no equipamento 2, o modelo 14 obteve R^2_{pred} de 0,403 e um RMSEp de 0,703 com 8 variáveis latentes

Já para predição do teor de lignina, a validação do tipo 70%/30% apresentaram os melhores resultados. Para o equipamento 1, o modelo 10 apresentou um R^2_{pred} de 0,713 e um RMSEp de 0,444, sendo utilizado 10 variáveis latentes. Já no equipamento 2, o modelo 22 apresentou um R^2_{pred} de 0,546 e um RMSEp de 1,137, utilizando 7 variáveis latentes.

Um ponto que vale destaque é que, de modo geral, os modelos de predição desenvolvidos com o equipamento 1 apresentaram valores de R^2_{pred} superiores, bem como

valores de RMSEp inferiores em comparação aos mesmos valores obtidos com o equipamento 2, tanto na predição de extrativos quanto na predição de lignina, que pode ser explicado pela diferença de configuração entre os equipamentos além da variação da metodologia e da aquisição dos espectros.

Em relação ao tipo de validação, para predição do teor extrativos, a validação com dados externos à construção do modelo no lote 2, apresentou valores mais altos de R^2_p , porém acompanhados de maiores RMSEp, enquanto a validação 70%/30% resultou em valores mais baixos de R^2_p e RMSEp, em ambos os equipamentos. Já para a predição do teor de lignina, a validação do tipo 70%/30% apresentou os melhores resultados, com maiores valores de R^2_{pred} e valores de RMSEp mais baixos, também para ambos os equipamentos. Por fim, em cada tipo de validação com os melhores resultados, o equipamento 1 demonstrou desempenho superior na predição dos teores de extrativo e lignina, caracterizados por valores mais altos de R^2_{pred} e menores valores de RMSEp.

Tabela 2 - Parâmetros estatísticos da validação independente dos modelos PLS-R para estimativa dos teores do extrativo e lignina da madeira de *Eucalyptus* por meio de espectrômetros NIR portáteis

(Continua)									
Modelo	Tipo de validação	Equipamento	Componente	Tratamento	Outliers	R^2_{pred}	RMSEp	RPD	LV
4	Externa no lote 2	1	Extrativo	SNV	0	0,737	6,541	0,900	10
10		1	Lignina	MSC	3	0,126	6,8	0,141	10
14		2	Extrativo	1D	0	0,645	8,362	0,704	8
22		2	Lignina	MSC	2	0,129	8,425	0,114	7
4	Lote 1 Cal.: 70% Val.: 30%	1	Extrativo	SNV	0	0,494	0,660	1,360	10
10		1	Lignina	MSC.	3	0,713	0,444	1,768	10
14		2	Extrativo	1D	0	0,403	0,703	1,317	8

Tabela 2 - Parâmetros estatísticos da validação independente dos modelos PLS-R para estimativa dos teores do extrativo e lignina da madeira de *Eucalyptus* por meio de espectrômetros NIR portáteis

