

IMPORTÂNCIA DA AMOSTRAGEM NO USO DA ESPECTROSCOPIA NIR PARA CARACTERIZAÇÃO DE MADEIRAS

Leonardo Chagas de Sousa^{1*}, José Lívio Gomide², Ricardo Balleirini dos Santos³

¹Estudante de Doutorado, ²Professor Titular, ³Estudante de Mestrado, Departamento de Engenharia Florestal, Universidade Federal de Viçosa, 36570-000 Viçosa - MG – Brasil

RESUMO

A espectroscopia no infravermelho próximo tem se mostrado uma ferramenta de grande utilidade para a indústria de base florestal, tendo um destaque especial na indústria de celulose e papel. Dentre os passos necessários para a obtenção de uma boa calibração, os cuidados com a amostragem representam fundamental importância. Efeitos como local, material genético, idade, dentre outros, quando desprezados, causam uma grande perda de precisão nos modelos gerados, fazendo com que gastos com análises químicas por via úmida sejam, muitas vezes, completamente desperdiçados. Outro fator a ser levado em conta é a necessidade de um estudo prévio dos espectros obtidos com o objetivo da seleção dos indivíduos mais representativos, evitando custos com análises químicas desnecessárias. Este estudo teve como objetivo mostrar a importância da amostragem na espectroscopia NIR aplicada à qualidade da madeira

Palavras chave: NIR, Amostragem, Madeira.

INTRODUÇÃO

Segundo PASQUINI (2003), a espectroscopia no infravermelho próximo é uma técnica analítica que emprega energias do fóton numa região de 2.65×10^{-19} a 7.96×10^{-20} a qual corresponde ao comprimento de onda de 750 a 2500nm. No infravermelho próximo, o NIR, as vibrações moleculares que resultam em transições harmônicas (overtones) são responsáveis pela absorção nesta região. Os comprimentos de onda nos quais estas vibrações ocorrem para um composto qualquer são funções de sua estrutura e composição. Portanto, o espectro de NIR pode ser utilizado para identificar espécies moleculares em complexas misturas químicas, como a madeira, e avaliar as proporções de diversos constituintes além das suas interações. Segundo WILLIAMS e NORRIS (2001), dentre as inúmeras vantagens que essa técnica apresenta destacam-se a rapidez de leitura (menos de um minuto por amostra) e a amostragem, que pode ser não destrutiva. Apesar das vantagens destacadas acima, a tecnologia NIR apresenta algumas desvantagens entre as quais pode-se destacar a necessidade de uma grande precisão na amostragem. Essa amostragem na maioria das vezes é dificultada

nas grandes empresas florestais devido à variabilidade de material genético, de locais e de idades dos indivíduos utilizados comercialmente. Para obtenção de um modelo suficientemente preciso para a predição nas diferentes condições das empresas, deve-se levar em conta todos os fatores citados acima.

ANÁLISES

A Figura 1 representa um material genético plantado em quatro locais diferente.

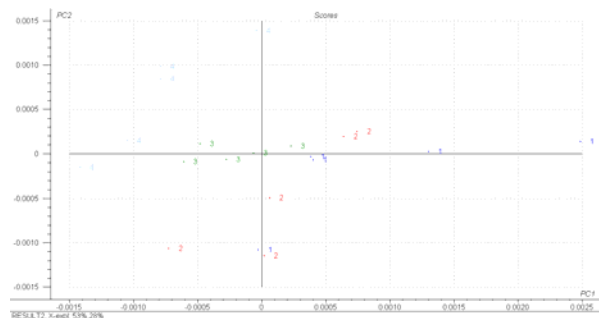


Figura 1 - Gráfico de “scores” da análise de PCA mostrando as diferenças entre locais.

Como pode se notado, o gráfico apresenta uma clara tendência de separação das amostras por local, que no gráfico foram codificados como 1, 2, 3 e 4. Isso indica que caso o modelo de calibração a ser desenvolvido não contemple todos esses locais, ele apresentará redução significativa de precisão na predição de uma amostra proveniente de um local não representado.

A Figura 2 representa vários materiais genéticos plantados em um local.

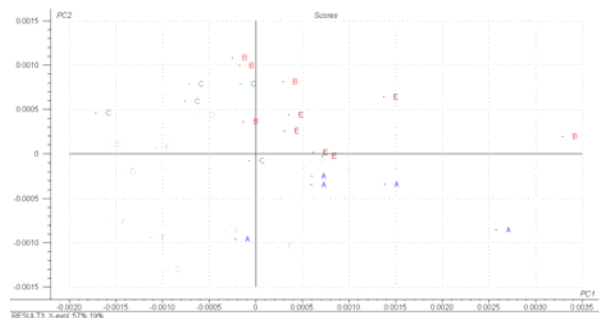


Figura 2 - Gráfico de “scores” da análise de PCA mostrando a diferença entre materiais genéticos.

Como pode ser observado, os materiais genéticos apresentaram tendência de agrupamento. Deste modo, para obter uma calibração eficiente deve-se levar em consideração os diferentes materiais genéticos presentes nas empresas. É claro que nem sempre é fácil ou possível realizar uma amostragem que

contemple todas as variações encontradas. Porém, deve-se tentar amostrar o máximo de materiais genético para que não comprometer a precisão dos modelos matemáticos. Outro fator muito importante para a obtenção de bons resultados para uma calibração NIR é a seleção prévia de amostras pela análise de seus espectros. Existem varias técnicas para esse tipo de seleção, porém uma que se mostra muito promissora é o algoritmo de Kennard-Stone. Esse algoritmo seleciona pelas distâncias entre os espectros quais amostras são realmente importantes para a calibração, evitando custos adicionais com análises químicas desnecessárias. Em estudo realizado com 100 amostras de madeira de *Eucalyptus* foi desenvolvido um modelo de calibração para o teor de lignina Klason. A seguir, foram selecionadas 80 amostras, pelo uso do algoritmo de Kennard-Stone, utilizando os 100 espectros iniciais e foi desenvolvido um novo modelo. As Figuras 3 e 4 mostram histogramas com os valores de lignina antes e depois da seleção.