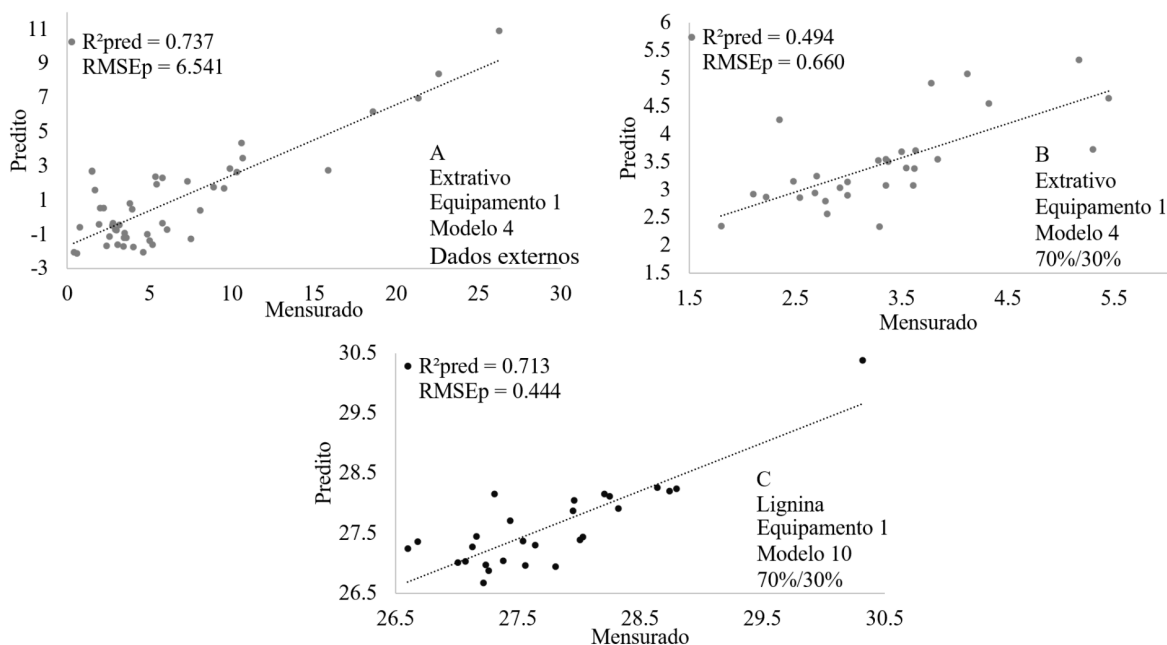
									(Conclusão)
1	Modelo 1 validação 2	1 no 2	Extrativo	Original	0	0,482	1,894	0,544	9
4		1 no 2	Extrativo	SNV	0	0,293	1,771	0,582	10
6		1 no 2	Lignina	Original	3	0,399	4,824	0,347	10
10		1 no 2	Lignina	MSC	3	0,390	2,486	0,674	10
13	Modelo 2 validação 1	2 no 1	Extrativo	Original	0	0,009	2,538	0,409	9
14		2 no 1	Extrativo	1D	0	0,186	1,059	0,980	8
18		2 no 1	Lignina	Original	2	0,130	5,999	0,292	9
22		2 no 1	Lignina	MSC	2	0,470	6,565	0,267	7

R²pred- coeficiente de determinação para validação externa; RMSEp- raiz do erro quadrático médio para validação externa; RPD- Razão de desempenho para desvio; LV- variável latente; SNV- variável normal padrão; MSC- correção multiplicativa de espalhamento; 1D- primeira derivada.

Fonte: Da autora (2025).

A Figura 8a e 8b representam os gráficos das validações dos modelos para prever o teor de extrativo e lignina referente ao equipamento 1, enquanto a Figura 8c e 8d representam os gráficos dos teores de lignina e extrativos referente ao equipamento 2. A correlação das propriedades foram realizadas com os valores determinados em laboratório e previstos com a tecnologia NIR, utilizando dois equipamentos portáteis.

Figura 8 - Validações externas PLS-R dos modelos para prever teores de extrativo e lignina



Fonte: Da autora (2025).

É possível observar uma clara semelhança entre os gráficos que representam a distribuição do mesmo componente, mas em equipamentos diferentes. Conforme mencionado anteriormente, o equipamento 1 demonstrou resultados superiores na predição de lignina e extrativo. Ao analisar os gráficos, é possível constatar que a distribuição apresentada no gráfico 6b foi a mais eficiente entre todos.

A predição dos modelos para o teor de lignina mostrou-se mais precisa em comparação com a predição dos modelos para o teor de extrativos, conforme relatado também por Baldin et al. (2020) e Hodge et al. (2018), onde apontam que a baixa proporção de extrativos na madeira, sua grande variabilidade entre espécies, diferença na metodologia e obtenção dos espectros podem dificultar a análise desse componente. O valor de RMSEp foi o mais baixo entre todos os modelos (RMSEp=0,444), assim como o valor de R^2_{pred} foi o segundo mais alto ($R^2_{pred}=0,713$). Em contrapartida, a predição do teor de extrativos foi a menos precisa, o que pode ter sido influenciada pela diferença entre espécies e os métodos de determinação. Porém, esse fato também foi observado por Baldin et al. (2020) e Miranda et al. (2024) que atribuíram essa dificuldade à baixa proporção de extrativos na madeira, bem como à sua grande variabilidade entre diferentes espécies de eucalipto. Como alternativa, os autores sugerem ampliar o banco de dados do modelo com o maior número possível de amostras, contemplando alta variabilidade.

A variabilidade nos resultados de calibração derivados dos dois lotes e instrumentos pode ser atribuída a uma confluência de fatores que impactaram tanto a coleta de dados espectrais quanto os valores químicos de referência. Em primeiro lugar, os operadores, as condições ambientais e os protocolos de manuseio de amostras variaram entre os dois lotes. Notavelmente, os cadinhos de porcelana empregados para o armazenamento e análise de pós de madeira antes da aquisição espectral eram diferentes, o que poderia ter induzido variações na apresentação da amostra e na distribuição da luz durante a medição. Além disso, mesmo pequenas diferenças na umidade, temperatura ou iluminação ambiente podem influenciar a interação entre a radiação NIR e a superfície da amostra, levando a inconsistências nos espectros registrados.

Em segundo lugar, a diferença de configuração entre os espectrômetros e o fato de terem sido gerenciados de forma independente introduz uma camada adicional de variabilidade potencial, particularmente em relação ao posicionamento e varredura das amostras.

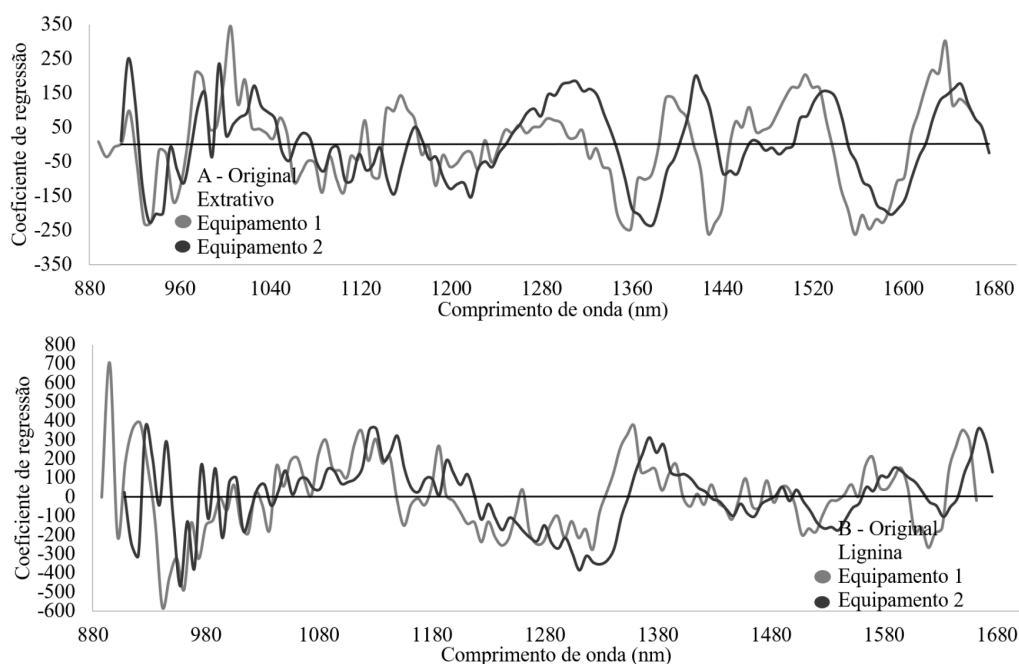
Além disso, uma distinção significativa está nas metodologias utilizadas para a determinação química das propriedades da madeira em cada lote. O lote 1 aderiu aos padrões TAPPI (T 204, T 222 e UM 250), enquanto o lote 2 empregou o método ASTM D1107-96 para extrativos, ao lado do método Klason combinado com espectrofotometria UV-visível para avaliação da lignina, conforme delineado por Pimenta et al. (2024). Essas divergências metodológicas, mesmo ao avaliar componentes químicos idênticos, podem levar a variações sistemáticas nos valores de referência utilizados para calibração.