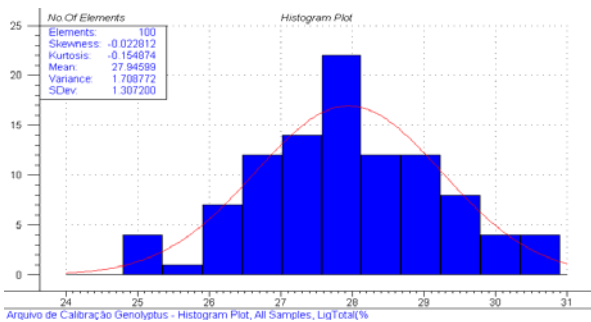


Figura 3 - Histograma do teor de lignina de 100 amostras antes da seleção.

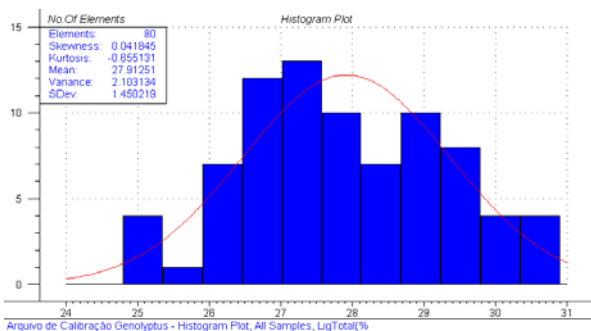


Figura 4 - Histograma do teor de lignina após seleção de 80 amostras.

Como pode ser observado nas figuras acima, a distribuição das observações em relação ao teor de lignina ficou muito mais uniforme após a seleção de amostras. Essa seleção utilizou os indivíduos que estavam em uma faixa com bastante representação, evitando análises químicas desnecessárias. Os novos modelos de predição desenvolvidos após a seleção apresentaram melhores correlações e melhores erros médios de predição, como mostrado as Figuras 5 e 6.

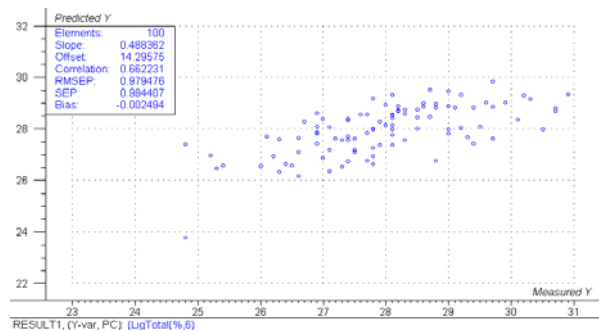


Figura 5 - Estatísticas do modelo de predição antes da seleção de amostras.

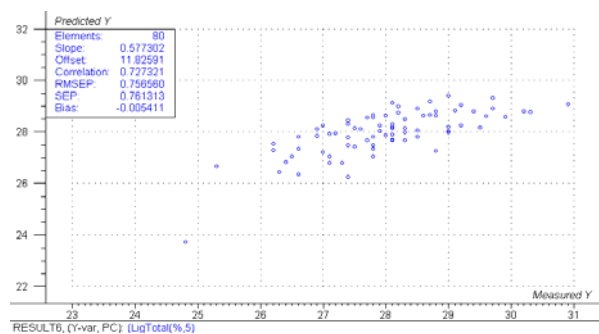


Figura 6 - Estatísticas do modelo de predição após a seleção de amostras.

O modelo desenvolvido antes da seleção de amostras apresentava correlação de 66% e RMSEP de 0,98% e foram necessários 6 componentes principais para explicar a variação do conjunto de dados. Para o modelo desenvolvido após a seleção de amostras, a correlação subiu para 73%, o RMSEP caiu para 0,76% e foram necessários 5 componentes para explicar a variação do conjunto de dados.

CONCLUSÕES

Os resultados descritos acima demonstram que para o desenvolvimento de modelos de calibração multivariada pela técnica NIRS deve-se considerar toda a variabilidade da floresta a ser predita. Essa variabilidade é causada principalmente por fatores relacionados ao local e características genéticas do material a ser estudado. Outro aspecto de grande importância é a utilização de técnicas de seleção de amostras, pois estas diminuem substancialmente o custo com análises químicas convencionais e melhoram a qualidade dos modelos desenvolvidos.

REFERÊNCIAS

1. PASQUINI, C. Near Infrared Spectroscopy: Fundamentals, Practical Aspects and Analytical Applications. **J. Braz. Chem. Soc.**, Vol. 14, No. 2, 198-219, 2003
2. WILLIAMS, P., NORRIS, K., **Near-Infrared Technology**, 2nd ed., American Association of Cereal Chemistry, Inc.: St. Paul, MN, USA, 2001.
3. SOUSA, L. C.; GOMIDE, J.L.; COLODETTE, J. L. Caracterização da qualidade da madeira por espectroscopia no infravermelho próximo. A experiência da UFV no projeto Genolyptus . **Proc. 38th Pulp and Paper Annual Meeting**, ABTCP 2005, São Paulo, Brasil.