Coletivamente, as disparidades dos instrumentos, dos processos e da metodologia entre os lotes revelam as inconsistências observadas nos modelos de calibração de cada conjunto de dados. Isso ressalta a importância da uniformidade na aquisição de dados e das análises químicas ao formular modelos preditivos baseados na espectroscopia NIR. Assim, a abordagem empregada para a caracterização química e os protocolos experimentais adotados são essenciais para a confiabilidade e a qualidade dos resultados.

5.5. Análise dos coeficientes de regressão

Os gráficos apresentados na Figuras 9 ilustram a análise dos coeficientes de regressão para cada um dos componentes estudados, sendo eles o teor de extrativos no equipamento 1 e 2 (Figura 9a) e o teor de lignina no equipamento 1 e 2 (Figura 9b).

Figura 9 - Gráficos dos coeficientes de regressão



Fonte: Da autora (2025).

Embora apresentem distribuições distintas, os gráficos exibiram bandas que influenciaram a construção do modelo em faixas muito semelhantes. Na Figura 8a, é possível observar que no equipamento 1, as bandas mais significativas para a construção dos modelos estão localizadas nas bandas de 914, 980, 994, 1.004, 1.155, 1.390, 1.513 e 1.637 nm, e para o equipamento 2 nas bandas de 914, 994, 1.025, 1.310, 1.416, 1.533 e 1.650 nm. Especificamente, na faixa de 950 a 980 nm, conforme destacado por Heim et al. (2023), a ocorrência de extrativos pode estar relacionado à coloração amarelo-marrom característica da madeira. Na região de 1.310 a 1.350 nm, podem estar relacionados a todos os componentes da madeira após a acetilação. Já na região de 1.420 a 1.460 nm, as vibrações observadas são atribuídas a grupos hidroxila associados aos compostos fenólicos em compostos extrativos. Bandas na faixa de 1.610 a 1.650 nm, podem ser relacionados ao primeiro *overtone* dos extrativos.

As bandas referentes ao teor de lignina também se apresentaram em regiões muito similares, apesar da diferença de equipamento. Na Figura 8b as principais bandas, para o equipamento 1, aparecem nas faixas de 921, 1.117, 1.186, 1.360, 1.569 e 1.650 nm, e para o equipamento 2 estão entre 926, 957, 1.130, 1.150, 1.372 e 1.663 nm. Conforme Heim et al. (2023) as vibrações que ocorrem nessas regiões espectrais podem ser diretamente associadas

à presença de extrativos, como também da lignina. Especificamente, na faixa de 950 a 980 nm, a ocorrência de lignina pode estar relacionada à coloração amarelo-marrom característica da madeira.

Conforme Heim et al. (2023) e Schwanninger et al. (2011), as bandas nas regiões de 1.100 a 1.150 nm, 1.170 nm e 1.188 a 1.195 nm podem ser associados à lignina, em função da presença de grupos CH_3 e de estruturas aromáticas da lignina. Além disso, os autores destacam que bandas na região de 1.310 a 1.350 nm se relacionam a todos os componentes da madeira após a acetilação. Por fim, Heim et al. (2023) e Schwanninger et al. (2011), apresentam que o primeiro *overtone*, grupos aromáticos e CH aromáticos, nas faixas de 1.672 a 1.677 nm, são referentes à lignina.

Ressalta-se que a semelhança das moléculas de extrativos e dos monômeros básicos da lignina dificultam a distinção dos espectros e o tratamento dos dados. Contudo, é possível explorar algumas diferenças sutis entre os coeficientes de regressão para extrativos e lignina, que podem ser distinguidos uns dos outros, principalmente na região de 1.000 nm até 1.300 nm, de acordo com Paiva et al., (2015) constitui a região onde apresentam-se principalmente as frequências vibracionais de estiramento e dobramento das ligações C-O de éteres (R-O-R). Em madeiras melhoradas para a produção de celulose, as ligações do tipo éter são mais abundantes na lignina, além das interações C-C, assim espera-se e verifica-se, na Figura 9b, que essa região apresenta maior intensidade e quantidade de bandas quando comparada a mesma região nos gráficos de extrativos, Figura 9a.

Ademais, os principais bandas observados na Figura 9a, podem estar associados a determinados extrativos encontrados na madeira, como terpenos, nas regiões de 914 nm até 1.000 nm, 1.155 nm, 1.400 nm e 1.600 nm; alcalóides, nas regiões de 1.155 nm, 1.400 nm e 1.620 nm; flavonas, nas regiões de 1.100 nm, 1.500 nm e 1.620 nm; cumarinas, em torno de 1.400 nm; e fenilalaninas simples, na região de 1.150 nm (MA, 2019).

Também é possível identificar diferenças na sensibilidade dos dois equipamentos utilizados, resultante da diferença de configuração entre ambos. Variações nos padrões dos coeficientes de regressão também podem resultar de diferenças na eficácia instrumental. Embora os equipamentos 1 e 2 sejam fundamentalmente comparáveis, variações na resolução espectral, sensibilidade do sensor e metodologias de calibração podem gerar resultados divergentes. O equipamento 1 exibiu maior sensibilidade a pequenas flutuações espectrais, o que provavelmente aumentou a eficácia de seus modelos preditivos.

Apesar da equivalência técnica dos dois espectrômetros, discrepâncias sutis na resolução espectral, na sensibilidade do sensor e nas técnicas de calibração podem influenciar

consideravelmente a integridade do sinal e, por sua vez, o desempenho dos modelos preditivos. A maior capacidade de resposta do equipamento 1 às variações espectrais diferenciadas provavelmente contribuiu para sua precisão preditiva superior. As variações observadas nos resultados da calibração significam, portanto, não apenas os dados espectrais inerentes obtidos de cada aparelho, mas também as ramificações dos atributos instrumentais e das complexidades químicas da matriz de madeira. Esses elementos, em conjunto com as discrepâncias acima mencionadas na preparação da amostra, metodologias analíticas e parâmetros ambientais, ressaltam a necessidade de uma estrutura experimental meticulosamente regulamentada.

Em resumo, as divergências nos coeficientes de regressão e nos resultados do modelo decorrem de uma interação complexa entre a heterogeneidade química, as características espectrais da lignina e dos extrativos e a eficiência operacional dos instrumentos. Essas descobertas ressaltam a importância primordial da sensibilidade do equipamento e do projeto estratégico de experimentos no desenvolvimento de modelos preditivos confiáveis e precisos baseados na espectroscopia NIR.

6. CONCLUSÃO

Os modelos PLS-R desenvolvidos com espectros NIR para o teor de extrativos apresentaram coeficientes de determinação (R^2) de 0,737 e raiz do erro quadrático médio para validação externa (RMSEp) de 6,541 com a validação com dados externos, enquanto para validação 70%/30% resultou em R^2 de 0,494 e RMSEp de 0,660. Essa diferença evidencia uma incongruência na predição dos extrativos, uma vez que, embora a validação externa tenha apresentado maior R^2 , o RMSEp foi mais alto, já na validação 70%/30% apresentou menor R^2 e menor RMSEp. Enquanto para lignina, obteve-se R^2 de 0,713 e RMSEp de 0,444 na validação 70%/30%. Confirmando que modelos apresentaram eficiência na predição de lignina e extrativos em *Eucalyptus*.

Além disso, o uso de equipamento portátil demonstrou ser promissor para essa finalidade, dado que seu custo mais acessível e a portabilidade, em comparação com equipamentos de bancada, favorecem sua aplicação e implementação nas indústrias, principalmente sua aplicação na discriminação de toras que chegam no pátio das fábricas, quanto aos teores de lignina e extrativos, a fim de construir um mix ideal de árvores visando facilitar toda a produção fabril. Ressalta-se a necessidade de padronização das configurações dos equipamentos a fim de minimizar possíveis erros e padronizar a metodologia.

Ademais, entre os dois equipamentos avaliados, o equipamento 1 mostrou-se mais favorável na predição dos componentes analisados. Destaca-se, sobretudo, sua maior aplicabilidade na predição do teor de lignina (modelo 10), componente que apresentou os resultados mais robustos.

Destaca-se que a metodologia empregada na caracterização química, assim como os procedimentos experimentais adotados, impactaram de forma significativa nos resultados de calibração. Diferenças nos protocolos analíticos, no manuseio das amostras e nas condições ambientais entre os dois lotes contribuíram para a variação nos dados espectrais e nos valores de referência. Portanto, a consistência nos métodos analíticos e no delineamento experimental é essencial para garantir a confiabilidade, a precisão e a transferibilidade de modelos preditivos baseados em espectroscopia NIR.

Vale ressaltar que, poucos estudos utilizando equipamentos portáteis para a predição de lignina e extrativos em *Eucalyptus* tenham sido encontrados (Zhang et al., 2022, Diniz et al., 2019 e Diniz et al, 2019a), o que dificultou a comparação dos resultados deste trabalho. Diante disso, evidencia-se a necessidade de mais pesquisas sobre o tema, a fim de ampliar o conhecimento e a validação dessas metodologias.

REFERÊNCIAS

BALDIN, Talita et al. Modelos NIRS para as características químicas da madeira de *Eucalyptus benthamii* Maiden & Cabbage. **Caderno de Ciências Agrárias**, v. 12, p. 1-9, 2020.

BALDIN, Talita et al. Qualidade da madeira de *Eucalyptus benthamii* para produção de celulose por espectroscopia no infravermelho próximo (NIRS). **Scientia Forestalis**, 2020a.

BARBOSA, Kelvin Techera et al. Biochemical features of organic extractives from *Eucalyptus* and *Corymbia* woods using ethanol as a solvent. **Maderas. Ciencia y tecnología**, v. 23, 2021.

BRODA, Magdalena. **Compostos naturais para proteção da madeira contra fungos - Uma revisão**. *Moléculas*, v. 25, n. 15, p. 3538, 2020.

DEUS, Deise Amaral et al. Lignina: uma importante tecnologia química da madeira. **E-Acadêmica**, v. 3, n. 3, p. e7233391-e7233391, 2022.

DINIZ, C. P.; GRATTAPAGLIA, D.; DE ALENCAR FIGUEIREDO, L. F. Comparative performance of bench and portable near infrared spectrometers for measuring wood samples of two *Eucalyptus* species (*E. pellita* and *E. benthamii*). In: **18th international conference near infrared spectroscopy. IM Publications Open, Chichester**. 2019. p. 31-38.

DINIZ, Carolina Pinto et al. Near-infrared-based models for lignin syringyl/guaiacyl ratio of *Eucalyptus benthamii* and *E. pellita* using a streamlined thioacidolysis procedure as the reference method. **Wood Science and Technology**, v. 53, n. 3, p. 521-533, 2019a.

EMBRAPA. **O EUCALIPTO**. 2019. Disponível em: [Eucalipto - Portal Embrapa](#) Acesso em: 10 dez. 2024

FERREIRA, Marcia Miguel Castro. *Quimiometria: conceitos, métodos e aplicações*. Editora da UNICAMP, 2015.

FERNANDES, Marco Antônio Muniz et al. Qualidade da madeira de híbridos de *Corymbia* para a produção de celulose kraft. **Ciência Florestal**, p. e87028-e87028, 2025.

FUJIMOTO, Takaaki. Detecting the changes of wood properties with respect to elapsed years since wood formation by the eigenvalue distribution of near infrared spectral matrices. **Journal of Wood Science**, v. 69, n. 1, p. 3, 2023.

GOMES, Jhenyfer Nayara Nogueira et al. Estimation of energy properties of wood from Brazilian Cerrado biome by NIR spectroscopy. **Journal of the Indian Academy of Wood Science**, p. 1-10, 2024a.

GOMES, Jhenyfer Nayara Nogueira. **Transferência de calibração para identificação de madeiras tropicais por espectroscopia NIR independente da umidade**. 2024. Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia da Madeira) - Universidade Federal de Lavras, Lavras, 2024.

GRISANTI, Emily et al. Dynamic localized SNV, Peak SNV, and partial peak SNV: Novel standardization methods for preprocessing of spectroscopic data used in predictive modeling. **Journal of Spectroscopy**, v. 2018, n. 1, p. 5037572, 2018.

HEIM, Lucie et al. NIR-hyperspectral camera analyses for differencing agroforestry and forestry poplar woods. **Agroforestry Systems**, v. 97, n. 8, p. 1557-1569, 2021.

HODGE, Gary R. et al. Global near infrared spectroscopy models to predict wood chemical properties of Eucalyptus. **Journal of Near Infrared Spectroscopy**, v. 26, n. 2, p. 117-132, 2018.

HWANG, Sung-Wook et al. NIR-chemometric approaches for evaluating carbonization characteristics of hydrothermally carbonized lignin. **Scientific Reports**, v. 11, n. 1, p. 16979, 2021.

IBÁ, RELATÓRIO ANUAL. Indústria Brasileira de Árvores. Relatório Anual de 2024. Disponível em :iba.org/datafiles/publicacoes/relatorios/relatorio2024.pdf

LIU, Tiantian et al. Prediction model of the hardness of waterlogged archaeological wood based on NIR spectroscopy. **Heritage Science**, v. 11, n. 1, p. 215, 2023.

LOUREIRO, Breno Assis et al. NIR-based models for estimating selected physical and chemical wood properties from fast-growing plantations. **iForest-Biogeosciences and Forestry**, v. 15, n. 5, p. 372, 2022.

LUAN, Qifu et al. Prediction and comparisons of turpentine content in slash pine at different slope positions using near-infrared spectroscopy. **Plants**, v. 11, n. 7, p. 914, 2022.

MA, Lijuan et al. Systematic discovery about NIR spectral assignment from chemical structural property to natural chemical compounds. **Scientific reports**, v. 9, n. 1, p. 9503, 2019.

MANCINI, Luana Teixeira et al. Estimation of total extractive content of wood from planted and native forests by near infrared spectroscopy. **iForest-Biogeosciences and Forestry**, v. 14, n. 1, p. 18, 2021.

MARTINS, José Antonio et al. NIR Associado à Quimiometria: Uma Poderosa Ferramenta Analítica. **Prospectus** (ISSN: 2674-8576), v. 5, n. 2, p. 15-48, 2023.

MEDEIROS, Dayane Targino et al. Estimation of the basic density of Eucalyptus grandis wood chips at different moisture levels using benchtop and handheld NIR instruments. **Industrial Crops and Products**, v. 209, p. 117921, 2024.

MIRANDA, E. E. et al. **A revelação do eucalipto: poucos consumidores sabem da presença de celulose de eucalipto em sorvetes, biscoitos, hambúrgueres, queijos, ketchup e sopas.** 2022.

MIRANDA, Leticia et al. Phenotyping wood properties of *Corymbia torelliana* x *Corymbia citriodora* and *Eucalyptus dunnii* based on NIR spectra. **Wood Material Science & Engineering**, v. 19, n. 1, p. 102-111, 2024.

MUÑIZ, Graciela Inês Bolzon de et al. Fundamentos e estado da arte da espectroscopia no infravermelho próximo no setor de base florestal. **Ciência Florestal**, v. 22, n. 4, p. 865-875, 2012.

MUNIZ, Fabiana Rezende et al. Qualidade da madeira de clones poliploides de eucalipto. **Revista O Papel**, v. 84, n. 10, p. 58-65, 2023.

NISA, LUK LU ATUN, et al. STRUCTURE OF CELLULOSE AND ITS USE; A REVIEW, **International Journal of Education and Social Science Research**, p (IJESSR) 5 (2): RAMOS54-67, 2022.

NUNES, Cleiton A. et al. Chemoface: a novel free user-friendly interface for chemometrics. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, v. 23, p. 2003-2010, 2012.

OLIVEIRA, E. B. et al. **O eucalipto e a Embrapa: quatro décadas de pesquisa e desenvolvimento**. 2021.

PAIVA, Donald L. et al. **Introdução À Espectroscopia: Tradução da 5ª Edição Americana**. 2015.

PARK, Se-Yeong et al. Classification of softwoods using wood extract information and near infrared spectroscopy. **BioResources**, v. 16, n. 3, 2021.

PASQUINI, Celio. ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO PRÓXIMO Fundamentos, Aspectos Práticos e Aplicações Analíticas. **Revista da Sociedade Brasileira de Química**, v. 14, p. 198-219, 2003.

PIMENTA, Emanuella Mesquita et al. Validation of models using near-infrared spectroscopy to estimate basic density and chemical composition of *Eucalyptus* wood. **iForest-Biogeosciences and Forestry**, v. 17, n. 6, p. 338, 2024.

RAMOS, Rafaella Dias et al. Influence of basic density and chemical composition of wood for the pulp industry: a case study. **Ciência Florestal**, v. 34, p. e85566, 2024.

RAO, Jun et al. Hemicellulose: Structure, chemical modification, and application. **Progress in Polymer Science**, v. 140, p. 101675, 2023.

RINNAN, Åsmund; VAN DEN BERG, Frans; ENGELSEN, Søren Balling. Review of the most common pre-processing techniques for near-infrared spectra. **TrAC Trends in Analytical Chemistry**, v. 28, n. 10, p. 1201-1222, 2009.

SAFANELLI, José L. et al. An interlaboratory comparison of mid-infrared spectra acquisition: Instruments and procedures matter. **Geoderma**, v. 440, p. 116724, 2023.

SANDAK, Jakub et al. Feasibility of portable NIR spectrometer for quality assurance in glue-laminated timber production. **Construction and Building Materials**, v. 308, p. 125026, 2021.

SANTOS, Vaniele Bento et al. Impact of age and genotype on the quality of eucalyptus wood for dissolving pulp. **Industrial Crops and Products**, v. 218, p. 118930, 2024a.

SANTOS, Vaniele Bento et al. Impact of age and genotype on the quality of eucalyptus wood for dissolving pulp. **Industrial Crops and Products**, v. 218, p. 118930, 2024b.

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

SETHUPATHY, Sivasamy et al. Lignin valorization: Status, challenges and opportunities. **Bioresource Technology**, v. 347, p. 126696, 2022.

SHAH, Tawaf Ali et al. Composition and role of lignin in biochemicals. In: Lignin-Chemistry, Structure, and Application. **IntechOpen**, 2022.

SHALINI, Wincent Anto Win; RAJALAKSHMI, Thulasi; SURYAKALA, Selvanayagam Vasanthadev. Refining thyroid function evaluation: a comparative study of preprocessing methods in diffuse reflectance spectroscopy. **International Journal of Electrical & Computer Engineering** (2088-8708), v. 15, n. 1, 2025.

SIMÕES, R. et al. Prediction of the extractives content of Eucalyptus globulus wood using NIR-based PLS-R models. Influence of spectral range and preprocessing on the percentage of outliers detected. **Journal of Wood Chemistry and Technology**, v. 42, n. 5, p. 352-360, 2022.

SOUZA, D. T.; ANDREANI, L.; VALADARES, L. F. **Celulose: pontos de vista**. 2015.

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

VIDAURRE, Graziela Baptista (Ed.). **Qualidade da madeira de eucalipto proveniente de plantações no Brasil**. EDUFES, 2022.

VIEIRA, Túlio Anselmo Sacramento et al. Determination of the chemical composition of Eucalyptus spp. for cellulosic pulp production. **Forests**, v. 12, n. 12, p. 1649, 2021.

XIAO, Qinlin et al. Spectral preprocessing combined with deep transfer learning to evaluate chlorophyll content in cotton leaves. **Plant Phenomics**, 2022.

YE, Rongke et al. NIR hyperspectral imaging technology combined with multivariate methods to identify shrimp freshness. **Applied Sciences**, v. 10, n. 16, p. 5498, 2020.

ZHANG, Yi; NAEBE, Maryam. Lignin: A review on structure, properties, and applications as a light-colored UV absorber. **ACS Sustainable Chemistry & Engineering**, v. 9, n. 4, p. 1427-1442, 2021.

ZHANG, Xiaoxue et al. Transfer of a calibration model for the prediction of lignin in pulpwood among four portable near infrared spectrometers. **Journal of Near Infrared Spectroscopy**, v. 30, n. 4, p. 208-218, 2022.